

Crescimento de Superfícies Geradas por  
Modelos Magnéticos de Spins na Rede Quadrada

ALEXANDRE FAISSAL BRITO

Julho - 2009

# **Livros Grátis**

<http://www.livrosgratis.com.br>

Milhares de livros grátis para download.

**CRESCIMENTO DE SUPERFÍCIES GERADAS POR MODELOS  
MAGNÉTICOS DE SPINS NA REDE QUADRADA**

ALEXANDRE FAISSAL BRITO

Orientador: João Antônio Plascak (UFMG)

Co-Orientador: José Arnaldo Redinz (UFV)

Tese apresentada à UNIVERSIDADE FEDERAL DE MINAS GERAIS como  
requisito parcial para a obtenção do grau de Doutor em Física.

Julho - 2009

Aos meus pais,  
José Vasco de Brito †  
Maria do Carmo de Brito

# Agradecimentos

- Aos meus pais, José Vasco de Brito † e Maria do Carmo de Brito, pelos incentivos e orientações nos difíceis caminhos dessa vida.
- À minha Tia Cristina.
- Aos professores José Arnaldo Redinz e João Antônio Plascak, pela orientação, paciência e valiosa amizade.
- À CNPQ, pela bolsa concedida.
- Aos colegas da república Slade Hammer.
- Aos amigos distantes mas sempre próximos, Miquita, Damião, Mário, Magneto, Hallan, Nemésio e Lauro.
- À Alessandra e Mateus Faissal pela dedicação, companheirismo e compreensão.
- À toda a minha família, pelo apoio dado.

# Resumo

Apresentamos nesse trabalho uma análise do crescimento de superfícies obtidas através das configurações dos spins de alguns sistemas clássicos em Mecânica Estatística em uma rede quadrada, especificamente o modelo de Potts com  $q$  estados, o modelo de Blume-Capel de spin  $S = 1$ , o modelo do Relógio com  $p$  estados e o modelo do Rotor Planar. Realizamos um estudo das transições de fases desses modelos usando o método de Monte Carlo, mapeando as configurações dos spins em um modelo de representação de interfaces chamado SOS (*solid – on – solid*). As transições de primeira e segunda ordem, o ponto tricrítico, e a transição de Berezinski-Kosterlitz-Thouless (*BKT*) são relevantes na cinética do crescimento dessas superfícies. Na fase de baixa e alta temperatura a rugosidade  $W$  cresce indefinidamente com o tempo, com o expoente de crescimento  $\beta_W \simeq 1/2$  ( $W \sim t^\beta$ ). Na criticalidade o crescimento apresenta uma mudança de comportamento em um tempo característico  $t_c$ , a partir de um regime correlacionado ( $\beta_W \neq 1/2$ ) para um regime descorrelacionado ( $\beta_W \simeq 1/2$ ). Nós também calculamos o expoente de Hurst  $H$  das superfícies. Na criticalidade,  $\beta_W$  e  $H$  tem valores característicos de um crescimento correlacionado, distinguindo assim transição de segunda e primeira ordem. Foi mostrado também que a relação de Family-Vicsek para os expoentes de enrugamento é válida para a rugosidade sem ruído com uma escala anômala. Com a presente técnica é possível confirmar para o modelo de Relógio  $p \geq 5$  a classe de universalidade estendida para a transição *BKT*.

# Abstract

We present an analysis of mapped surfaces obtained from configurations of some classical statistical-mechanical spin models in the square lattice, namely the  $q$ -state Potts model, the spin-1 Blume-Capel model, the  $p$  state Clock model and the Planar Rotator model. We carry out a study of the phase transitions in these models using the Monte Carlo method and a mapping of the spin configurations to a solid-on-solid growth model. The first and second-order phase transitions, the tricritical point and the Berezinski-Kosterlitz-Thoules (BKT) transition happen to be relevant in the kinetic roughening of the surface growth process. At the low and high temperature phases the roughness  $W$  grows indefinitely with the time, with growth exponent  $\beta_w \simeq 1/2$  ( $W \sim t^{\beta_w}$ ). At criticality, the growth presents a crossover at a characteristic time  $t_c$ , from a correlated regime (with  $\beta_w \neq 1/2$ ) to an uncorrelated one ( $\beta_w \simeq 1/2$ ). We also calculate the Hurst exponent  $H$  of the corresponding surfaces. At criticality,  $\beta_w$  and  $H$  have values characteristic of correlated growth, distinguishing second from first-order phase transitions. It has also been shown that the Family-Vicsek relation for the growth exponents also holds for the noise-reduced roughness with an anomalous scaling. From the present approach it is possible to corroborate the BKT extended universality class for the  $p \geq 5$  Clock model.

# Sumário

<b>Agradecimentos</b>	<b>iv</b>
<b>Resumo</b>	<b>v</b>
<b>Abstract</b>	<b>vi</b>
<b>1 Introdução</b>	<b>1</b>
<b>2 Modelos Magnéticos Estudados</b>	<b>7</b>
2.1 Modelo de Ising com $S = 1/2$ . . . . .	7
2.2 Modelo de Potts com $q$ estados . . . . .	11
2.3 Modelo de Blume-Capel . . . . .	12
2.4 Modelo do Rotor Planar . . . . .	15
2.5 Modelo do Relógio com $p$ estados . . . . .	16
<b>3 Técnicas de Simulação</b>	<b>21</b>
3.1 Método Monte Carlo . . . . .	21
3.1.1 Algoritmo de Metropolis . . . . .	24
3.1.2 Algoritmo de Banho Térmico . . . . .	26
<b>4 Formalismo do Crescimento de Superfícies</b>	<b>30</b>
4.1 Expoente de Crescimento $\beta_W$ . . . . .	33
4.2 Expoente da Rugosidade $\alpha$ . . . . .	33
4.3 Expoente Dinâmico $z_W$ . . . . .	34



---

4.4	Expoente de Hurst $H$ . . . . .	34
4.5	Lei de Escala . . . . .	35
4.6	Relação entre expoentes termodinâmicos ( $\beta$ , $\nu$ e $z$ ) e de crescimento $\beta_W$ . . . . .	38
<b>5</b>	<b>Mapeamento dos Estados de Spins em Superfícies</b>	<b>42</b>
5.1	Mapeamento para Spins Discretos . . . . .	42
5.2	Mapeamento para Spins Contínuos . . . . .	44
<b>6</b>	<b>Modelos de Potts e Blume-Capel</b>	<b>47</b>
6.1	Resultados para os Modelos de Potts e Blume-Capel . . . . .	48
6.1.1	Expoente de Hurst $H$ e Comprimento Característico $\varepsilon^*$ . . . . .	49
6.1.2	Expoente de Crescimento $\beta_W$ . . . . .	52
6.1.3	Diagrama de Fases . . . . .	59
6.1.4	Flutuações Guassianas e Relação de Escala de Family-Vicsek . . . . .	63
<b>7</b>	<b>Modelos Rotor Planar e Relógio</b>	<b>66</b>
7.1	Resultados para o Modelo Rotor Planar . . . . .	66
7.1.1	Temperatura de Transição $T_{BKT}$ . . . . .	67
7.2	Resultados para o Modelo de Relógio com $p$ estados . . . . .	71
7.2.1	Expoente de Crescimento $\beta_W$ . . . . .	71
7.2.2	Temperaturas de Transição $T_1$ , $T_2$ e $T_{BKT}$ . . . . .	75
7.3	Rugosidade sem Ruído $W^*$ e Lei de Escala . . . . .	80
7.4	Diagrama de Fases . . . . .	85
7.5	Modelo do Relógio com $p = 5$ . . . . .	87
<b>8</b>	<b>Conclusões</b>	<b>90</b>
8.1	Modelos de Potts e Blume-Capel . . . . .	90
8.2	Modelos Rotor Planar e Relógio . . . . .	91
8.3	Comentários Finais . . . . .	92

# Capítulo 1

## Introdução

Um dos fenômenos mais interessantes da Física da Matéria Condensada é o ferromagnetismo [1]. Em alguns metais, como por exemplo Fe e Ni, na ausência de campo magnético externo, uma fração finita dos átomos orientam seus momentos magnéticos (“spins”) em uma mesma direção, resultando em um momento de dipolo magnético (magnetização) macroscópico. Mas isso só acontece para temperaturas menores que uma temperatura crítica  $T_c$ , acima da qual os spins se orientam aleatoriamente e a magnetização resultante é nula. Dizemos, então, que o material “sofre” uma transição de fases na temperatura  $T_c$  (no caso, de uma fase ferromagnética, ordenada, para uma fase paramagnética, dita desordenada).

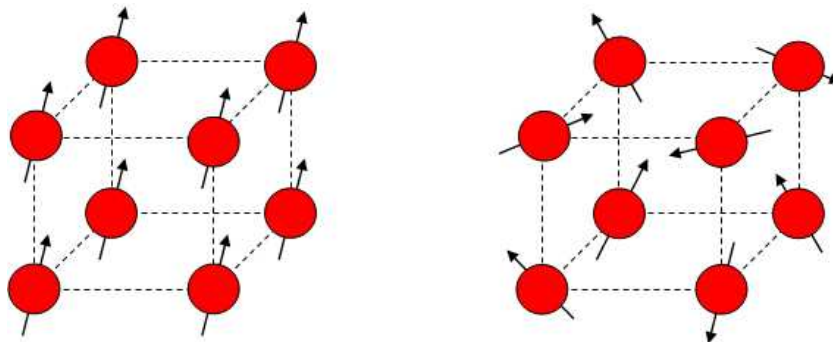


Figura 1.1: Esquema ilustrativo mostrando a orientação dos spins na fase ferromagnética (esquerda) e na fase paramagnética (direita) em uma rede cúbica simples.

---

A Figura 1.1 mostra um esquema ilustrativo com a orientação dos spins nas duas fases.

Transições de fases não ocorrem somente em sistemas magnéticos e são, de fato, até muito frequentes em nosso cotidiano. Podemos citar a transição água-gelo (solidificação) e sua inversa gelo-água (fusão), muito corriqueiras em nossas geladeiras. Nesse exemplo, na temperatura em que ocorre essa transição temos a coexistência dessas duas fases, isto é, sólida e líquida. Na transição água-vapor (vaporização) ou vapor-água (condensação) também ocorre a coexistência das duas fases (líquida-gás), bem como, na transição gelo-gás (sublimação) ou gás-gelo. Para a água, assim como para várias substâncias simples, além das transições com coexistência de duas fases, existe também uma temperatura muito bem definida com a coexistência dessas três fases (sólido-líquido-gás), chamada de temperatura de ponto triplo  $T^3$ . É interessante também notar que a linha de transição onde coexistem as fases líquida e gasosa termina num ponto chamado de ponto crítico, muito semelhante ao ponto crítico magnético. Nesse ponto as duas fases tornam-se idênticas. Chama-se então transição de primeira ordem onde ocorre coexistência de fases e o aparecimento de uma descontinuidade nas variáveis extensivas como volume e entropia, por exemplo, e transição de segunda ordem, ou contínua, no ponto crítico.

Uma transição de fases em um sistema é acompanhada por singularidades nas suas funções termodinâmicas [2, 3, 4]. A singularidade ocorre no potencial termodinâmico (energia livre) e derivadas correspondentes como magnetização e susceptibilidade em magnetos, e densidade e compressibilidade em fluidos. Nos casos mais simples, estas singularidades ocorrem para valores críticos bem definidos dos parâmetros externos. Para os ferromagnetos simples, os parâmetros externos relevantes são temperatura e campo magnético, enquanto que para fluidos simples temos a temperatura e pressão.

O parâmetro de ordem, que em sistemas magnéticos é a magnetização do

---

sistema e em fluidos pode ser definido como a diferença entre as densidades do líquido e do gás, é uma quantidade que é não nula na fase dita ordenada (baixas temperaturas) e nula na fase dita desordenada (altas temperaturas). Esse parâmetro de ordem é singular (o que não implica em divergência) na temperatura crítica  $T_c$ , que divide o eixo  $T$  em duas fases distintas.

Uma transição de primeira ordem, como comentado acima, pode ainda ser caracterizada pela descontinuidade do parâmetro de ordem (além das outras variáveis extensivas), enquanto que para uma transição de segunda ordem esse parâmetro de ordem vai a zero continuamente quando a temperatura se aproxima de  $T_c$  por valores inferiores, isto é,  $T \rightarrow T_c^-$ . No primeiro caso, tem-se coexistência de duas fases distintas (ordenada e desordenada) no ponto de transição, semelhante ao fenômeno de ebulição da água a  $100^\circ C$  e pressão de 1 atmosfera, no qual as fases líquido e gás ocorrem ao mesmo tempo em pontos diversos da amostra. No segundo caso, a fase ordenada se transforma continuamente na fase desordenada de alta temperatura quando  $T = T_c$ ; aqui a fase ordenada se torna indistinguível daquela desordenada porque as flutuações do parâmetro de ordem ocorrem em todas as escalas de distância quando o sistema se aproxima do ponto crítico. Em uma transição de primeira ordem, as flutuações terão um alcance finito.

Existem vários modelos teóricos que se aplicam muito bem a sistemas magnéticos reais, como por exemplo, os modelos de Ising, Heisenberg, XY, Potts com  $q$  estados e Blume-Capel com Spin  $S$ , dentre outros. Dependendo da dimensão do sistema, estes modelos têm ou não solução exata conhecida. Sendo que, na maioria dos casos, eles só podem ser estudados via simulação computacional ou através de aproximações analíticas. No caso específico do modelo de Ising com spin  $S = 1/2$ , em uma rede quadrada com interação entre primeiros vizinhos, ocorre uma transição de fases em uma certa temperatura crítica ( $T_c$ ), em que o sistema passa de uma fase ferromagnética (sistema magnetizado) para uma fase paramagnética (sistema desmagnetizado). Já no caso unidimensional, o modelo de Ising com spin

---

$S = 1/2$  não apresenta transição de fases para uma temperatura  $T_c \neq 0$ . Na rede cúbica esse modelo não apresenta ainda solução exata. Estes modelos são de grande importância tanto do ponto de vista teórico como experimental. Os seus diagramas de fases são muito ricos, como será visto nos capítulos seguintes, com transições de primeira e segunda ordem, pontos multicríticos, transição do tipo Berezinskii-Kosterlitz-Thouless (*BKT*) [5, 6], etc.

Outros sistemas dinâmicos, não necessariamente associados ao magnetismo, também apresentam transições de fases, como por exemplo, o automato celular de Domany-Kinzel (ACDK), que em uma dimensão apresenta uma transição de segunda ordem [7], na qual o sistema passa de uma fase congelada (todos os sítios vazios) para uma fase ativa (sítios parcialmente ocupados). Existem também os sistemas dinâmicos de crescimento e superfícies, onde o estudo da rugosidade em função do tempo é de grande interesse pois sua caracterização é fortemente dependente de certos expoentes dinâmicos fora do equilíbrio.

Neste trabalho iremos caracterizar transições de fases de primeira e segunda ordem, transições multicríticas e do tipo Berezinskii-Kosterlitz-Thouless em sistemas magnéticos através de simulações de Monte Carlo. Mais especificamente, usaremos dois algoritmos padrões neste tipo de simulação, Metropolis e Banho Térmico. Vamos utilizar uma técnica de mapeamento das configurações dos modelos de Potts com  $q$  estados (com  $q \leq 10$ ), Blume-Capel com spin  $S = 1$ , Relógio com  $p$  estados, e Rotor Planar em modelos de crescimento de superfícies. Nós escolhemos esses modelos para aplicar o método de expoentes de crescimento porque eles são protótipos em mecânica estatística e exibem todos os tipos de transições mencionadas acima. Embora esses modelos tenham sido propostos inicialmente como modelos de spins em sistemas ferromagnéticos, hoje em dia eles tem sido aplicados em diversos fenômenos, como por exemplo, evaporação/congelamento de líquidos [9], desdobramento de proteínas [8], redes sociais [10, 11], redes neurais [12, 13], caos [14], etc. Então os resultados

---

apresentados nesse trabalho podem ser valiosos para investigações futuras nestes fenômenos.

O crescimento de interfaces em processos fora do equilíbrio tem sido amplamente estudado em Física Estatística, em especial nos modelos de crescimento tais como agregação limitada por difusão (ALD), deposição balística, deposição aleatória, agregação balística, dentre outros [15, 16]. Esses modelos geram uma superfície e através do estudo do comportamento da rugosidade  $W$  são definidos os expoentes que caracterizam este crescimento. São eles: o expoente de crescimento  $\beta_W$ , o expoente dinâmico  $z_W$ , o expoente da rugosidade  $\alpha$  e o expoente de Hurst  $H$ , que definiremos ao longo do nosso trabalho.

O expoente de Hurst  $H$ , por exemplo, é uma das ferramentas padrão para descrever vários processos rugosos observados na área de superfícies desordenadas [15, 17, 18], tais como sequências de DNA, sinais cardíacos, sinais respiratórios e pulsos neurais.

Nos últimos anos [19, 20], foram caracterizadas as classes dos autômatos celulares de Wolfram através do expoente da rugosidade  $\alpha$ . Essa caracterização foi feita através de um mapeamento dos estados, que poderiam estar ocupados ( $\sigma = 1$ ) ou vazios ( $\sigma = 0$ ) em uma deposição de partículas do tipo SOS (do inglês Solid-on-Solid) [15]. Atman e colaboradores [21, 22] também mostraram, através desta técnica de mapeamento, que o expoente de crescimento  $\beta$  pode ser usado para detectar a transição de fase do autômato celular de Domany-Kinzel (ACDK).

O estudo de transições de fase em sistemas magnéticos através dessa técnica de mapeamento, tem sido pouco explorado até agora. Recentemente, foi proposto [23] que as transições de fases em alguns modelos magnéticos (Ising, Potts e Relógio) na rede quadrada podem ser investigadas (“detectadas”) através do comportamento do expoente de Hurst. Mostramos [24] que no modelo de Ising unidimensional com interação de longo alcance existe uma super-rugosidade ( $\alpha > H > 1$ ) na transição de fases do modelo. Uma característica marcante dessa técnica baseada

em mapeamentos e nos expoentes da rugosidade para caracterizar transições de fases em sistemas magnéticos é que em momento algum se faz referência ao cálculo dos potenciais e funções termodinâmicas usuais.

A motivação para o presente trabalho surgiu justamente da idéia de unir duas áreas tão distintas, magnetismo e crescimento de superfícies, e através das técnicas da segunda poder determinar propriedades da primeira, como por exemplo, diagrama de fases e alguns expoentes críticos. Convém ainda ressaltar que enquanto o modelo magnético é tratado no equilíbrio, a sua superfície gerada corresponde a um problema fora do equilíbrio, com expoentes críticos dinâmicos bem definidos.

O restante do manuscrito encontra-se na ordem a seguir. No capítulo 2 vamos discutir os modelos de Potts com  $q$  estados, Blume-Capel spin  $S = 1$ , Relógio com  $p$  estados e XY bidimensional (Rotor Planar). As técnicas de simulação que serão utilizadas neste trabalho, o método Monte Carlo, e os algoritmos de Metropolis e Banho Térmico, são brevemente descritas no Capítulo 3. No capítulo 4 vamos estudar o formalismo usado para calcular os expoentes da rugosidade em modelos de crescimento e encontrar uma relação entre esses expoentes geométricos com os expoentes críticos termodinâmicos. A definição de como realizar o mapeamento de modelos magnéticos em crescimento de superfícies para os diversos sistemas estudados será apresentada no Capítulo 5. O Capítulo 6 é dedicado à apresentação dos resultados obtidos para dois modelos com estados discretos de spins, o modelo de Potts e o modelo de Blume-Capel. Os resultados para um modelo com spin contínuo, especificamente o modelo Rotor Planar em duas dimensões, e para o modelo de Relógio com  $p$  estados (que, no limite  $p \rightarrow \infty$ , se torna o Rotor Planar) são discutidos no Capítulo 7. No capítulo 8 apresentamos nossas conclusões e perspectivas.

## Capítulo 2

# Modelos Magnéticos Estudados

Neste trabalho iremos fazer um estudo de modelos magnéticos com estados de spins discretos e contínuos através da caracterização das superfícies geradas por mapeamentos de suas configurações. Nesse capítulo descrevemos brevemente os modelos magnéticos estudados, a saber, o modelo de Ising com  $S = 1/2$ , Potts com  $q$  estados, Blume Capel com spin  $S = 1$ , Relógio com  $p$  estados e Rotor Planar. São modelos simples de estados discretos e contínuos, porém possuem diagramas de fases ricos com presença de transições de fases de primeira e segunda ordem, bem como pontos multicríticos e transição do tipo *BKT*.

### 2.1 Modelo de Ising com $S = 1/2$

Para simular as substâncias ferromagnéticas (uniaxiais), um dos modelos mais simples é o de Ising. O sistema considerado é um conjunto de momentos magnéticos fixos nos  $N$  sítios de uma rede. A estrutura geométrica da rede pode ser, por exemplo, cúbica (tridimensional), quadrada (bidimensional) ou linear (unidimensional). Associado a cada sítio na rede está uma variável de spin  $\sigma_i$  ( $i = 1, 2, \dots, N$ ), que pode assumir os estados  $+1$  ou  $-1$ . Se  $\sigma_i = +1$ , o  $i$ ésimo spin é dito ter spin "para cima", e se  $\sigma_i = -1$  é dito ter spin "para baixo". Um dado



conjunto  $\{\sigma_i\}$  especifica a configuração de todo o sistema, ou seja, seu microestado. A energia de uma dada configuração de spins  $\{\sigma_i\}$  é definida pela Hamiltoniana de Ising [4]

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j - h \sum_{i=1}^N \sigma_i \quad (2.1)$$

em que o símbolo  $\langle ij \rangle$  significa que a soma é sobre todos os pares de spins primeiros vizinhos da rede,  $h$  é um campo magnético externo e  $J$  é a constante de acoplamento ferromagnético. O primeiro termo da soma representa as energias de interação que devem ser capazes de produzir um estado ferromagnético ordenado (quando  $J > 0$ ). O segundo termo envolve as interações entre um campo externo aplicado  $h$  e o sistema de spins.

O modelo de Ising pode ser aplicado no estudo de outros sistemas que apresentam dois estados e as variáveis de spin do modelo podem ser interpretadas de diversas maneiras. Por exemplo,

- Como uma indicação de que um sítio pode estar ocupado por um átomo do tipo A, ou por um átomo do tipo B, como em uma liga binária do tipo AB (vizinhos iguais contribuem com uma energia  $-J$ ; vizinhos distintos, com uma energia  $+J$ ).
- Como um número de ocupação que assinala a presença ou ausência de uma molécula em uma determinada célula de um “gás de rede”.

Essa multiplicidade de interpretações já indica o grande potencial de aplicação do modelo, capaz de captar os aspectos essenciais do comportamento de vários sistemas físicos.

Este modelo é usado como base para a maior parte das discussões sobre simulação em física estatística, por várias razões:

- É um modelo simples;

- É relevante para uma variedade de outros sistemas ligados a teoria de fenômenos críticos e transições de fases;
- Existem soluções analíticas exatas para alguns casos;
- É um exemplo clássico de aplicação do método Monte Carlo;

Podemos fazer a seguinte análise para o modelo de Ising com interação entre primeiros vizinhos, para dimensão maior ou igual a dois:

Temperatura baixa ( $T \rightarrow 0$ )

- $\Rightarrow$  baixa energia
- $\Rightarrow$  spins alinhados entre si
- $\Rightarrow$  alta magnetização

Temperatura alta ( $k_B T \gg J$ )

- $\Rightarrow$  alta energia
- $\Rightarrow$  spins orientados aleatoriamente
- $\Rightarrow$  baixa magnetização

Assim, para baixas temperaturas e altas temperaturas o comportamento do modelo de Ising é o mesmo de um ferromagneto real.

O modelo inicial elaborado por Ernest Ising [27] (veja também Kobe [28]) era bem simples, uma cadeia linear de momentos magnéticos  $\sigma_i$  interagindo com seus vizinhos  $\sigma_{i+1}$  e  $\sigma_{i-1}$  com um hamiltoniano na forma  $-J\sigma_i(\sigma_{i+1} + \sigma_{i-1})$ . Para  $J > 0$  o alinhamento paralelo dos momentos é favorecido, o que compete com a temperatura. Dessa competição era esperada uma temperatura crítica abaixo da qual haveria ordenamento de uma quantidade macroscópica ( $\sim L$ ) de spins. Para frustração de Ising, a solução exata desse modelo não apresentou transição de fases a uma temperatura  $T_c \neq 0$ .

O fracasso desse modelo era um tanto estranho, pois a idéia central era muito boa, interação de momentos magnéticos localizados em uma rede. Como já sabemos

o resultado obtido por Ising estava correto, o seu erro foi ter generalizado para duas ou mais dimensões esse resultado.

Na década de 30, Heisenberg [4] propôs um modelo em que os momentos de spins  $\sigma_i$  do modelo de Ising eram operadores quânticos  $\vec{\sigma}_i$ , mas muitas vezes as complicações eram tantas que tínhamos que retornar a técnicas mais simples como a teoria de campo médio (TCM) ou mais refinadas como a técnica de Monte Carlo.

Em 1936, Peierls [29] provou que para dimensões maiores ou igual a 2 existe uma temperatura crítica  $T_c$ , na qual o modelo de Ising sofre uma transição de fases. Ele não encontrou o valor de  $T_c$ , mas apenas provou que essa temperatura existia. Para dimensão igual a um, sua teoria provou não existir uma temperatura crítica  $T_c \neq 0$ , na qual o sistema muda de fase.

Em 1944, Onsager [30] resolveu exatamente o modelo de Ising bidimensional na rede quadrada na ausência de campo magnético externo, mostrando que ele tem uma transição de fase ferromagnética. Ele encontrou expressões exatas para a função de partição, energia média e calor específico. Por esse motivo o modelo de Ising é de fundamental importância para a física estatística, pois a partir da solução exata podemos compará-las aos resultados obtidos por outras abordagens mais gerais, muitas vezes aproximadas, mas que podem ser aplicadas em modelos mais realistas.

Para modelos com dimensão maior que dois, só existem soluções analíticas aproximadas (expansão em série, por exemplo) e soluções via simulações Monte Carlo.

Existem, entretanto, vários métodos para estudar o modelo de Ising (bem como outros mais gerais), dos quais são citados abaixo:

- Métodos analíticos: como por exemplo a teoria de campo médio (TCM), são bons para o entendimento da física básica, mas frequentemente falham na região de interesse, ou seja, na transição de fase. Outro método analítico que

podemos citar é o Grupo de Renormalização, que diferente do TCM tem uma boa precisão e não falha na região de interesse, mas pode ser muito complexo do ponto de vista matemático.

- Métodos numéricos: como por exemplo o método Monte Carlo, são de abordagem computacional mais simples.

## 2.2 Modelo de Potts com $q$ estados

O modelo de Potts com  $q$  estados ferromagnético [31] é um sistema clássico muito interessante, tanto do ponto de vista teórico como experimental, pois tem aplicações tanto na Física Estatística quanto em outras áreas, como por exemplo, sistemas de adesão celular [32, 33], modelos de espumas [34], dentre outros. O modelo consiste em variáveis de spin  $\sigma_i$  em uma rede que podem assumir  $q$  valores discretos  $\sigma_i = 0, 1, \dots, (q - 1)$ . A hamiltoniana do modelo é dada por

$$\mathcal{H}_P = -J \sum_{\langle ij \rangle} \delta_{\sigma_i, \sigma_j}, \quad (2.2)$$

onde  $\delta_{\sigma_i, \sigma_j}$  é a função delta de Kronecker ( $\delta_{\sigma_i, \sigma_j} = 1$  quando  $\sigma_i = \sigma_j$  e  $\delta_{\sigma_i, \sigma_j} = 0$  quando  $\sigma_i \neq \sigma_j$ ), a soma é realizada sobre todos os primeiros vizinhos da rede,  $J > 0$  (sistema ferromagnético) é a constante de acoplamento.

No limite termodinâmico na rede quadrada, o modelo de Potts com  $q$  estados apresenta uma transição de fases de segunda ordem para  $q \leq 4$ , e de primeira ordem para  $q > 4$ . As transições de primeira ordem para  $q$  próximo de  $q = 4$ , por exemplo,  $q = 5$ , ainda apresentam um forte caráter de segunda ordem, porque o comprimento de correlação no ponto crítico ainda é muito grande. Por exemplo, como mostrado na ref. [35], para  $q = 5$ , o comprimento de correlação é da ordem de 2000 espaçamentos de rede, sendo assim possível calcular os pseudo-exponentes críticos  $\beta$  e  $\nu$ , apesar de ser uma transição de fase de primeira ordem. Para  $q = 2$

o modelo de Potts se reduz ao modelo de Ising com spin  $S = 1/2$ , então a equação (2.2) pode ser reescrita como

$$\mathcal{H}_{\mathcal{P}} = -\frac{J}{2} \sum_{\langle ij \rangle} 2 \left( \delta_{\sigma_i, \sigma_j} - \frac{1}{2} \right) - \frac{1}{2} \sum_{\langle ij \rangle} J. \quad (2.3)$$

O primeiro termo do Hamiltoniano vale  $+1$  se  $\sigma_i = \sigma_j$  e  $-1$  se  $\sigma_i \neq \sigma_j$ , como no modelo de Ising com spin  $S = 1/2$ , o segundo termo é constante e portanto não altera os resultados. Observe que aparece um termo  $J/2$  no Hamiltoniano e não  $J$  como na equação (2.2), o que implica que a temperatura crítica para o modelo de Potts  $q = 2$  vai ser  $T_c = 1.13 = T_c^{Ising}/2$ . No caso geral as temperaturas críticas reduzidas são dadas por [36],

$$\frac{k_B T_C}{qJ} = \frac{1}{\ln(\sqrt{q} + 1)}, \quad (2.4)$$

enquanto que os expoentes críticos nas transições contínuas são dados por

$$\nu = \frac{2}{3} \left\{ 2 + \frac{\pi}{\arccos(\frac{1}{2}\sqrt{q} - \pi)} \right\}^{-1}, \quad (2.5)$$

$$\beta = \frac{1}{12} \left\{ 1 + \frac{2}{\pi} \arccos\left(\frac{\sqrt{q}}{2}\right) \right\}, \quad (2.6)$$

A eq. (2.4) é válida para qualquer valor de  $q$ , mas as eqs. (2.5) e (2.6) são válidas apenas para  $q \leq 4$ . Recentemente, Berche *et al* [37] usaram simulações de Monte Carlo e expansões em séries para obter os expoentes críticos termodinâmicos para  $q \leq 4$ .

## 2.3 Modelo de Blume-Capel

Nós consideramos também o modelo generalizado de Blume-Capel [38, 39] com spin  $S$  em uma rede quadrada. A hamiltoniana do modelo é dada por

$$\mathcal{H}_{BC} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j + D \sum_i^N \sigma_i^2, \quad (2.7)$$

onde  $D$  é uma constante de anisotropia,  $J$  é uma constante de acoplamento, a primeira soma é realizada apenas sobre os primeiros vizinhos e os spins  $\sigma_i$  podem assumir os valores  $-S, -S + 1, \dots, S - 1, S$ .

Para  $S = 1$ , em  $T = 0$  o sistema apresenta um ponto multifásico (ponto triplo) onde as três fases magnéticas coexistem, isto é, fases em que todos os spins estão no estado  $+1$ , ou no estado  $-1$ , ou no estado  $0$ . Esse ponto triplo pode ser obtido analiticamente, pois em  $T = 0$  os spins estão ou no estado  $+1$ , ou  $-1$  ou  $0$ . Então podemos calcular a energia livre por spin e por energia de interação  $J$ . Quando os spins estão no estado  $\sigma = 0$  a energia livre  $f_0 = 0$ , já para os spins nos estados  $\sigma = +1$  ou  $\sigma = -1$  temos o mesmo valor de energia,

$$\frac{f_{\pm 1}}{J} = -\frac{\Delta}{2} + \frac{D}{J}, \quad (2.8)$$

onde  $\Delta$  é o número de vizinhos da rede cristalina.

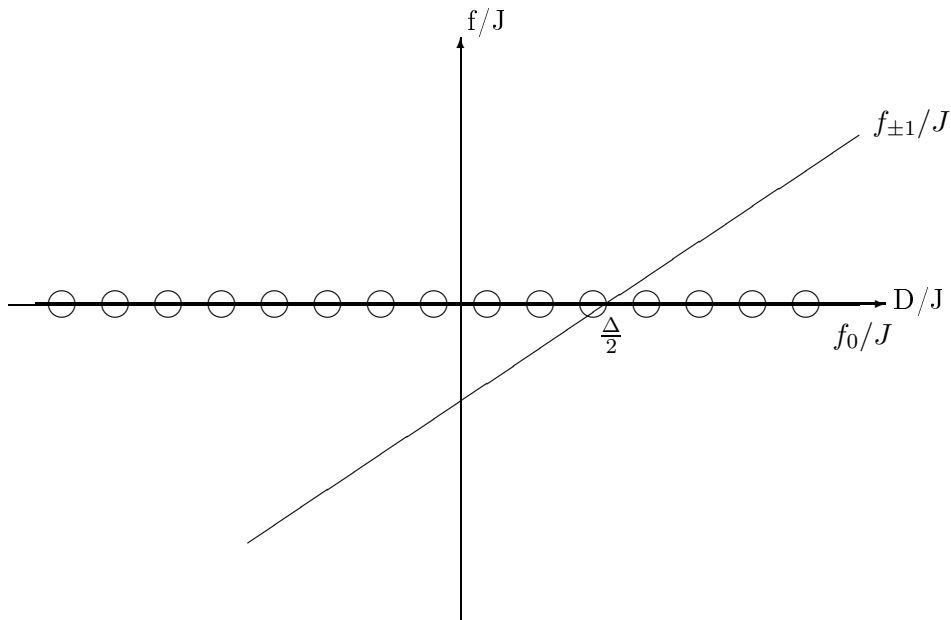


Figura 2.1: Esquema ilustrativo da energia livre por spin  $f/J$  em função da anisotropia de interação  $D/J$  para um sistema de com spin  $S = 1$ . A figura apresenta duas retas, onde o ponto de encontro determina duas regiões de mais baixa energia: à esquerda de  $\Delta/2$ , para  $f_{\pm 1}/J$ , e a direita de  $\Delta/2$ , para  $f_0/J$ .

A figura 2.1 mostra o comportamento da energia livre por spins  $f/J$  em função de  $D/J$ . Quando os spins estão todos no estado  $\sigma = 0$  a reta é constante e igual a zero (círculos vazios). Para os spins nos estados  $\sigma = \pm 1$  temos uma reta crescente com inclinação positiva que encontra com a reta  $f_0 = 0$  no ponto  $D/J = \Delta/2$ , onde ocorrem as três fases distintas. Então o sistema tem dois possíveis estados de baixa energia, a esquerda de  $\Delta/2$ , no estado  $\sigma = +1$  ou no estado  $\sigma = -1$  ou a direita de  $\Delta/2$ , no estado no estado  $\sigma = 0$ . Na figura 2.2 mostramos o diagrama de fases  $kT/J \times d$  do modelo de Blume-Capel com  $S = 1$ , com  $d = \frac{D}{J}$ .

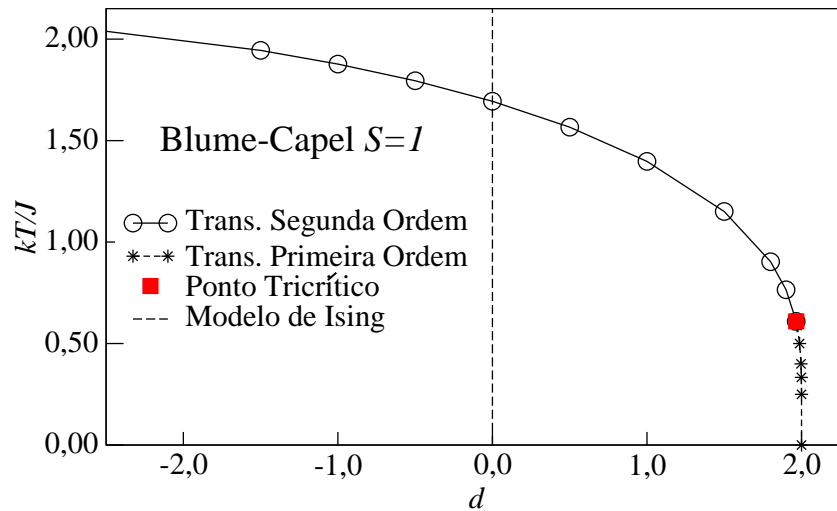


Figura 2.2: Diagrama de fases do modelo de Blume-Capel  $S = 1$ , os dados foram retirados da ref. [40].

A figura 2.2 mostra o diagrama de fases (retirado da ref. [40]) do modelo de Blume-Capel  $S = 1$ , que é muito rico do ponto de vista termodinâmico, pois existem linhas de transição de primeira e segunda ordem como também um ponto tricrítico. Na linha de transição de primeira ordem (pontilhada com estrelas) há coexistência das três fases, enquanto que no ponto tricrítico essas três fases são indistinguíveis.

Este modelo foi inicialmente proposto para  $S = 1$ , isto é,  $\sigma_i = 0, \pm 1$ , mas pode ser estendido a outros valores de spins  $S = 1/2$  ( $\sigma_i = \pm 1/2$ ),  $S = 3/2$  ( $\sigma_i = \pm 1/2, \pm 3/2$ ),  $S = 2$  ( $\sigma_i = \pm 2, \pm 1, 0$ ), e assim por diante. Quando  $D = 0$  na

equação (2.7) o modelo de Blume-Capel se reduz ao modelo de Ising padrão com spin  $S$ , que apresenta uma transição de fase de segunda ordem. Só existe solução exata para modelo de Blume-Capel  $S = 1$  para o caso unidimensional, para outras dimensões só existem soluções aproximadas ou via simulação. Trabalharemos com o caso em que  $S = 1$ , ou seja, os spins poderão ter apenas três estados  $\sigma_i = 0, \pm 1$ . Quando fazemos  $D \rightarrow -\infty$  na hamiltoniana (2.7) recuperamos o modelo de Ising  $S = 1/2$ .

## 2.4 Modelo do Rotor Planar

O modelo do Rotor Planar é um caso particular do modelo de Heisenberg anisotrópico clássico [45]. A grande diferença entre os dois está no fato que para Heisenberg o spin tem 3 componentes com  $S^2 = S_x^2 + S_y^2 + S_z^2 = 1$  e para o Rotor Planar duas componentes com  $S^2 = S_x^2 + S_y^2 = 1$ , ou seja, no Rotor Planar os spins estão confinados no plano  $xy$ . A hamiltoniana é definida por

$$\mathcal{H}_{\mathcal{RP}} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \cos(\phi_i - \phi_j), \quad (2.9)$$

onde  $\phi$  é o ângulo que o spin faz com uma direção arbitrária,  $J > 0$  a constante de acoplamento ferromagnética e a soma é realizada apenas com primeiros vizinhos. Essa hamiltoniana é uma generalização do modelo de Ising e um caso particular do modelo  $XY$ , sistema esse que não apresenta ordem de longo alcance. Porém, a baixas temperaturas tem excitações topológicas, que aparecem aos pares, e são chamadas de pares vórtice-antivórtice. Na temperatura de transição, chamada de Berezinskii-Kosterlitz-Thouless [5, 6]  $T_{BKT}$ , esses pares são quebrados. É dito que o sistema tem uma transição de fase topológica e abaixo de  $T_{BKT}$  o sistema é crítico. O comprimento de correlação diverge exponencialmente  $\xi \sim e^{b/\sqrt{\varepsilon}}$ , com  $\varepsilon = |T - T_{BKT}|$  [45] com  $T > T_{BKT}$ , bem como a susceptibilidade magnética .

Apesar desse modelo já ter sido amplamente estudado e conhecidos seus



resultados, que são complicados de se obter, nesse trabalho vamos apresentar uma forma simples de obter a temperatura da transição de fase topológica  $T_{BKT}$ .

## 2.5 Modelo do Relógio com $p$ estados

O modelo do Relógio com  $p$  estados é muito interessante, pois seus limites são dois modelos fundamentais em Mecânica Estatística. No limite inferior, com  $p = 2$ , ele se reduz ao modelo de Ising com spins discretos  $S = 1/2$ , e no limite superior,  $p \rightarrow \infty$ , se reduz ao modelo do Rotor Planar de spins contínuos. No modelo do Relógio os spins estão confinados no plano  $xy$  formando um ângulo  $\theta_i$  com uma direção arbitrária. A hamiltoniana do modelo pode ser escrita como

$$\mathcal{H}_{\mathcal{R}} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \cos(\theta_i - \theta_j), \quad (2.10)$$

onde  $\theta_i = (2\pi/p)\sigma_i$ , com a variável de spin podendo assumir  $p$  valores  $\sigma_i = 0, 1, 2, \dots, p-1$ ,  $J$  é a constante de acoplamento e a soma é efetuada apenas sobre os primeiros vizinhos.

Para  $p = 2$  o hamiltoniano acima equivale ao modelo de Ising de spin  $1/2$ , para  $p = 3$  ele equivale ao modelo de Potts de três estados ( $q = 3$ ), e para  $p = 4$  corresponde a dois modelos de Ising de spin  $1/2$  desacoplados. No caso  $p > 5$  esse modelo apresenta uma transição de fase do tipo Berezinskii-Kosterlitz-Thouless ( $BKT$ ), sendo que na literatura há ainda controvérsias [41, 42, 43, 44] sobre o tipo de transição que ocorre em  $p = 5$ , caso o qual vamos estudar com mais detalhes na seção 7.5. Na figura 2.3 representamos em um diagrama as classes de universalidade do modelo para  $\sigma_i = 0, 1, 2, \dots, p-1$  em função do número de estados  $p$ .

### Caso $p = 2$

Como temos dois estados, fica claro que o ângulo formado entre dois pares de spins vai ser  $\theta_i = 0$  se tiverem os mesmos estados e  $\theta_i = 180^\circ$  se tiverem estados

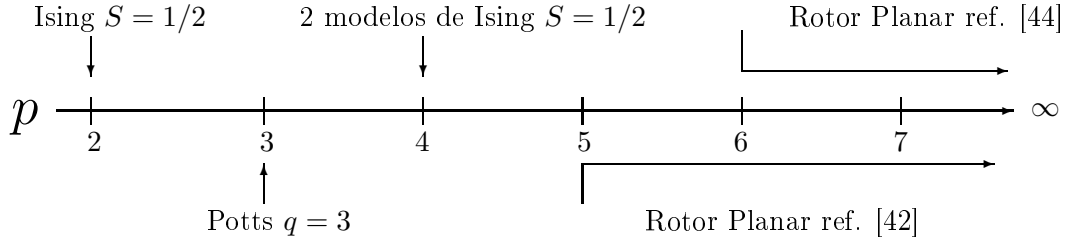


Figura 2.3: Criticalidade do modelo do Relógio com  $p$  estados em uma rede bidimensional em função do número de estados  $p$ .

diferentes. A contribuição na energia vai ser  $-1$  (mesmo estado) ou  $+1$  (estados opostos) exatamente como no modelo de Ising  $S = 1/2$ .

### Caso $p = 3$

Nesse caso os ângulos formados entre os 3 vetores são sempre iguais a  $\theta_i = 120^\circ$ . A figura 2.4 mostra três situações, a saber, a primeira o spin  $\sigma_i$  tem a mesma direção de  $\sigma_k$ , a segunda a mesma direção de  $\sigma_n$  e a terceira a mesma direção de  $\sigma_m$ . Da equação (2.10) vimos que a contribuição na energia é sempre  $+1$  se os pares de primeiros vizinhos tiverem o mesmo estado e  $\cos(120^\circ)$  caso contrário.

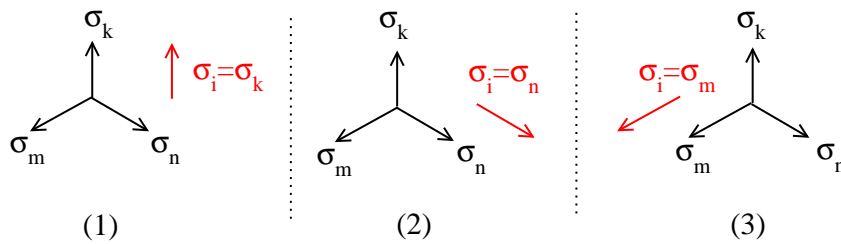


Figura 2.4: Diagrama de estados para o modelo do Relógio com  $p = 3$ .

Portanto, podemos reescrever a equação (2.10) como

$$\mathcal{H}_{\mathcal{R}}(p = 3) = -J (1 - \cos(120^\circ)) \sum_{\langle i,j \rangle} \delta_{\sigma_i, \sigma_j}, \quad (2.11)$$

Assim, fica claro que os pares de spins com mesmo estado contribuem na energia local com  $E_l = 1 - \cos(120^\circ)$  e com estados diferentes com  $E_l = 0$ , ou seja, a menos

de uma constante temos os mesmos níveis de energia do modelo de Potts com  $q = 3$  estados, a saber,  $E_l = 0$  (para estados diferentes) e  $E_l = 1$  (para estados iguais). Portanto, os modelos são iguais, a menos de uma renormalização na constante de interação.

### Caso $p = 4$

Na figura 2.5 estamos representando os quatro estados do modelo. Note que independente de qual seja o estado do spin (para cima, para baixo, para direita ou esquerda) os possíveis ângulos formados entre  $\sigma_i$  e seus vizinhos são ou  $\theta = 0^\circ$  ou  $\theta = 90^\circ$  ou  $\theta = 180^\circ$  ou  $\theta = 270^\circ$ . Enquanto  $\sigma_i$  estiver na vertical os vizinhos na horizontal dão contribuição nula para energia, ao passo de quanto  $\sigma_i$  estiver na horizontal, os spins da vertical agora dão uma contribuição nula para energia. Portanto, vamos ter somente 3 estados com energias  $+1$ ,  $0$  e  $-1$  para cada par de spins.

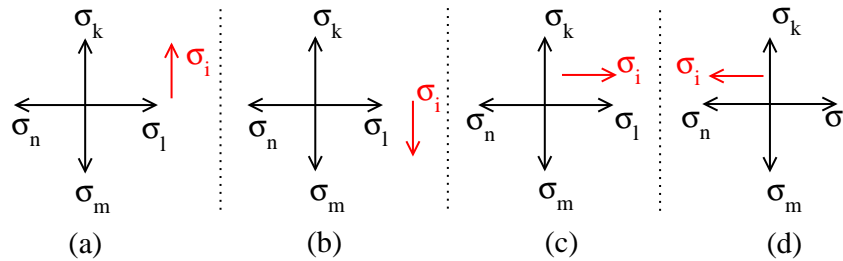


Figura 2.5: Diagrama de estados para o modelo do Relógio com  $p = 4$ .

Como a contribuição da energia para estados perpendiculares é nula, podemos analisar separadamente as duas direções, horizontal ( $h$ ) e vertical ( $v$ ). Na direção  $v$ , figuras 2.5 (a) e 2.5 (b), os spins só podem ocupar dois estados ( $+1$  ou  $-1$ ), exatamente como no modelo de Ising  $S = 1/2$ . De modo similar, na direção horizontal acontece exatamente o mesmo, ver figuras 2.5 (c) e 2.5 (d). Por isso dizemos que o modelo do Relógio com  $p = 4$  é equivalente a dois modelos de Ising

com  $S = 1/2$ . Podemos então reescrever a equação (2.10) como

$$\mathcal{H}_{\mathcal{R}}(p = 4) = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i^h \sigma_j^h - J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i^v \sigma_j^v. \quad (2.12)$$

Com a Hamiltoniana escrita dessa forma, fica claro que a temperatura crítica para  $p = 4$  vai ser  $T_c^{p=4} = T_c^{Ising}/2$ .

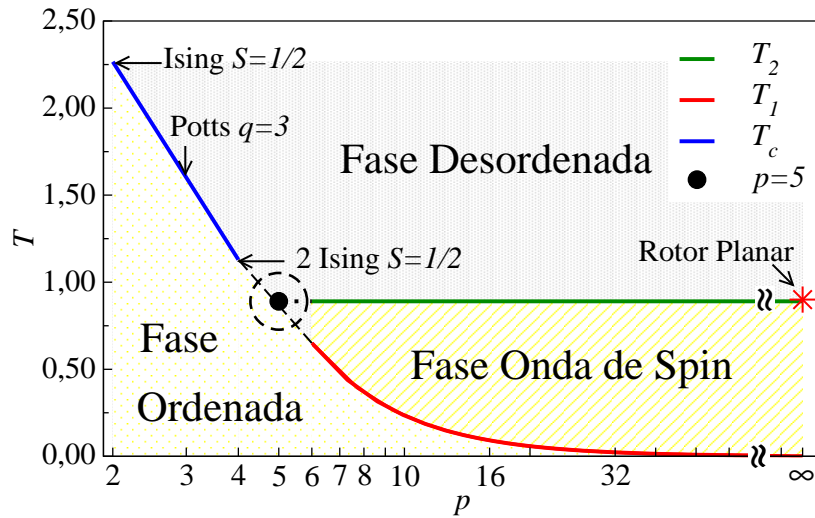


Figura 2.6: Diagrama de fases esquemático para o modelo do Relógio com  $p$  estados. A linha verde representa transições de fase do tipo  $BKT$ , a linha vermelha a transição da fase ordenada para a fase onda de spin, enquanto que a linha azul representa as transições críticas usuais. O círculo indica a região em torno de  $p = 5$ , onde os resultados ainda não estão bem definidos.

Vimos acima que o modelo do Relógio com  $p$  estados pode representar vários modelos já conhecidos. Interessante, porém, se torna os resultados para outros valores de  $p$ . Na figura 2.6 mostramos seu diagrama de fases esquemático. Na fase ordenada os spins tendem a ficar no mesmo estado, resultando em uma magnetização não nula. Na fase desordenada, onde os estados dos spins são aleatórios, a magnetização é nula. Já na fase onda de spin, os spins estão organizados, porém com magnetização nula, pois o sistema não apresenta ordem de longo alcance. Para  $p < 5$  temos somente uma transição crítica usual na temperatura  $T_c$ . Note que para  $p > 5$  temos duas temperaturas de transição,  $T_1$ , quando o sistema passa da fase ordenada para fase onda de spin (linha vermelha)

---

e  $T_2$ , da fase onda de spin para fase desordenada (linha verde). Segundo o trabalho de referência [44] essas duas transições são de segunda ordem. Na verdade, como foi mencionado no início da seção, existem ainda controvérsias a respeito da criticalidade quando  $p = 5$ , que serão discutidas mais detalhadamente no capítulo 7.

# Capítulo 3

## Técnicas de Simulação

Nos dias atuais, em que os computadores disponíveis são de alto desempenho, a simulação computacional vem sendo uma ferramenta de suma importância não só em Física, mas também em outras áreas de pesquisa. Neste capítulo descrevemos, de maneira sucinta, as técnicas computacionais utilizadas nas simulações dos modelos magnéticos estudados nesse trabalho.

### 3.1 Método Monte Carlo

Com o progresso alcançado pelos computadores, cálculos numéricos passaram a ser uma ferramenta fundamental no desenvolvimento da ciência em geral. A Física, hoje em dia, é comumente dividida em três áreas, a saber, Física Teórica, Física Experimental e Física Computacional.

Como exemplo de aplicação da Física Computacional podemos citar o modelo de Ising na rede cúbica, modelo para o qual não existe solução analítica exata. Por exemplo, uma estimativa computacional para o inverso da temperatura crítica em três dimensões é dada por  $T_c^{-1} = 0,2216595(6)$  [46]. Outra grande vantagem da simulação é que podemos alterar vários parâmetros físicos de interesse, que dificilmente poderíamos alterar experimentalmente, como por exemplo o valor da

interação do acoplamento entre os spins ( $J$ ), temperaturas e pressões extremamente altas, o número de interações que um spin faz com seus vizinhos, etc, e estudar os efeitos causados na termodinâmica do sistema.

Dentre as técnicas numéricas conhecidas, a de Monte Carlo tem grande destaque em quase todas as áreas da Física. Suas aplicações vão desde a Matéria Condensada até a Física de Partículas Elementares. Atualmente, o método Monte Carlo [47] é usado nos mais diversos campos, como por exemplo, simulação de fenômenos físicos complexos, tais como, o transporte de radiação na atmosfera terrestre e simulação de processos nucleares em experimentos de alta energia, entre outros.

Vamos discutir o método Monte Carlo no contexto do estudo de um sistema magnético de spins discretos. A magnetização  $m$  do sistema para uma dada configuração  $\{\sigma_i\}$  pode ser escrita como

$$m(\{\sigma_i\}) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sigma_i \quad (3.1)$$

em que  $N$  é o número de spins da rede. A média termodinâmica dessa magnetização é definida por

$$\bar{m} = \sum_{\{\sigma_i\}} P(\{\sigma_i\}) m(\{\sigma_i\}), \quad (3.2)$$

onde a soma se estende sobre todas as configurações possíveis  $\{\sigma_i\}$  e  $P(\{\sigma_i\})$  é a correspondente distribuição de Boltzmann dada por [4]

$$P(\{\sigma_i\}) = \frac{1}{Z} \exp(-E(\{\sigma_i\})/k_B T) \quad (3.3)$$

com  $Z = \sum_{\{\sigma_i\}} \exp(-E(\{\sigma_i\})/k_B T)$ .  $Z$  é chamada de função de partição e é uma quantidade fundamental em Mecânica Estatística. Como todas as propriedades físicas relevantes podem ser obtidas através dela, sua obtenção analítica implica em uma solução exata para o modelo. A dificuldade aqui é justamente obter essa soma analiticamente sobre todas as configurações do sistema, sendo possível somente em poucos modelos.

Mesmo se tentarmos calcular a função de partição numericamente, essa tarefa é inviável mesmo em sistemas pequenos como no exemplo a seguir. Suponha que queiramos calcular  $Z$  numericamente para o modelo de Ising em uma rede  $32 \times 32$ , onde temos  $2^{10}$  spins (num sistema real este número é muito maior). Nesse caso o número de configurações da soma  $Z$  é da ordem de  $2^{32 \times 32} \approx 10^{300}$ . Para um computador com frequência do processador  $f = 10 \text{ GHz} = 10 \times 10^9 \text{ Hz} = 10^{10} \text{ Hz}$  (bem acima do mercado de hoje), se o computador gastar apenas um pulso de *clock* (obviamente ele gasta vários pulsos) para gerar uma configuração  $\{\sigma_i\}$ , calcular  $E(\{\sigma_i\})$  e acrescentar  $\exp(-E(\{\sigma_i\})/k_B T)$  na função de partição, o tempo que ele levará para calcular  $Z$  será da ordem de

$$\Delta t_Z \simeq \frac{10^{300} \text{config}}{10^{10} \text{config/seg}} = 10^{290} \text{seg} \simeq \frac{10^{290} \text{seg}}{3 \times 10^7 \text{seg/ano}} \simeq 10^{282} \text{anos}. \quad (3.4)$$

Ora, a idade estimada para o universo é de 10 bilhões de anos, o que equivale a  $10 \times 10^9 \text{anos} = 10^{10} \text{anos}$ . Mesmo que haja muitos processadores e/ou que  $f$  seja muito maior, o exemplo acima mostra que o cálculo numérico direto de  $Z$  continua inviável.

Sendo assim, não nos é possível realizar a soma sobre todas as configurações do sistema de uma maneira numérica, mas apenas sobre algumas configurações  $\{\sigma_i\}$ . Se as mesmas forem escolhidas aleatoriamente o método será ineficiente, pois se sortearmos configurações com energia muito alta, por exemplo, a exponencial  $\exp(-E(\{\sigma_i\})/k_B T)$  tende a zero e portanto o termo somado é insignificante. Daí a necessidade de se utilizar a chamada amostragem por importância. Nesse caso, não se escolhem todas as configurações possíveis do sistema, mas apenas algumas (as mais importantes) que são “sorteadas” segundo a distribuição de Boltzmann  $p(\{\sigma_i\}) \sim \exp(-E(\{\sigma_i\})/k_B T)$ . Para se implementar este tipo de técnica foram criados vários algoritmos, alguns dos quais serão utilizados por nós nesse trabalho e serão discutidos nas seções seguintes.



### 3.1.1 Algoritmo de Metropolis

Em 1953, Metropolis [48] e colaboradores desenvolveram um algoritmo, partindo da idéia de construir um processo Markoviano, isto é, uma sequência de configurações  $\{\sigma_i\}_1, \{\sigma_i\}_2, \dots, \{\sigma_i\}_k, \{\sigma_i\}_{k+1}, \dots, \{\sigma_i\}_M$  em que  $\{\sigma_i\}_{k+1}$  fosse construída a partir de  $\{\sigma_i\}_k$  com uma probabilidade de transição  $W(\{\sigma_i\}_k \rightarrow \{\sigma_i\}_{k+1})$  previamente definida [49]. Para  $M$  suficientemente grande seria possível escolher  $W$  tal que a configuração  $\{\sigma_i\}_k$  gerada no processo markoviano tenha probabilidade  $P(\{\sigma_i\}_k) \sim \exp(-E(\{\sigma_i\}_k)/k_B T)$ , como desejado no ensemble canônico. Vemos abaixo um esquema da estrutura do algoritmo de Metropolis que pode ser aplicado a vários modelos de spins discretos bem como spins contínuos.

1. Escolha uma condição inicial para o sistema  $\{\sigma_i\}_0$  (geralmente, essa escolha pode ser com todos os spin alinhados em uma dada direção ou totalmente aleatórios).
2. Sorteie um spin e mude seu estado, obtendo-se então uma nova configuração  $\{\sigma_i\}_f$  (esse processo pode ser feito sequencialmente na rede ao invés de um sorteio).
3. Se a energia diminuir, ou seja,  $\Delta E = E(\{\sigma_i\}_f) - E(\{\sigma_i\}_0) < 0$ , aceite a nova configuração  $\{\sigma_i\}_f$ .
4. Senão, sorteie um número aleatório  $r$  e compare com a probabilidade  $P = \exp(-\beta \Delta E)$ . Se  $r < P$  aceite a nova configuração, caso contrário mantenha a configuração inicial  $\{\sigma_i\}_0$ .
5. Repita do passo 2 ao passo 4, até atingir uma configuração de equilíbrio.

Pode-se mostrar que o algoritmo de Metropolis acima satisfaz a condição do balanço detalhado e no equilíbrio reproduz a distribuição de Boltzmann, condições essas fundamentais para qualquer algoritmo no ensemble canônico.

A configuração inicial, com que se inicia a cadeia de Markov, certamente não corresponde a uma configuração de equilíbrio na temperatura de interesse. Então, percorreremos a rede muitas vezes, aceitando ou rejeitando configurações e no final encontraremos uma rede termalizada, isto é, em uma configuração de equilíbrio termodinâmico. Só então passaremos a gerar novas configurações e a calcular as quantidades de interesse. Dizemos que o tempo necessário para percorrer toda a rede é um passo Monte Carlo (1 *PMC*), ou seja, “visitar”  $L \times L$  spins em uma rede quadrada por exemplo.

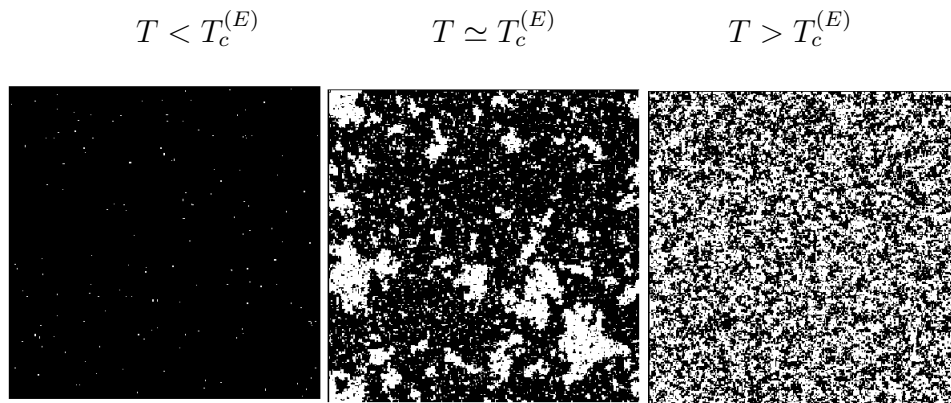


Figura 3.1: Configurações de spins no equilíbrio para o modelo de Ising com  $S = 1/2$  na rede quadrada de tamanho  $L = 256$ . São mostradas três configurações típicas para  $T < T_c^{(E)}$ ,  $T \simeq T_c^{(E)}$  e  $T > T_c^{(E)}$ . A cor preta representa spin para cima e a cor branca spin para baixo.

Na figura 3.1 mostramos um exemplo típico de configuração de spin, no equilíbrio, para o modelo de Ising com  $S = 1/2$  em uma rede quadrada ( $L = 256$ ) utilizando o algoritmo de Metropolis. São mostradas três configurações típicas para  $T < T_c^{(E)}$ ,  $T \simeq T_c^{(E)}$  e  $T > T_c^{(E)}$ , em que  $T_c^{(E)}$  é a temperatura crítica exata do modelo. A cor preta está representando spins para cima e a cor branca spins para baixo. Note que quando estamos na fase ferromagnética ( $T < T_c^{(E)}$ ) a maioria dos spins tendem a ficar no mesmo estado (dominância da cor preta), já na fase paramagnética ( $T > T_c^{(E)}$ ) os spins estão com estados aleatórios (nenhuma cor predomina). Na região próxima à temperatura crítica ( $T \simeq T_c^{(E)}$ ) o comprimento

de correlação diverge, por isso surgem agregados de todos os tamanhos do sistema.

O algoritmo de Metropolis é bastante eficiente para modelos no qual os spins podem ter poucos estados, como no caso do Ising  $S = 1/2$ , mas para o modelos com vários estados esse algoritmo se torna ineficiente [50]. Na próxima seção discutiremos o porquê desse fato e apresentaremos um algoritmo mais adequado para modelos com vários estados de spins, o chamado algoritmo de Banho Térmico.

### 3.1.2 Algoritmo de Banho Térmico

O algoritmo de Banho Térmico tem o mesmo propósito do algoritmo de Metropolis, ou seja, partindo de uma configuração inicial  $\{\sigma_i\}$  obtém-se uma nova configuração  $\{\sigma'_i\}$  de acordo com uma distribuição de probabilidades adequada, satisfazendo, é claro, o princípio do balanço detalhado [50]. Então qual a vantagem ou desvantagem de usar um ou outro algoritmo? Isso depende, naturalmente, das características específicas do modelo a ser estudado. Por exemplo, para o modelo de Ising  $S = 1/2$  (dois estados), como veremos mais adiante, é mais vantajoso usar o algoritmo de Metropolis, enquanto que para modelos com mais estados é mais vantajoso usar o algoritmo de Banho Térmico. Vamos usar, como exemplo, o modelo de Potts com  $q$  estados em uma rede quadrada (poderia ser qualquer outro modelo como vários estados) para mostrar qual algoritmo se torna mais ou menos eficiente (lembrando que para  $q = 2$  retornamos ao modelo de Ising com  $S = 1/2$ ).

Sabemos que o algoritmo de Metropolis sorteia um spin  $\sigma_i$  da rede e altera seu estado ( $+1 \rightarrow -1$  ou  $-1 \rightarrow +1$  para  $q = 2$ ). Se  $\Delta E < 0$  mantemos essa alteração, mas se  $\Delta E > 0$  mudamos seu estado de acordo com uma probabilidade definida a priori. A probabilidade  $P_n$  do spin sair de seu estado atual e ir para o novo estado  $\sigma_i = n$  é dada, de acordo com Metropolis, por

$$P_n = \exp(-\beta\Delta E_n), \quad (3.5)$$

onde  $\Delta E_n$  é a variação de energia do sistema quando  $\sigma_i$  assume um novo valor  $n$ ,

$\beta = 1/k_B T$ ,  $T$  a temperatura do sistema e  $k_B$  é a constante de Boltzmann.

Para o algoritmo de Banho Térmico sorteamos um spin  $\sigma_i$  da rede e, independente do valor desse spin, escolhemos um novo valor para o spin  $\sigma_i = n$  ( $1 < n < q$ ). A probabilidade de aceitação desse novo estado é

$$P_n = \frac{\exp(-\beta\Delta E_n)}{\sum_{m=1}^q \exp(-\beta\Delta E_m)}. \quad (3.6)$$

Para entender melhor porque a distribuição de probabilidade (3.6) se torna melhor do que a distribuição (3.5) considere um caso em que o número de estados é muito grande, por exemplo  $q = 200$ . Para altas temperaturas temos que  $\beta = 1/k_B T$  é muito pequeno, portanto da equação (3.5) vemos que a probabilidade de aceitação é  $P \approx 1$  (aceita-se todas as novas configurações). Nessa região o Metropolis é satisfatório. Já para baixas temperaturas os spins tendem a se orientar pelos seus vizinhos, formando domínios magnéticos, exatamente como acontece no modelo de Ising. Agora considere um caso no qual o estado do spin sorteado  $\sigma_i$  é diferente dos estados de seus vizinhos  $\sigma_j, \sigma_k, \sigma_l$  e  $\sigma_m$ , ou seja, a energia inicial dessa configuração local é nula  $E_i = 0$ . Então o spin  $\sigma_i$  está em um dos 196 estados restantes para o sistema. Sendo assim, qualquer outro estado que não for o estado de algum dos quatro vizinhos, produzirá uma variação da energia nula  $\Delta E = 0$  ( $P = 1$ ) e o estado será aceito. Só vamos ter diminuição na energia do sistema quando em um passo de Monte Carlo o estado sorteado for igual a um de seus primeiros vizinhos. Nesse caso, com o algoritmo de Metropolis, vamos ter que dar muito mais passos de Monte Carlo (em média, aproximadamente 50 PMC) para o spin ficar com o valor de um de seus vizinhos.

Considere agora o caso contrário, em que o spin sorteado  $\sigma_i$  tem o mesmo estado de um dos seus vizinhos. Nessa configuração a energia já é a desejável, mas quando o algoritmo de Metropolis muda o estado do spin, isso gera um aumento na energia e portanto uma diminuição na probabilidade de aceitação. Sendo assim,

em média o algoritmo vai rejeitar 196 a cada 200 tentativas de mudança, ou seja, a probabilidade de aceitação fica por volta de 2%. Isso significa que o algoritmo vai precisar de muitos passos de Monte Carlo para o sistema termalizar. Com a distribuição (3.6) os spins são mudados independente do estado anterior, tornando-o mais eficiente. Na ref. [50] os autores fazem uma comparação entre os dois algoritmos, onde foi calculada a Energia Interna do modelo de Potts com  $q = 10$  estados em uma rede quadrada de tamanho  $L = 20$  com uma temperatura  $T = 1/2$ , abaixo da temperatura crítica. O algoritmo de Metropolis gastou aproximadamente  $20000PCM$  até o sistema termalizar, enquanto o algoritmo de Banho Térmico gastou  $200PMC$ , em média 100 vezes menos.

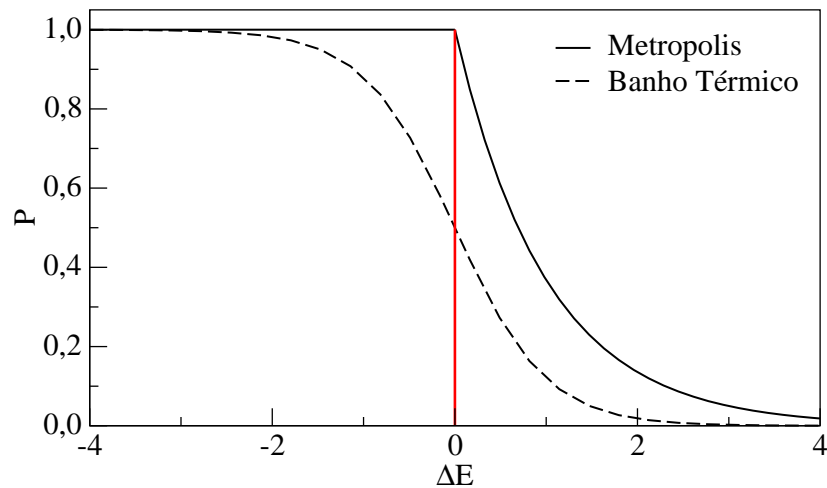


Figura 3.2: Probabilidade de aceitação para os algoritmos de Metropolis e Banho Térmico.

Na figura 3.2 mostramos o comportamento das probabilidades de aceitação (equações (3.5) e (3.6)) em função da variação de energia  $\Delta E$  para o modelo de Ising de spin 1/2. Nesse caso a equação (3.6) se torna

$$P = \frac{\exp(-\frac{1}{2}\beta\Delta E)}{\exp(-\frac{1}{2}\beta\Delta E) + \exp(\frac{1}{2}\beta\Delta E)}, \quad (3.7)$$

Note que a probabilidade de aceitação para o algoritmo de Banho Térmico é sempre menor que a do algoritmo de Metropolis. Para  $\Delta E < 0$  o algoritmo de

Metropolis sempre aceita a nova configuração porque  $P = 1$ , enquanto que para o algoritmo de banho térmico ainda tem uma probabilidade de aceitar ou não essa nova configuração. Por isso o Metropolis é mais eficiente para poucos estados, pois ele vai visitar mais configurações que o Banho Térmico.

Usaremos, portanto, nesse trabalho o algoritmo de Metropolis para modelos com poucos estados e o algoritmo de Banho Térmico para modelos com muitos estados de spin.

## Capítulo 4

# Formalismo do Crescimento de Superfícies

Neste trabalho vamos analisar as transições de fase de primeira e segunda ordem, transições multicríticas e de Berezinskii-Kosterlitz-Thouless em modelos de spins do ponto de vista dos expoentes da rugosidade  $(\beta_W, \alpha, z_W, H)$ . Vamos definir o expoente de crescimento  $\beta_W$ , o expoente da rugosidade  $\alpha$ , o expoente dinâmico  $z_W$  e o expoente de Hurst  $H$  usando o modelo de Deposição Balística (BD) [15], ilustrado na figura 4.1. Essas definições são entretanto gerais, e valem quaisquer processos que geram interfaces rugosas

A regra de deposição usada no modelo DB é chamada de “*sticking rule*”, ou seja, cada caixa da figura 4.1 representa uma partícula, essas partículas são soltas aleatoriamente de uma altura maior que a altura da maior coluna e colam na primeira partícula que encontrarem. A figura 4.2 mostra um exemplo de uma superfície gerada pelo modelo de Deposição Balística com 180000 partículas. A partir de um substrato liso, foram depositadas 10000 partículas alternadamente nas cores preto e cinza para mostrar que a interface do perfil varia com o tempo de deposição  $t$ . Note que, de acordo com a definição do modelo ilustrada na figura 4.1, a superfície gerada possui vacâncias em seu interior.

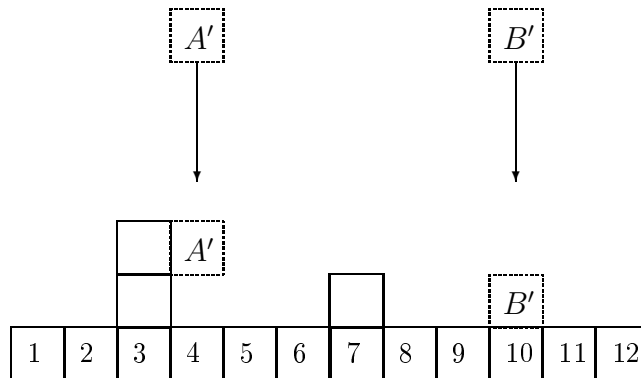


Figura 4.1: Esquema ilustrativo do Modelo de Deposição Balística em um substrato unidimensional.  $A'$  e  $B'$  são depositados de acordo com regras pré-definidas “(nesse caso a partícula cola na primeira partícula que encontrar)”. [15]. Mostramos o caso  $L = 12$ , em que  $L$  é o número de colunas.

As alturas das colunas definem um perfil, e para descrever o crescimento desse perfil quantitativamente vamos definir inicialmente duas funções. Primeiro a altura

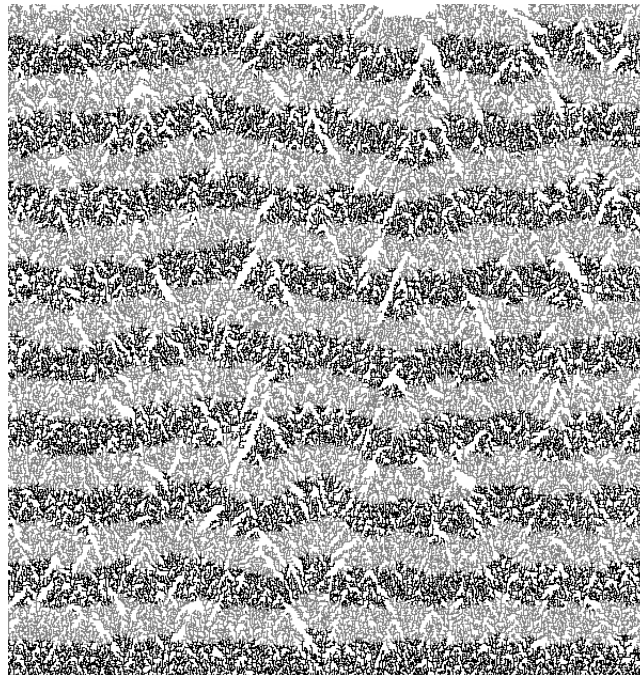


Figura 4.2: Crescimento de uma superfície via modelo de Deposição Balística. Essa deposição foi feita usando 180000 partículas alternando nas cores preto e cinza em um intervalo de 10000 partículas depositadas em uma rede unidimensional com  $L = 600$ .



média do perfil, que pode ser obtida de

$$\bar{h}(t) = \frac{1}{L^d} \sum_{i=1}^L h_i(t), \quad (4.1)$$

com  $h_i(t)$  sendo a altura do sítio  $i$  em um tempo  $t$  e  $d$  a dimensão do sistema. Se a razão com que as partículas que chegam ao sítio for constante, a altura média do perfil cresce linearmente com o tempo

$$\bar{h}(t) \sim t. \quad (4.2)$$

Outra quantidade de interesse é a chamada rugosidade global do perfil, que é caracterizada pelo desvio quadrático médio

$$W(L, t) = \sqrt{\frac{1}{L^d} \sum_{i=1}^L (h_i(t) - \bar{h}(t))^2}. \quad (4.3)$$

Portanto, quanto mais rugosa se torna a superfície, maior  $W(L, t)$ .

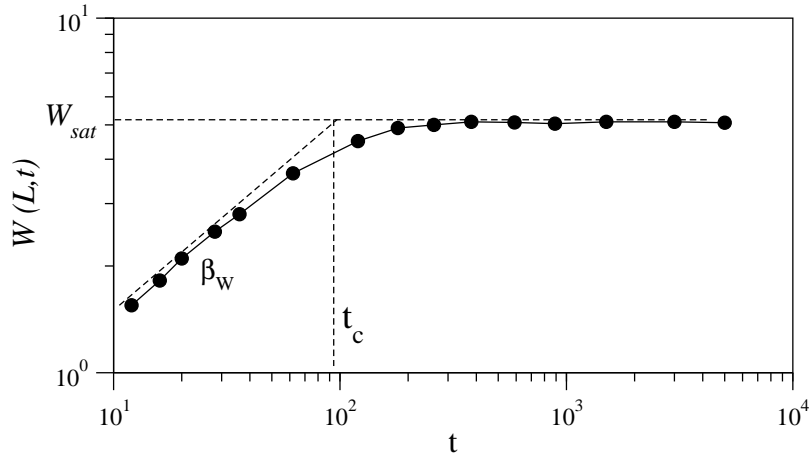


Figura 4.3: Crescimento típico da rugosidade  $W$  em função do tempo  $t$  para o modelo de Deposição Balística,  $W_{sat}$  é o valor de saturação da rugosidade e  $t_c$  é o tempo de saturação.

A figura 4.3 mostra o comportamento típico da rugosidade  $W$  em função do tempo  $t$  para o modelo de Deposição Balística.  $W_{sat}$  é o valor de saturação da rugosidade e  $t_c$  é o tempo de relaxação do sistema. Note que a rugosidade cresce e depois satura para um tempo grande  $t \gg t_c$ , porque o comprimento de correlação  $\xi$  atinge o tamanho da rede  $L$ .

## 4.1 Expoente de Crescimento $\beta_W$

Como mostra a equação (4.3), a rugosidade é uma função do tempo. Podemos então monitorar o crescimento da rugosidade com o tempo, como mostrado esquematicamente na figura 4.3 para o caso de Deposição Balística. Nota-se que a rugosidade apresenta dois regimes diferentes, um para  $t \ll t_c$ , no qual a rugosidade cresce com uma lei de potência e outro para  $t \gg t_c$ , no qual a rugosidade satura. Percebemos um tempo de “*cruzamento*”  $t_c$  que separa nessas duas regiões, para tempos pequenos ( $t \ll t_c$ ) e para tempos grandes ( $t \gg t_c$ ). Para a primeira região ( $t \ll t_c$ ) temos que

$$W(t, L) \sim t^{\beta_W}, \quad (4.4)$$

onde o expoente  $\beta_W$  dessa lei de potência é o expoente de crescimento. Para  $t \gg t_c$  a rugosidade atinge um estado de saturação. Outros modelos de crescimento apresentam comportamentos semelhantes para a rugosidade. Note que o expoente  $\beta_W$  é definido para tempos  $t \ll t_c$ , o que certamente será muito útil em simulações.

## 4.2 Expoente da Rugosidade $\alpha$

A rugosidade da figura 4.3 não cresce indefinidamente pois, após um certo tempo  $t$  ( $t \gg t_c$ ) esse valor se torna constante. Essa saturação ocorre quando o comprimento de correlação paralelo  $\xi_{\parallel}$  atinge o tamanho do sistema  $L$ . Para sistemas com diferentes tamanhos  $L$  (ver figura 4.4(a)) o valor de  $W_{sat}$  aumenta com o tamanho da rede  $L$ , seguindo uma lei de potência, dada por

$$W_{sat}(L) \sim L^{\alpha}. \quad (4.5)$$

O expoente  $\alpha$  dessa lei de potência é o expoente da rugosidade.

### 4.3 Expoente Dinâmico $z_W$

O tempo de “cruzamento”  $t_c$ , ou tempo de saturação, no qual a rugosidade muda de comportamento, também cresce com o aumento do tamanho da rede  $L$ , seguindo uma lei de potência,

$$t_c \sim L^{z_W}, \quad (4.6)$$

sendo  $z_W$  o expoente dinâmico.

### 4.4 Expoente de Hurst $H$

De posse do perfil gerado por algum processo de deposição, o expoente de Hurst  $H$  é calculado determinando-se a rugosidade, ou seja, o desvio quadrático médio, de partes do perfil com várias escalas  $\varepsilon$ . Com a janela de tamanho  $\varepsilon$  sendo centrada no sítio  $i$ , a rugosidade local pode ser escrita como

$$w_i(\varepsilon, t) = \sqrt{\frac{1}{\varepsilon} \sum_{j=i-\frac{\varepsilon}{2}}^{i+\frac{\varepsilon}{2}} (h_j(t) - \bar{h}_i(t))^2}, \quad (4.7)$$

com

$$\bar{h}_i(t) = \frac{1}{\varepsilon} \sum_{j=i-\frac{\varepsilon}{2}}^{i+\frac{\varepsilon}{2}} h_j(t). \quad (4.8)$$

A rugosidade na escala  $\varepsilon$  é então dada por

$$W(L, \varepsilon, t) = \frac{1}{L^d} \sum_{i=1}^N w_i(\varepsilon, t). \quad (4.9)$$

A rugosidade  $W(\varepsilon)$  segue uma lei de potência com o tamanho da janela ( $\varepsilon$ ) na qual o expoente é o expoente de Hurst  $H$ , isto é,

$$W(\varepsilon) \sim \varepsilon^H. \quad (4.10)$$

A rugosidade  $W(\varepsilon)$  pode distinguir dois tipos de perfis. Se este é aleatório ou exibe um comprimento de correlação finito, então  $W \sim \varepsilon^{1/2}$ , isto é,  $H = 1/2$ , como um caminhante aleatório normal. Mas se o perfil tem correlação infinita temos duas situações: quando  $H < 1/2$  o perfil é antipersistente, ou seja, se  $h$  está aumentando tende a diminuir, se está diminuindo tende a aumentar; para  $H > 1/2$  o perfil é persistente, ou seja,  $h$  se ele está aumentando ele tende a continuar aumentando, se está diminuindo tende a continuar diminuindo.

O expoente de Hurst  $H$  pode ser relacionado com a dimensão fractal  $D_f$  da interface através da relação  $H = d - D_f$  [20], em que  $d$  é a dimensão do sistema.

## 4.5 Lei de Escala

Para o modelo de Deposição Balística os expoentes  $\alpha$ ,  $\beta_W$  e  $z$  não são independentes entre si. Family e Vicsek [17] fizeram duas observações importantes que nos levam ao colapso das curvas da figura 4.4(a) e portanto a uma relação entre estes expoentes.

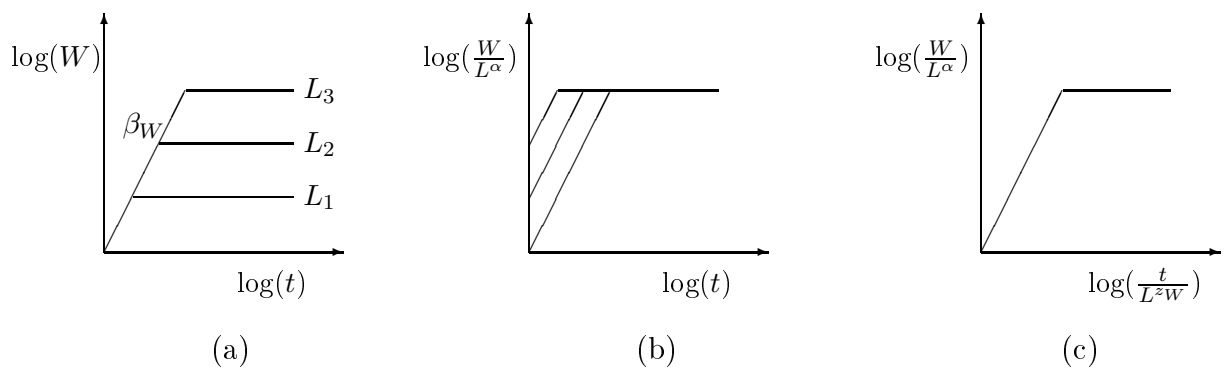


Figura 4.4: Esquema ilustrativo dos passos para reescalar a rugosidade versus tempo. O gráfico da esquerda mostra a variação da rugosidade com o tempo para diferentes tamanhos,  $L_1 < L_2 < L_3$ . Os gráficos da direita mostram os colapsos gradativos nas leis de escala correspondentes.

(1)  $\longrightarrow$  quando foi feito o gráfico de  $W(L, t)/W_{sat}(L)$  em função do tempo, obteve-se curvas que saturam com o mesmo valor.

(2)  $\longrightarrow$  quando foi feito o gráfico da rugosidade  $W(L, t)/W_{sat}(L)$  em função de  $t/t_c$ , obteve-se curvas que tem o mesmo valor do tempo de saturação.

Essas duas observações sugerem que  $W(L, t)/W_{sat}$  é uma função de  $t/t_c$ . Então obtemos

$$\frac{W(L, t)}{W_{sat}(L)} \sim f\left(\frac{t}{t_c}\right), \quad (4.11)$$

onde  $f$  é chamada *função de escala*. Para obtermos a relação de escala de *Family-Vicsek* basta substituímos na equação acima os valores de  $W_{sat}(L)$  e  $t_c$  por  $L^\alpha$  e  $L^{zw}$  respectivamente

$$W(L, t) \sim L^\alpha f\left(\frac{t}{L^{zw}}\right). \quad (4.12)$$

A forma geral da função de escala  $f(\mu)$  pode ser tirada da figura 4.4. Existem dois regimes de escalas diferentes, um para  $\mu \ll 1$  e outro para  $\mu \gg 1$ .

1. Para pequenos valores de  $\mu$  ( $t \ll t_c$ ), a função de escala cresce com uma lei de potência,

$$f(\mu) \sim \mu^{\beta_w}. \quad (4.13)$$

2. Para  $\mu \gg 1$  ( $t \gg t_c$ ) a rugosidade  $W$  satura, isto é, a função de escala é constante,

$$f(\mu) = const. \quad (4.14)$$

A validade da relação de escala de *Family-Vicsek* pode ser testada numericamente. Na figura 4.4 representamos como seria o colapso das curvas da rugosidade *versus* tempo para diferentes tamanhos. Neste esquema representamos três tamanhos  $L_1 < L_2 < L_3$ .

Os expoentes  $\alpha$ ,  $\beta_W$  e  $z_W$  não são independentes entre si [15]. Se aproximarmos de  $t_c$  na figura 4.3 pela esquerda, vemos que a equação (4.4) fica  $W(t_c, L) \sim t_c^{\beta_W}$  e se aproximarmos de  $t_c$  pela direita, vemos que a equação (4.5) fica  $W(t_c, L) \sim L^\alpha$  o que implica  $t_c^{\beta_W} \sim L^\alpha$ , mas  $t_c \sim L^{z_W}$ . Então obtemos que

$$z_W = \frac{\alpha}{\beta_W}. \quad (4.15)$$

Essa lei de escala é válida para todos os processos de crescimento que seguem a relação de escala de *Family-Vicsek*, equação (4.12).

Na referência [22] são apresentados valores numéricos para os expoentes  $\alpha$ ,  $\beta_W$ ,  $z_W$  e  $H$  que foram obtidos via mapeamento para o problema de percolação direcionada (PD), processo de contato (PC), autômato celular determinístico de Wolfram (AC), percolação direcionada compactada (PDC) e o autômato celular de Domany-Kinzel (ACDK). Na tabela 4.1 mostramos esses valores, que no próximo capítulo serão comparados com os resultados obtidos neste trabalho.

	$\beta_W$	$\alpha$	$z_W$	$H$
PD	0,8405	1,3286	1,5808	0,643
PC(simulação)	0,839(1)	1,33	-	0,63(3)
AC(simulação)	0,837(11)	-	-	-
PDC	1	2	2	1
ACDK(congelada/ativa $p_2 = 0,5$ )	0,82(2)	1,32(1)	1,59(1)	0,61(3)
ACDK(congelada/ativa $p_2 = 1$ )	0,99(2)	2,01(1)	2,08(5)	0,99(2)
ACDK(não caótica/caótica $p_1 = 1$ )	0,81(1)	1,325(9)	1,61(1)	0,60(3)
ACDK(não caótica/caótica $p_2 = 0$ )	0,78(2)	1,32(1)	1,64(2)	0,61(3)

Tabela 4.1: Tabela de valores dos expoentes de crescimento  $\beta_W$ , expoente da rugosidade  $\alpha$ , expoente dinâmico  $z_W$  e expoente de Hurst  $H$  para alguns sistemas, retirados da ref. [22].

O expoente de crescimento ( $\beta_W$ ) foi definido inicialmente para modelos de crescimento de superfícies, mas tem aplicações em muitas outras áreas da física. Atman e Moreira [21] usaram o expoente de crescimento para caracterizar o autômato celular de Domany-Kinzel. No presente trabalho usaremos este expoente para caracterizar transições de primeira e segunda ordem, multicríticas e topológicas, em sistemas magnéticos (modelos Blume Capel de spin-S e Potts com  $q$  estados, modelo de Relógio de  $p$  estados e Rotor Planar).

Na referência [23] foi mostrado que o expoente de Hurst detecta as transições de fase nos modelos de Ising, Potts e Relógio na rede quadrada. Além disso, foi mostrado que existe um comprimento característico  $\varepsilon^*$  (em que ocorre uma mudança no comportamento de  $W(\varepsilon)$  com  $\varepsilon$  (um “*cruzamento*”) que apresenta um pico nas temperaturas críticas desses modelos. Os autores sugerem uma relação entre esse comprimento  $\varepsilon^*$  e o comprimento de correlação  $\xi$  nesses modelos. Além disso, foi mostrado em [24] que o expoente de Hurst  $H$ , assim como o expoente da rugosidade  $\alpha$ , detecta a transição de fase do modelo de Ising unidimensional com interação de longo alcance. Na temperatura crítica deste modelo foi detectada uma super-rugosidade, isto é, o expoente da rugosidade maior que o expoente de Hurst ( $\alpha > H$ ).

## 4.6 Relação entre expoentes termodinâmicos ( $\beta$ , $\nu$ e $z$ ) e de crescimento $\beta_W$

Foi mostrado em [22] que para o automato celular de Domany-Kinzel (ACDK) existe uma relação entre os expoentes críticos e o expoente de crescimento do modelo, ou seja, com o conhecimento prévio dos expoentes críticos pode-se calcular analiticamente um valor esperado para o expoente de crescimento  $\beta_W$ . Como vamos estudar sistemas magnéticos (modelos de Blume Capel de spin-S, Potts com  $q$

estados, Relógio com  $p$  estados e Rotor Planar), vamos deduzir também uma relação entre o expoente de crescimento  $\beta_W$  da superfície gerada e os expoentes críticos termodinâmicos dos modelos,  $\beta$ ,  $\nu$  e  $z$ . A altura no sítio  $i$  em um tempo  $t$  é dada por

$$h_i(t) = \sum_{t'=0}^t \sigma_i(t'). \quad (4.16)$$

Então a altura média é

$$\bar{h} = \sum_{i=1}^{L^2} \frac{h_i(t)}{L^2} = \sum_{t'=0}^t \sum_{i=1}^{L^2} \frac{\sigma_i(t')}{L^2} = \sum_{t'=0}^t m(t'), \quad (4.17)$$

onde  $L$  é o tamanho linear da rede em estudo ( $L^2$  é o número de sítios) e  $m(t')$  é a magnetização por spin em um tempo  $t'$ . Sabemos também que

$$h_i^2(t) = \sum_{t'=0}^t \sum_{t''=0}^t \sigma_i(t') \sigma_i(t''), \quad (4.18)$$

o que implica em

$$\overline{h^2}(t) = \sum_{t'=0}^t \sum_{t''=0}^t \Gamma(t', t''), \quad (4.19)$$

com  $\Gamma(t', t'') = \frac{1}{L^2} \sum_{i=1}^{L^2} \sigma_i(t') \sigma_i(t'')$ .

Podemos escrever a soma da função de auto-correlação temporal como

$$\sum_{t'=0}^t \sum_{t''=0}^t \Gamma(t', t'') = \sum_{\delta=0}^t a_\delta \Gamma(\delta), \quad (4.20)$$

onde  $\delta = |t' - t''|$ , com  $a_0 = t + 1$  e  $a_\delta = 2(t - \delta) + 2 = 2(t - \delta + 1)$ . Então

$$\overline{h^2}(t) = (t + 1)\Gamma(0) + \sum_{\delta=1}^t 2(t - \delta + 1)\Gamma(\delta), \quad (4.21)$$

$$\overline{h^2}(t) = \Gamma(0) + t\Gamma(0) + \sum_{\delta=1}^t 2(t - \delta + 1)\Gamma(\delta). \quad (4.22)$$

Assumindo que  $\Gamma(\delta) \sim \delta^{-\frac{2\beta}{\nu z}}$  [25, 26], quando  $T \simeq T_c$  temos que

$$\overline{h^2}(t) \sim \Gamma(0) + t\Gamma(0) + \sum_{\delta=1}^t 2(t - \delta + 1)\delta^{-\frac{2\beta}{\nu z}}. \quad (4.23)$$



Fazendo  $\frac{\beta}{\nu z} = n$  na equação acima, obtemos:

$$\overline{h^2}(t) \sim \Gamma(0) + t\Gamma(0) + \sum_{\delta=1}^t 2(t - \delta + 1)\delta^{-2n} \quad (4.24)$$

Aproximando o somatório em uma integral, temos

$$\overline{h^2}(t) \sim \Gamma(0) + t\Gamma(0) + \int_1^t 2(t - \delta + 1)\delta^{-2n} d\delta \quad (4.25)$$

$$\overline{h^2}(t) \sim \Gamma(0) + t\Gamma(0) + 2t \int_1^t \delta^{-2n} d\delta - 2 \int_1^t \delta^{-2n+1} d\delta + 2 \int_1^t \delta^{-2n} d\delta \quad (4.26)$$

$$\overline{h^2}(t) \sim \Gamma(0) + t\Gamma(0) - \frac{2t}{(1-2n)} + \frac{2t^{2-2n}}{(1-2n)} + \frac{2}{(2-2n)} - \frac{2t^{2-2n}}{(2-2n)} - \frac{2}{(1-2n)} + \frac{2t^{1-2n}}{(1-2n)} \quad (4.27)$$

$$\overline{h^2}(t) \sim A + Bt + Ct^{1-\frac{2\beta}{\nu z}} + Dt^{2-\frac{2\beta}{\nu z}}, \quad (4.28)$$

onde  $A$ ,  $B$ ,  $C$  e  $D$  são constantes.

Na equação (4.28), em  $T = T_c$  o termo que é multiplicado por  $D$  é dominante, pois tem em geral a maior potência e da definição de rugosidade  $W = \sqrt{\overline{h^2} - \bar{h}^2}$ , como nesta temperatura a magnetização é nula, portanto a altura média é zero  $\bar{h} = 0$ , então

$$W \sim t^{1-\frac{\beta}{\nu z}}, \quad (4.29)$$

mas

$$W = t^{\beta_W}, \quad (4.30)$$

portanto

$$\beta_W = 1 - \frac{\beta}{\nu z}. \quad (4.31)$$

Fora da temperatura crítica ( $T \neq T_c$ ), onde a função de correlação temporal decai exponencialmente com o tempo, para tempos grandes a função de correlação vai a zero rapidamente,  $\Gamma(\delta) = 0$  para  $\delta \geq 1$ , então a equação (4.22) fica

$$\overline{h^2}(t) = \Gamma(0) + t\Gamma(0). \quad (4.32)$$

Como  $\Gamma(0)$  é constante, então a rugosidade  $W \sim t^{1/2}$  o que explica o comportamento de  $\beta_W = 1/2$  quando o sistema esta descorrelacionado.

Na tabela 4.2 mostramos os valores esperados  $\beta_W$  para alguns modelos calculados através da equação (4.31) com os expoentes críticos  $\beta$  e  $\nu$  obtidos da literatura. Mostramos também os valores das temperaturas críticas para o modelo de Potts com  $q$  estados e o modelo de Blume-Capel  $S = 1$  no ponto tricrítico [51]. Na linha de transição de segunda ordem o modelo de Blume-Capel tem a mesma classe de universalidade do modelo de Ising, ou seja, os mesmos expoentes críticos ( $\beta$  e  $\nu$ ) para o caso  $q = 2$ . Em nossas simulações usamos os algoritmos de Banho Térmico e Metropolis, que tem aproximadamente o mesmo expoente dinâmico  $z \simeq 2.17$ , valor esse obtido através de uma média dos valores encontrados na ref. [45]. Como os expoentes críticos são os mesmos para uma mesma classe de universalidade, assim teremos um só valor do expoente de crescimento esperado  $\beta_W$  em toda a linha de transição de segunda ordem para o modelo de Blume-Capel com  $S = 1$ .

	$\beta$	$\nu$	$T_c$	$\beta_W$
Potts $q = 2$ (Ising)	0,125	1,0	1,1345927	0,942396
Potts $q = 3$	0,111111	0,833333	0,9949729	0,938556
Potts $q = 4$	0,083333	1,250646	0,9102392	0,969294
Potts $q = 5$	-	-	0,8515284	-
Potts $q = 6$	-	-	0,8076068	-
Potts $q = 7$	-	-	0,7730589	-
BC $S=1$ (tricrítico)	0,039	0,56	0,609384	0,967907

Tabela 4.2: Tabela com os valores esperados (calculados da equação (4.31)) dos expoentes críticos  $\beta$  e  $\nu$ , temperatura crítica  $T_c$  e expoente de crescimento  $\beta_W$  para o modelo de Potts com  $q$  estados e o modelo de Blume-Capel  $S = 1$  no ponto tricrítico.

## Capítulo 5

# Mapeamento dos Estados de Spins em Superfícies

Neste capítulo vamos definir como é feito o mapeamento das configurações de spins dos modelos magnéticos em um modelo de crescimento, iremos depositar ou evaporar partículas em um substrato liso bidimensional. O mesmo raciocínio usado para mapear o modelo de Blume-Capel, Potts e Relógio pode ser usado para mapear outros modelos com spins discretos. Já para modelos com spins contínuos, pode-se usar o mapeamento utilizado no modelo de Rotor Planar.

### 5.1 Mapeamento para Spins Discretos

No estudo do modelo de Domany Kinzel [21] onde foi usada uma técnica de mapeamento semelhante a que vamos usar aqui, foram detectadas as transições de fase do modelo foi usada uma regra de mapeamento do tipo aleatória, similar a que vamos usar aqui. Dada uma configuração de spins em um dado instante  $t$   $\{\sigma_i(t)\}=[\sigma_1(t), \dots, \sigma_N(t)]$  gerada, por exemplo, por algum algoritmo de Monte Carlo, o processo de crescimento da superfície consiste em somar todos os valores assumidos pela variável de spin  $\sigma_i(t')$  de um tempo inicial 0 até um tempo  $t$ . Para

uma única sequência de estados de spins ( $\{\sigma_i(0)\}, \{\sigma_i(1)\}, \dots, \{\sigma_i(t)\}$ ) corresponde uma determinada superfície  $\{h_i(t)\}$  com a altura  $h_i(t)$  no sítio  $i$  dada por

$$h_i(t) \equiv \sum_{t'=0}^t \rho_i(t'), \quad (5.1)$$

onde  $\rho_i(t')$  é uma variável definida no sítio  $i$ . Por exemplo, para o modelo de Blume-Capel com  $S = 1$  a variável do sítio  $i$  assumirá o valor da variável de spin neste sítio,  $\rho_i(t') = \sigma_i(t')$ , para o modelo de Potts com  $q = 2$  temos  $\rho_i(t') = +1$  ou  $-1$  quando  $\sigma_i(t') = 0$  ou  $1$ ,  $\rho_i(t') = +1, 0$  ou  $-1$  quando  $\sigma_i(t') = 0, 1$  ou  $2$  para o modelo de Potts  $q = 3$ , e assim por diante, do mesmo modo para o modelo de Relógio com  $p$  estados. O perfil gerado a partir da equação (5.1) define um processo de crescimento do tipo SOS (solid-on-solid), resultando em agregados compactos e uma superfície sem reentrância. A interface evolui no tempo pela deposição ( $\rho > 0$ ) e evaporação ( $\rho < 0$ ) das partículas no substrato inicialmente liso. Na fase de baixas temperaturas (fase ferromagnética) nos modelos de spins nós esperamos que o processo de evaporação/deposição domine e a altura média da interface aumente com o tempo. Já na fase de altas temperaturas (fase paramagnética) os dois processos, deposição e evaporação, ocorrem com mesma probabilidade, em média, fazendo com que a velocidade de crescimento da interface caia a zero.

A figura 5.1 mostra alguns exemplos de superfícies típicas geradas a partir da equação (5.1) para o modelo de Ising com  $S = 1/2$  na rede quadrada. Note que para  $T < T_c$  a deposição é aleatória descorrelacionada (o comprimento de correlação é pequeno) mas o sistema está magnetizado, por isso a altura média do perfil é maior do que para  $T > T_c$  onde o crescimento da superfície também é descorrelacionado. Para  $T \simeq T_c$  o sistema é caracterizado por todos tamanhos possíveis de agregados causando assim grandes flutuações nas alturas pois o sistema está correlacionado.

Nesse ponto é bom ressaltar que para todos os modelos, as superfícies tem a mesma aparência, mudando é claro o valor da altura  $h_i$  pois o método de deposição (ou corrosão) do substrato depende do modelo em questão.

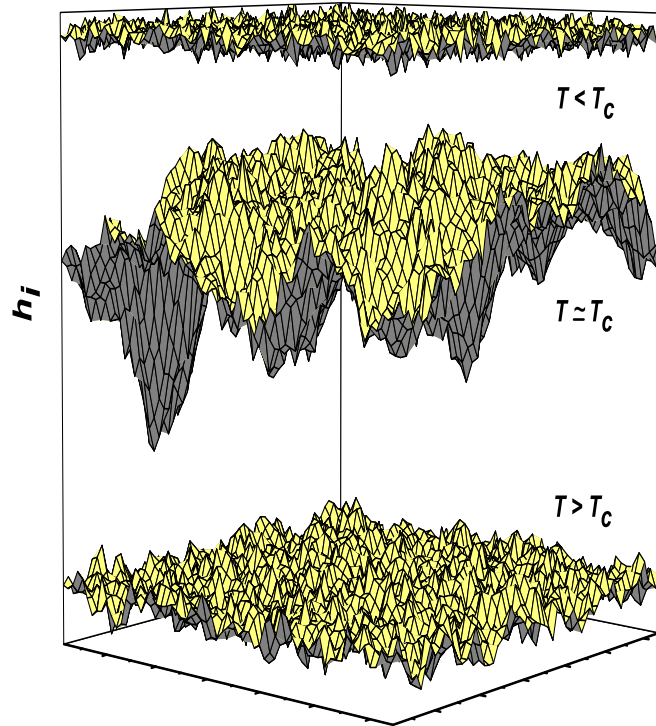


Figura 5.1: Superfícies geradas a partir de configurações de spins (de equilíbrio) do modelo de Ising com  $S = 1/2$  na rede quadrada. São mostrados três superfícies típicas para  $T < T_c^{(E)}$ ,  $T \simeq T_c^{(E)}$  e  $T > T_c^{(E)}$ , que foram geradas utilizando o mesmo tempo de simulação.

## 5.2 Mapeamento para Spins Contínuos

Para o modelo do Rotor Planar (duas dimensões) temos duas componentes de spins,  $S_x = \cos(\theta)$  e  $S_y = \sin(\theta)$ , com ângulo  $(\theta)$  variando num intervalo de  $0 < \theta < 2\pi$ . Sendo assim, as componentes de spins  $S_x$  e  $S_y$  podem assumir valores reais entre  $-1 < S_x < 1$ , positivos (deposição) e negativos (corrosão). Note que, agora, diferentemente dos modelos com estados discretos, estamos depositando um “gás de partículas”, de forma que as variáveis para a altura são números reais. Para esse modelo, a variável do sitio  $i$  da equação (5.1) é definida por

$$\rho_i(t') = S_x \quad (5.2)$$

Então, temos que para os casos em que os estados de spins são contínuos a altura  $h_i(t)$  no sítio  $i$  vai ser dada por

$$h_i(t) \equiv \sum_{t'=0}^t S_x(t'). \quad (5.3)$$

Como não temos nenhuma anisotropia no modelo considerado (Rotor Planar), tanto faz usar a componente  $S_x$  ou  $S_y$  na equação (5.3) que os resultados são os mesmos. Na figura 5.2, mostramos dois exemplos de superfícies típicas geradas a partir da equação (5.3) para o modelo do rotor planar, sendo uma na transição  $T = T_{BKT}$  e outra na fase desordenada  $T > T_{BKT}$ . Para uma maior clareza da figura 5.2, não foi mostrada a superfície para  $T < T_{BKT}$ , que é muito semelhante

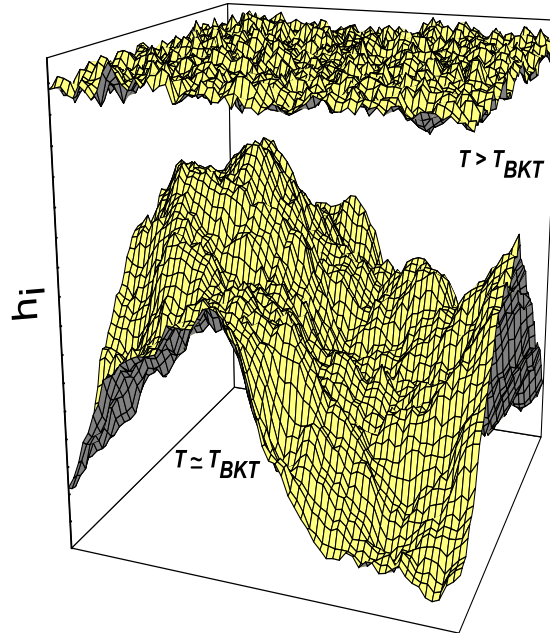


Figura 5.2: Superfícies geradas a partir de configurações de spins (de equilíbrio) do modelo de Rotor Planar em uma rede quadrada. São mostrados duas superfícies típicas para  $T < T_{BKT}$  e  $T \approx T_{BKT}$ .

---

ao caso  $T = T_{BKT}$ . Isso era esperado, pois para temperaturas menores que  $T_{BKT}$  o sistema é crítico.

# Capítulo 6

## Modelos de Potts e Blume-Capel

Usando a técnica de Monte Carlo, simulamos o modelo de Potts com  $q$  estados e o modelo de Blume-Capel com  $S = 1$ , cujos resultados serão apresentados neste capítulo. O modelo de Relógio com  $p$  estados e o modelo Rotor Planar em redes quadradas serão discutidos no próximo capítulo. Nosso objetivo básico é estudar o comportamento das interfaces obtidas através de mapeamentos das configurações de spins. Verificaremos que essas superfícies apresentam um pico de rugosidade nas temperaturas críticas dos modelos. Estudaremos essas interfaces utilizando as ferramentas já usadas em modelos de crescimento de interfaces reais, como aquelas que se desenvolvem entre dois meios de materiais diferentes. Calcularemos os expoentes de Hurst  $H$ , de crescimento  $\beta_W$  e da rugosidade  $\alpha$ . Verificaremos numericamente a relação analítica já deduzida anteriormente, equação (4.31), entre os expoentes de crescimento e os expoentes críticos dos modelos. Finalmente, discutiremos a influência da ordem da transição sobre a dinâmica de crescimento dessas superfícies.

Ressaltamos aqui que todas as simulações deste trabalho foram feitas com condição inicial em que todos os spins estão no estado de maior valor  $S$  do spin e com um substrato liso, onde faremos a corrosão e deposição de partículas. Só depois do sistema termalizado é que calculamos as quantidades de interesse, com exceção



do expoente de crescimento  $\beta_W$  que é calculado sem que o sistema termalize.

Para cada expoente calculado realizamos um tipo de simulação diferente, por exemplo, para calcular o expoente de crescimento  $\beta_W$  não é preciso esperar o sistema termalizar, o que significa pouco custo computacional. Sendo assim, podemos simular redes de tamanhos maiores ( $L = 512$ ). Já para calcular os expoentes da rugosidade  $\alpha$ , de Hurst  $H$  e dinâmico  $z$  é preciso esperar o sistema termalizar, o que implica em grandes tempos reais de simulação, limitando o maior tamanho de rede usado para estes cálculos ( $L = 224$ ). O número de amostras também foi ajustado de acordo com o expoente medido, variando de  $M = 100$  até  $M = 2000$  amostras.

## 6.1 Resultados para os Modelos de Potts e Blume-Capel

Para simplificar a nomenclatura dos modelos, vamos em alguns casos adotar a seguinte notação:

- modelo de Blume-Capel com spin  $S \implies BC_S$
- modelo de Blume-Capel com spin  $S=1$  e anisotropia  $d \implies BC_{d=0,d_{tc},1.9\dots}$
- modelo de Ising com spin  $S = 1/2 \implies I_{S=1/2}$
- modelo de Potts com  $q$  estados  $\implies P_q$
- modelo de Potts com  $q = 2, 3, 4, \dots \implies P_{q=2,3,4,\dots}$

### 6.1.1 Expoente de Hurst $H$ e Comprimento Característico

$\varepsilon^*$

Para caracterizar as correlações espaciais da superfície no regime em que  $\beta_W \simeq 1/2$ , ou seja, para tempos ( $t \gg t_c$ ), calculamos o expoente de Hurst  $H$  de acordo com a definição da equação (4.10). Para calcular o expoente  $H$  precisamos calcular a rugosidade local destas superfícies para vários valores de tamanho da janela  $\varepsilon$  e fazer o gráfico  $W(\varepsilon)$  em função da janela  $\varepsilon^2$  em escalas logarítmicas. A figura 6.1 mostra um gráfico típico de  $W(\varepsilon)$  em função da janela  $\varepsilon$  para o modelo de Blume-Capel com  $S = 1$  no ponto tricrítico ( $d_{tc} = 1,9655$  e  $T_c = 0,609384$  [40]) para vários tamanhos de rede ( $L$ ). Note que  $W(\varepsilon)$  segue uma lei de potência com  $\varepsilon$ , para  $\varepsilon < \varepsilon^*$ , e depois satura quando  $\varepsilon \rightarrow L$ , onde  $\varepsilon^*$  é o comprimento de janela onde ocorre a mudança no comportamento da rugosidade  $W$ . A inclinação da curva, na região em que  $\varepsilon < \varepsilon^*$ , é justamente o expoente de Hurst  $H$ . Note que o comprimento característico  $\varepsilon^*$  cresce com o aumento da rede ( $L$ )

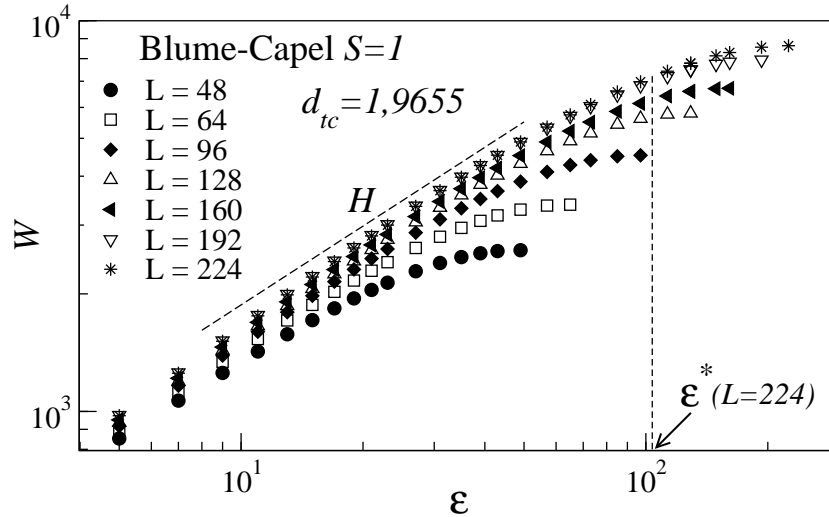


Figura 6.1: Comportamento da rugosidade com a escala  $\varepsilon$  para os modelos de Blume-Capel com  $S = 1$  ( $d_{tc}=1,9655$ ). A inclinação da reta, para  $\varepsilon < \varepsilon^*$  (linha tracejada), é o expoente de Hurst  $H$ . As simulações foram feitas para vários tamanhos de rede ( $L$ ). Foram feitas médias com 100 amostras e um tempo de simulação  $t = 2 \times 10^5 PMC$ .

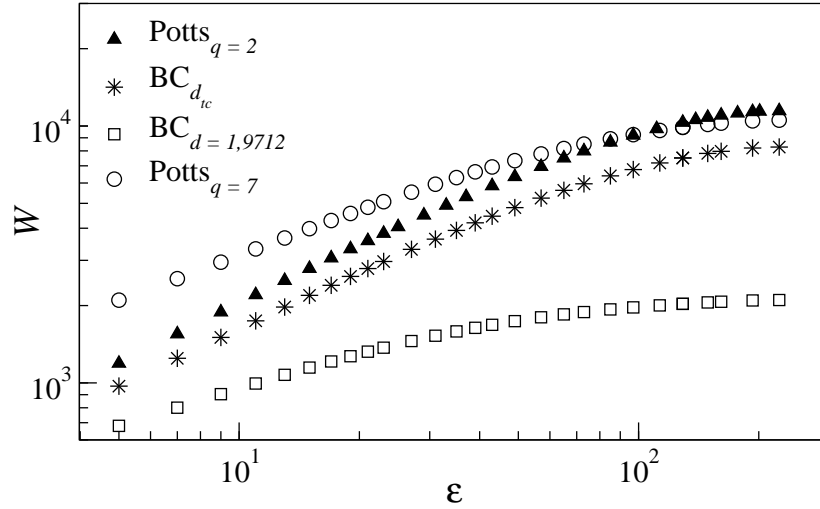


Figura 6.2: Comportamento da rugosidade com a escala  $\varepsilon$  para os modelos de Blume-Capel com spin  $S$  e Potts com  $q$  estados para  $q = 2$  (segunda ordem),  $d = 1.9655$  (ponto tricrítico) e  $d = 1.9712$  e  $q = 7$  (primeira ordem). Este gráfico foi feito para um tamanho típico de rede ( $L = 224$ ). Foram feitas médias com 100 amostras .

A figura 6.2 mostra o comportamento da rugosidade com várias escalas  $\varepsilon$  para o modelo de Blume-Capel  $S = 1$  e Potts com  $q$  estados para o maior tamanho de rede ( $L = 224$ ) usada para esta medida. Note que para todos os modelos a rugosidade cresce com o tamanho da janela  $\varepsilon$  até um certo valor, depois satura quando  $\varepsilon \rightarrow L$ . Na figura 6.1 mostramos um valor típico ( $L = 224$ ) do comprimento característico ( $\varepsilon^* = 103(1)$ ), comprimento onde ocorre uma mudança de comportamento na rugosidade, ou seja, um “*cruzamento*”. Observe que este valor cresce com o tamanho da rede  $L$  assim como o valor do expoente de Hurst  $H$ , como mostrado na fig. 6.1. As figuras 6.3 e 6.4 mostram, respectivamente, o comportamento do expoente de Hurst e do comprimento característico  $\varepsilon^*$  em função do tamanho da rede  $L$ .

Analisando a figura 6.3 do expoente de Hurst  $H$  para vários sistemas, concluímos que o expoente de Hurst  $H$  tem aproximadamente o mesmo valor para sistemas nos quais ocorre transição de segunda ordem ( $H \approx 0,725$ ), são eles: Potts ( $q = 2$  e  $q = 3$ ) e Blume-Capel ( $d = 0$ ) e para o ponto tricrítico ( $d_{tc}$ ). Nas transições de primeira ordem, onde o comprimento de correlação é finito, o expoente de Hurst tem valores diferentes dos sistemas em que ocorre transição de segunda ordem. Observe que a

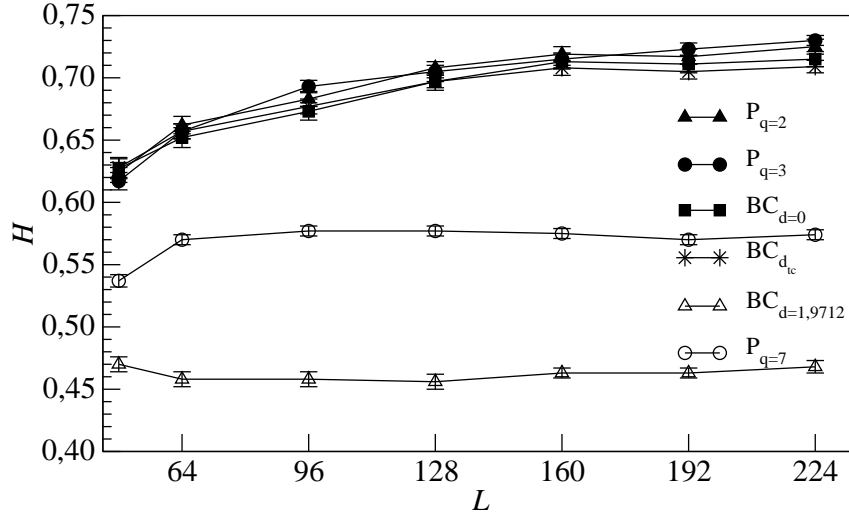


Figura 6.3: Expoente de Hurst  $H$  em função do tamanho da rede  $L$  para o modelo de Potts com  $q$  estados e Blume-Capel spin- $S$ . A menor rede corresponde a  $L = 48$ . Foram feitas médias com 100 amostras.

curva para os modelos de Potts  $q = 7$  (primeira ordem) e Blume-Capel  $d = 1,9712$  (primeira ordem) têm valores assintóticos diferentes, isto é explicado pelo fato de que para Potts  $q = 7$  o sistema ainda tem uma certa influência de segunda ordem, por isso seu valor é maior ( $H \approx 0,57$ ) que o Blume-Capel  $d = 1,9712$  ( $H \approx 0,47$ ). Nós esperamos que o valor do expoente de Hurst  $H$  tenha aproximadamente o mesmo valor  $H \approx 1/2$ , que é o valor esperado em um sistema onde o crescimento é feito através de uma deposição aleatória. Comportamento similar ocorre com outros valores de  $d$  no modelo de Blume-Capel e  $q$  no modelo de Potts. Todos esses valores calculados serão discutidos na tabela 6.1.

Analisando a figura 6.4, do comprimento característico  $\varepsilon^*$  para vários sistemas em função do tamanho da rede  $L$ , vemos que para os sistemas nos quais ocorrem transição de segunda ordem, esse comprimento cresce com o tamanho da rede seguindo uma lei de potência do tipo  $\varepsilon^* \sim L^\lambda$ . Obtemos, aproximadamente os mesmos valores dos expoentes, a saber,  $\lambda = 0,85(2)$  para  $P_{q=3}$ ,  $\lambda = 0,84(1)$  para  $P_{q=2}$ ,  $\lambda = 0,84(1)$  para  $BC_{d=0}$  e  $\lambda = 0,8289(1)$  para  $BC_d = d_{tc}$ . A reta da figura 6.4 é a regressão feita no ponto tricrítico no modelo de Blume-Capel (estrelas).

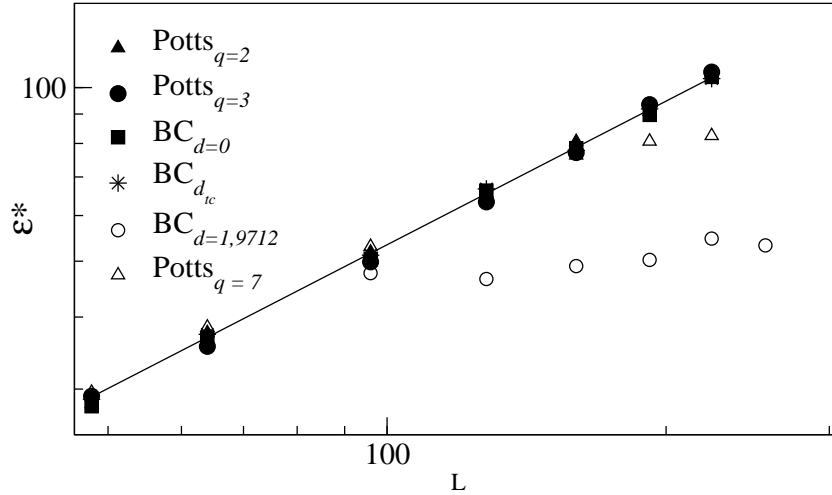


Figura 6.4: Comprimento característico  $\varepsilon^*$  em função de  $L$  (escala logarítmica) para os modelos de Potts com  $q$  estados e Blume-Capel spin-S. Este gráfico foi feito para os seguintes tamanhos de rede ( $L = 48, 64, 96, 128, 160, 192$  e  $224$ ). Foram feitas médias com 100 amostras.

Portanto, este comprimento característico  $\varepsilon^*$  diverge com o tamanho da rede  $L$ . De fato, na referência [23] os autores associam este comprimento característico  $\varepsilon^*$  ao comprimento de correlação  $\xi$  do sistema magnético. Sendo assim, podemos entender por que para sistemas em que ocorre transições de primeira ordem o comprimento característico satura e para transições de segunda ordem diverge com o tamanho do sistema  $L$ , pois o comprimento de correlação tem este mesmo comportamento, ou seja, o comprimento característico  $\varepsilon^*$  é proporcional ao comprimento de correlação  $\xi$ .

### 6.1.2 Expoente de Crescimento $\beta_W$

A partir da definição (4.4) podemos calcular o expoente de crescimento  $\beta_W$  para os modelos em questão. Para isso, basta monitorar o crescimento da rugosidade  $W$  com o tempo e analisar este comportamento. Na figura 6.5 mostramos um gráfico típico do comportamento da rugosidade  $W$  em função do tempo para o modelo de Ising  $S=1/2$  em  $T = T_c$  para vários tamanhos de rede  $L$ . Note que diferentemente do que acontece no modelo de Deposição Balística [17], a rugosidade não satura

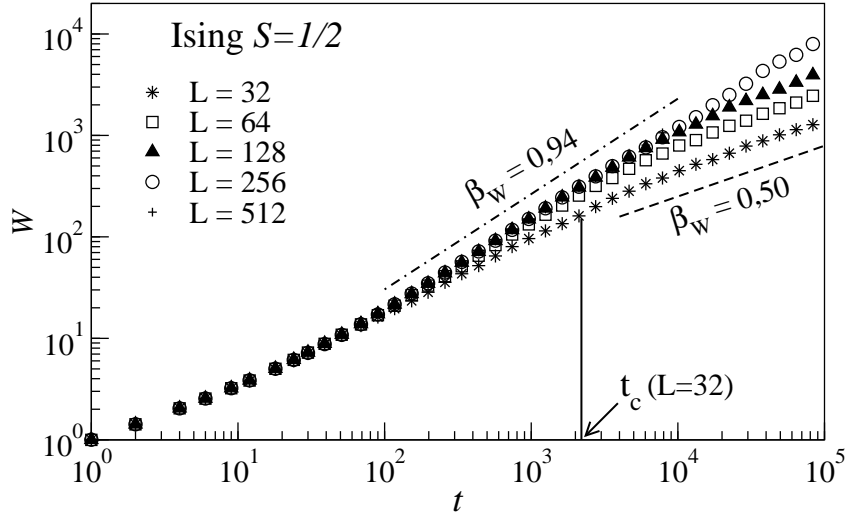


Figura 6.5: Rugosidade  $W$  em função do tempo  $t$  para o modelo de Ising  $S=1/2$  em  $T = T_c$  para vários tamanhos de rede  $L$ . A linha contínua indica o valor de  $t_c$  para uma rede finita e as linhas pontilhadas são guias para dois valores extremos de  $\beta_W$ . Foram feitas médias sobre 1000 amostras e um tempo de simulação de  $t = 10^5 PMC$ .

com o tempo, mas tem dois regimes diferentes. Um para  $t < t_c$  em que o expoente de crescimento atinge um valor assintótico ( $L \rightarrow \infty$ )  $\beta_W \approx 0,94$  e outro para  $t > t_c$  em que o expoente de crescimento é  $\beta_W \approx 0,50$ . O tempo em que ocorre essa mudança de comportamento  $t_c$ , é o tempo de relaxação do sistema. Observe também que esse tempo  $t_c$  aumenta com o tamanho da rede  $L$ .

Na figura 6.6 mostramos um comportamento do tempo de “cruzamento”  $t_c$  em função do tamanho da rede para o modelo de Ising  $S = 1/2$ . Observe que esse segue uma lei de potência com o tamanho da rede ( $t_c \sim L^{z_W}$ ), sendo  $z_W \approx 2,16(5)$  o expoente dinâmico, que está concordando com o valor do expoente dinâmico  $z \approx 2,17(5)$  para o algoritmo de banho térmico encontrado na referência [45].

Na figura 6.7 mostramos o comportamento da rugosidade  $W$  em função do tempo para temperaturas fora da criticalidade ( $|T - T_c| = 1$ ) para o modelo de Blume-Capel spin  $S$  e Potts com  $q$  estados. Após um pequeno tempo todos os sistemas apresentam o mesmo valor do expoente de crescimento  $\beta \approx 1/2$ . A reta pontilhada na figura 6.7 é um guia que nos mostra uma inclinação  $\beta = 1/2$ .

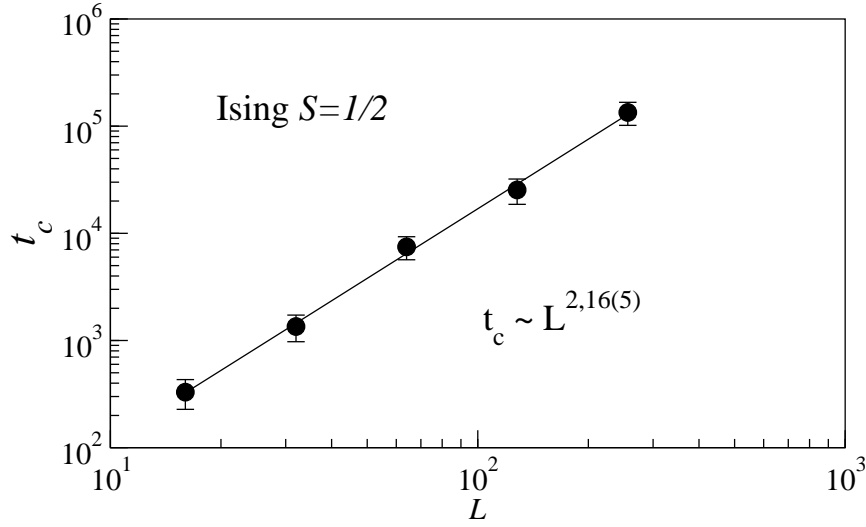


Figura 6.6: Tempo de relaxação  $t_c$  em função do tamanho da rede  $L$  para o modelo de Ising  $S=1/2$  em  $T = T_c$ . Este gráfico foi feito para os seguintes tamanhos de rede ( $L = 16, 32, 64, 128$  e  $256$ ) e média sobre 1000 amostras.

Interpretamos este valor como sendo fruto de uma simples deposição aleatória, pois fora da criticidade os sistemas estão descorrelacionados.

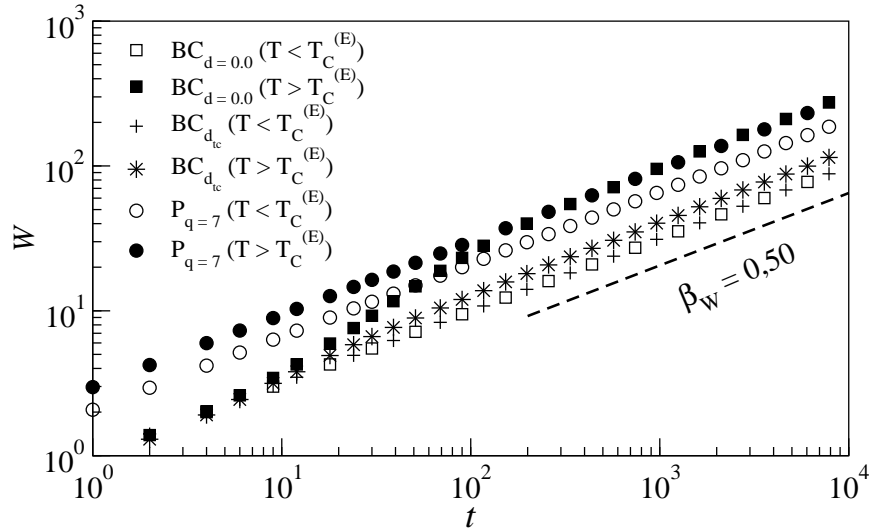


Figura 6.7: Rugosidade  $W$  em função do tempo  $t$  para o modelo de BC e Potts em  $T \neq T_c$ . Este gráfico foi feito para um tamanho de rede  $L = 64$ . Foram feitas médias com 100 amostras.

Na figura 6.8 mostramos o comportamento da rugosidade  $W$  em função do tempo para os modelos de Blume-Capel spin  $S$  e Potts com  $q$  estados, na

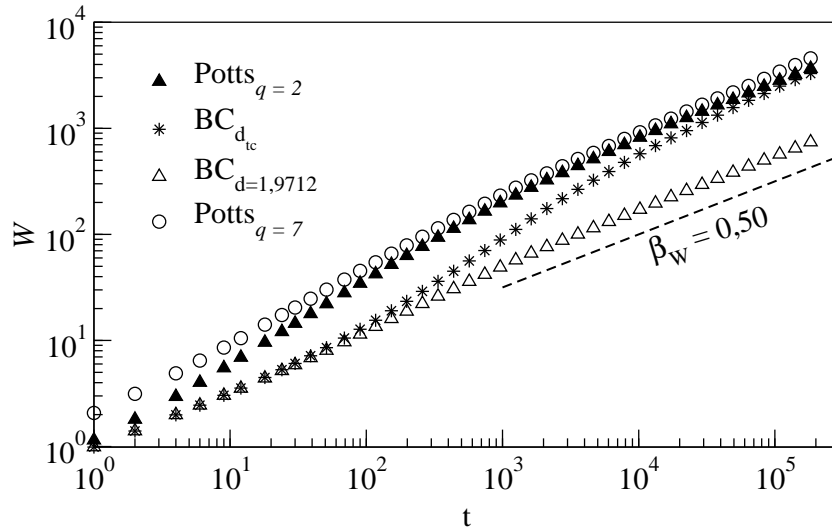


Figura 6.8: Rugosidade  $W$  em função do tempo  $t$  para o modelo de Blume-Capel  $S = 1$  e Potts com  $q$  estados na criticalidade  $T = T_c$ . A linha pontilhada é um guia para  $\beta = 1/2$ , este gráfico foi feito para um tamanho típico de rede  $L = 64$  e as médias com 1000 amostras.

criticalidade  $T = T_c$ , para um tamanho de rede típico  $L = 64$ . Note que para tempos grandes  $t \gg t_c$ , o expoente de crescimento é aproximadamente o mesmo para todos os modelos ( $\beta_W \simeq 1/2$ ). A diferença é que para atingir o regime estacionário  $\beta_W = 1/2$ , cada sistema demora um tempo de relaxação  $t_c$  diferente. No modelo de Blume-Capel para  $d = 1,9712$ , o sistema demora menos para relaxar do que os outros sistemas. O que acontece é que neste modelo a transição de fase é de primeira ordem, em que o comprimento de correlação é finito. Apesar do modelo de Potts  $q = 7$  ter uma transição de primeira ordem, ele tem ainda um caráter de segunda ordem, acarretando assim num  $t_c$  maior que para  $d = 1,9712$  no modelo de Blume-Capel.

De acordo com a definição (4.4), na criticalidade  $T = T_c$ , a inclinação da reta da figura 6.5 para tempos pequenos  $t \ll t_c$ , é o expoente de crescimento  $\beta_W$  para o tamanho de rede em questão. Observando a figura 6.5 concluímos que este expoente depende do tamanho da rede  $L$ . A figura 6.9 mostra o comportamento desse expoente em função de  $1/L^\phi$  para o modelo de Blume-Capel com  $d = d_{tc}$



e modelo de Potts para  $q = 3$  e  $q = 10$ . Note que  $\phi$  é apenas um expoente

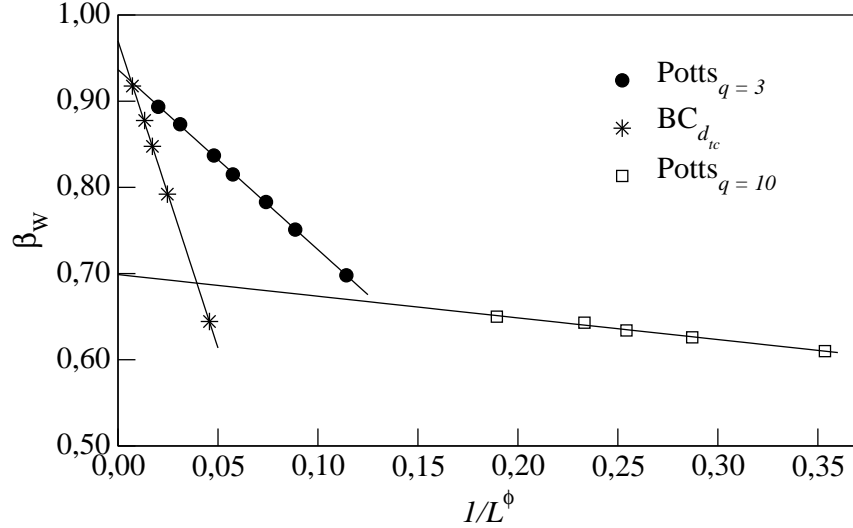


Figura 6.9: Expoente de crescimento  $\beta_W$  em função de  $1/L^\phi$  para o modelo de Blume-Capel  $S = 1$  ( $d_{tc}$ ) e modelo de Potts ( $q = 3$  e  $q = 10$ ) em  $T = T_c$ . Este gráfico foi feito para vários tamanhos de rede ( $L=32, 48, 64, 128$  e  $256$ ), as linhas são os valores da extrapolação ( $L \rightarrow \infty$ ). Foram feitas médias com 1000 amostras em todos os tamanhos.

de ajuste para obter a melhor reta entre os pontos, ou seja, não depende dos expoentes críticos ( $\beta, \nu e z$ ) dos modelos em questão. Para cada caso obtemos um valor de  $\phi$  diferente, a saber,  $\phi = 0,88$  para Blume-Capel com  $d = d_{tc}$ ,  $\phi = 0,63$  e  $\phi = 0,30$  para o modelo Potts com  $q = 3$  e  $q = 10$  estados, respectivamente. Os valores extrapolados ( $L \rightarrow \infty$ ) para o expoente de crescimento  $\beta_W$  são mostrados na tabela 6.1 e na figura 6.10.

Na tabela 6.1 mostramos os valores calculados analiticamente pela equação (4.29) para o expoente de crescimento ( $\beta_W^{(E)}$  - o índice ( $E$ ) é para indicar cálculo exato), e os valores calculados via grupo de renormalização [40] da temperatura crítica  $T_c^{(E)}$ , e também os resultados obtidos neste trabalho para o expoente de crescimento  $\beta_W$ , temperatura crítica  $T_W$  e expoente de Hurst  $H$  para alguns casos de transição de primeira e segunda ordem nos modelos de Potts com  $q$  estados e Blume-Capel spin  $S$ . Salientamos que no modelo Potts para  $q = 6$  e  $q = 7$ , e no ponto tricrítico para modelo de Blume-Capel  $S = 1$  com  $d = d_{tc}$  os erros da

	$\beta_W^{(E)}$	$\beta_W$	$T_c^{(E)}$	$T_W$	$H$
Ising $S = 1/2$	0,942	0,945(4)	2,269	2.266(3)	0,725(6)
Ising $S = 1$	0,942	0,950(8)	1,694	1,695(2)	0,715(6)
Potts $q = 3$	0,939	0,937(1)	0,995	0,993(5)	0,730(4)
Potts $q = 4$	0,969	0,970(6)	0,910	0,909(2)	-
Potts $q = 5$	-	0,941(1)	0,852	0,849(2)	-
Potts $q = 6$	-	0,830(6)	0,8076	0,8070(5)	-
Potts $q = 7$	-	0,800(1)	0,7731	0,7732(5)	0,574(3)
Potts $q = 10$	-	0,699(4)	0,701	0,700(2)	-
$BC_d = 1.95$	0,942	0,946(7)	0,656	0,656(1)	-
$BC_d = 1.9655$	0,968	0,970(3)	0,6094	0,6090(5)	0,709(5)
$BC_d = 1.9712$	-	0,820(7)	0,588	0,590(2)	0,468(5)
$BC_d = 0$	0,942	0,950(8)	1,694	1,695(2)	0,715(6)

Tabela 6.1: Tabela com os valores dos expoentes de crescimento ( $\beta_W^{(E)}$  e  $\beta_W$ ), temperatura crítica ( $T_C^{(E)}$  e  $T_W$ ) e expoente de Hurst ( $H$ ), para os modelos de Potts com  $q$  estados e Blume-Capel spin-S.

extrapolação na temperatura crítica estão na quarta casa decimal, enquanto que para os outros casos este erro está na terceira casa decimal. Observe que tanto o expoente de crescimento  $\beta_W$  como a temperatura crítica  $T_W$  estão de acordo como o esperado até na terceira casa decimal, que foi a precisão obtida por nós com os tempos, tamanhos e números de amostras estudados.

Na figura 6.10 mostramos o comportamento do expoente de crescimento  $\beta_W$  (valores extrapolados como na fig. 6.9) e do expoente de Hurst  $H$  em função do parâmetro de anisotropia de rede  $d$  para o modelo de Blume-Capel com spin  $S = 1$  (figura 6.10(b)) e para o modelo de Potts com  $q$  estados (figura 6.10(a)) em função do número de estados  $q$  do modelo. Observe que obtemos uma diferença

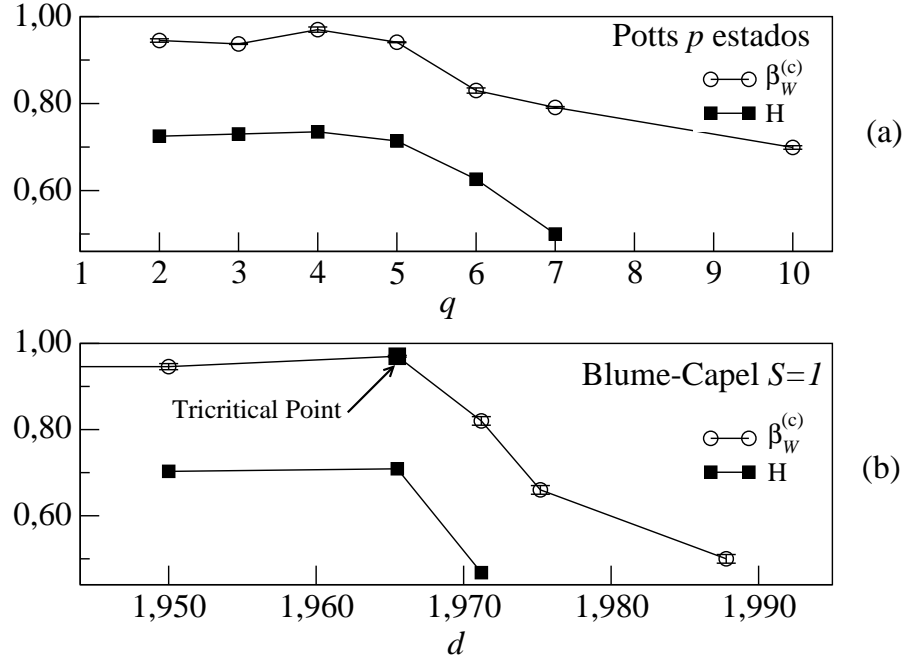


Figura 6.10: Expoente de crescimento  $\beta_W$  e expoente de Hurst  $H$  em função do parâmetro ( $d$ ) de anisotropia de rede em  $T = T_c$  para o modelo de Blume-Capel  $S = 1$  (em baixo) e em função do número de estados ( $q$ ) para o modelo de Potts com  $q$  estados (em cima). Os valores deste gráfico são todos extrapolados no limite em que ( $L \rightarrow \infty$ ).

clara entre o valor do expoente de crescimento  $\beta_W$  para uma transição de primeira ordem ( $q < 4$  e  $d > d_{tc}$ ) e seu valor em uma transição de segunda ordem ( $q > 4$  e  $d < d_{tc}$ ).

Para o modelo de Blume-Capel com spin  $S = 1$ , o ponto tricrítico ( $d = d_{tc}$ ) é a fronteira entre a linha de transição de primeira ordem com a de segunda ordem [40], como mostrado na figura 6.14. No diagrama (fig. 6.10 (b)), obtido via o expoente de crescimento, o valor desse é aproximadamente o mesmo  $\beta_W = 0,942(5)$  para transições na linha de segunda ordem (veja tabela 6.1). No ponto tricrítico  $d_{tc} = 1,9655$ , obtemos um pico suave no valor do expoente de crescimento, diferenciando-se assim do valor deste para as linhas de primeira e de segunda ordem. Na linha de primeira ordem o valor de  $\beta_W$  vai diminuindo com o aumento de  $d$  até atingir  $\beta_W = 0,50$ , o que já era esperado, pois nesse caso o comprimento de correlação  $\xi$  do sistema é finito, assim a deposição é aleatória descorrelacionada resultando em

$\beta_W = 0,50$ .

No modelo de Potts com  $q$  estados também é observado um mesmo comportamento do expoente de crescimento  $\beta_W$ , ou seja, valores diferentes para transições de segunda e primeira ordem. Os valores dos expoentes de crescimento esperados e calculados estão na tabela 6.1, onde vemos que para  $q > 4$  o valor deste expoente vai também em direção de  $\beta_W = 0,50$ . O problema no modelo de Potts é que mesmo onde ocorre transição de primeira ordem para  $q > 4$ , ainda existe um caráter de transição de segunda ordem para valores de  $q$  próximos de  $q = 4$ . Por isso, para  $q = 10$  o valor do  $\beta_W$  ainda não é o esperado.

O expoente de Hurst  $H$  apresenta um comportamento similar ao do expoente  $\beta_W$ , apenas com uma convergência mais rápida para o valor  $H = 0,50$  nos sistemas em que o comprimento de correlação é pequeno.

### 6.1.3 Diagrama de Fases

Nesta seção vamos apresentar um método alternativo que determina as temperaturas críticas dos modelos de Potts com  $q$  estados e Blume-Capel spin  $S$  com uma boa precisão (erros na terceira ou quarta casa decimal). Ressaltamos aqui que existem outros métodos que determinam a temperatura crítica destes modelos com maior precisão, mas a idéia aqui é apresentar um novo método que, sem precisar usar funções de partição ou qualquer outro parâmetro termodinâmico, determine a temperatura crítica dos modelos em questão.

A figura 6.11 mostra a rugosidade  $W$  em função da temperatura  $T$  para o modelo de Blume-Capel com spin  $S$  e Potts com  $q$  estados para um tamanho de rede típico  $L = 64$ . Observe que existe um pico na rugosidade próximo à temperatura crítica dos modelos mencionados (para qualquer valor de  $d$  e  $q$ ), na transição de primeira ordem esse pico é mais acentuado do que na transição de segunda ordem e até mesmo no ponto tricrítico ( $d_{tc}$ ).

Na figura 6.12 mostramos um gráfico típico do comportamento da rugosidade  $W$  em função da temperatura  $T$  para o modelo de Blume-Capel com  $S = 1$  no ponto tricrítico. Note que existe um pico na rugosidade próximo à temperatura crítica termodinâmica do modelo, como também uma dependência com o tamanho da rede, à medida que  $L$  aumenta o pico vai se aproximando da temperatura crítica do modelo. O gráfico inserido na figura 6.12 mostra uma ampliação na região onde tem o pico para uma tamanho típico de rede  $L = 40$ . Para melhor determinação da temperatura no pico  $T_W$ , precisamos fazer um refinamento em torno da temperatura de pico com um intervalo cada vez menor.

Na figura 6.13 mostramos o valor desta temperatura  $T_W(L)$  para vários valores de  $L$  e encontramos o valor assintótico ( $L \rightarrow \infty$ ) para  $d = 0,0$  no modelo de Blume-Capel com  $S = 1$  e Potts com  $q = 10$ . Comportamentos similares ocorrem para outros valores de  $d$  e  $q$ . Nesta figura um comportamento do tipo  $T_c = T_W + AL^{-1/x}$  foi usado. Note que para  $d = 0$  um ajuste foi obtido com  $x = \nu = 1$  (classe de universalidade de Ising) e para  $q = 10$  um bom ajuste foi obtido com expoente

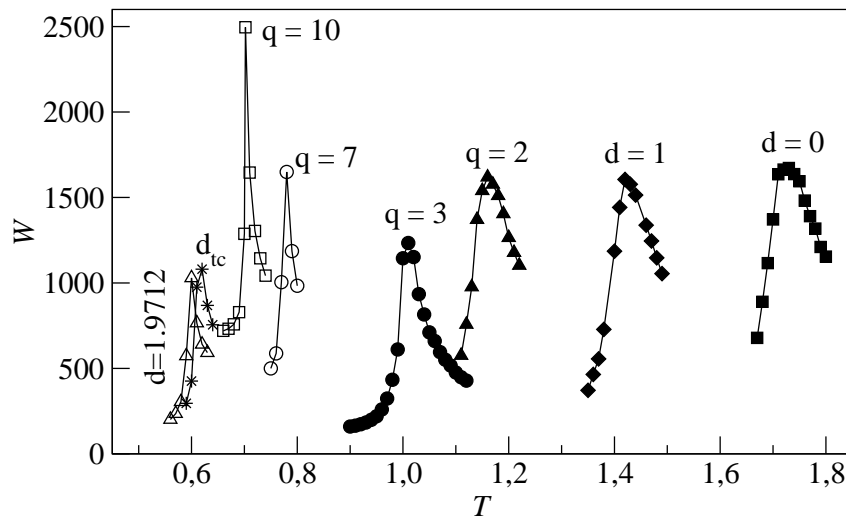


Figura 6.11: Rugosidade  $W$  em função da Temperatura  $T$  para o modelo de Blume-Capel  $S=1$  ( $d = 0, 1.0, 1.9655$  e  $1.9712$ ) e Potts com  $q$  estados ( $q = 2, 3, 7$  e  $10$ ). O tempo esperado para o sistema termalizar foi  $t = 20000$  PMC e as médias foram feitas sobre 200 amostras.

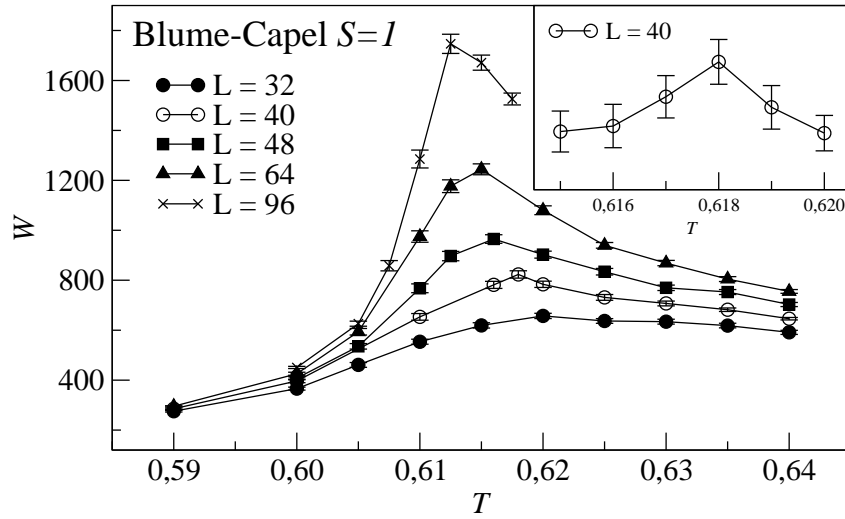


Figura 6.12: Rugosidade  $W$  em função da Temperatura  $T$  para o modelo de Blume-Capel  $S=1$  ( $d_{tc}$ ). Este gráfico foi feito para vários tamanhos de rede ( $L$ ). Foram feitas médias sobre 100 amostras e o tempo para o sistema termalizar foi  $t = 200000$  (PMC).

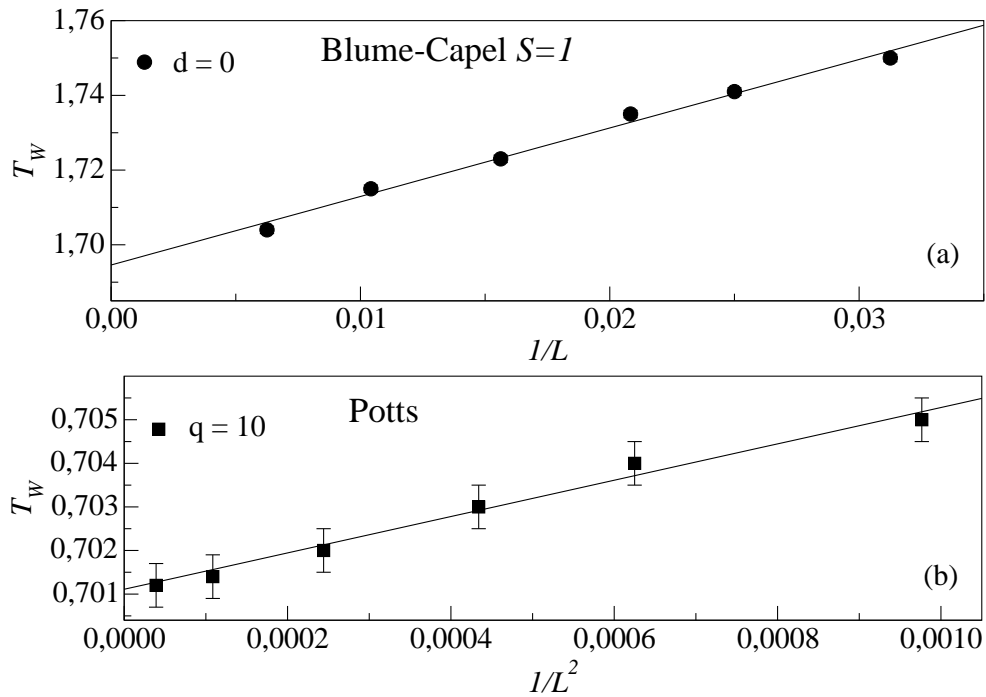


Figura 6.13: Rugosidade  $W$  em função do inverso do tamanho da rede ( $L = 32, 40, 48, 64$  e  $96$ ) para o modelo de Blume-Capel  $S = 1$  ( $d = 0, 0$ ) e Potts com  $q$  estados ( $q = 10$ ). O tempo esperado para o sistema termalizar foi  $t = 20000$  PMC e as médias foram feitas sobre 200 amostras.

$x = d = 2$  (transição de primeira ordem).

A figura 6.14 mostra o diagrama de fases do modelo de Blume-Capel  $S = 1$  encontrado de duas maneiras diferentes: uma usando grupo de renormalização fenomenológico [40], e outra da maneira proposta neste trabalho. Observando este diagrama de fases vemos que o uso da rugosidade  $W$  para detectar transições de fase em sistemas magnéticos se mostra um método bastante eficiente. Nessa técnica não precisamos em momento algum de calcular funções termodinâmicas, e os diagramas de fases são obtidos com um custo computacional relativamente pequeno, em alguns casos, como por exemplo para o cálculo do expoente de crescimento nem é preciso esperar o sistema termalizar.

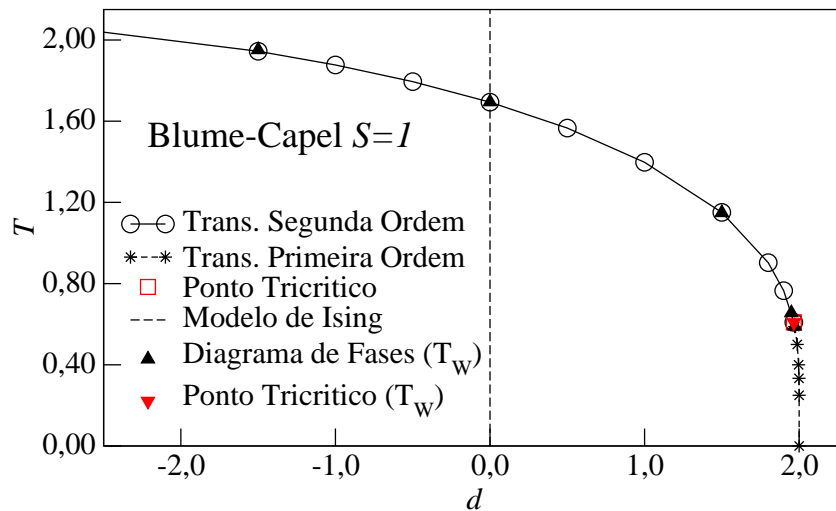


Figura 6.14: Diagrama de fase do modelo de Blume-Capel  $S=1$ . Os círculos vazios, estrelas e o quadrado são dados retirados da ref. [40], a linha tracejada está em  $d = 0$  (modelo de Ising  $S=1$ ) e os triângulos são valores obtidos usando o método proposto neste trabalho. O tempo esperado para o sistema termalizar foi  $t = 20000$  PMC e as médias foram feitas sobre 200 amostras.

### 6.1.4 Flutuações Guassianas e Relação de Escala de Family-Vicsek

O fato da rugosidade  $W$  crescer indefinidamente com o tempo até mesmo para temperaturas críticas nas transições de segunda ordem, como pode ser visto na figura 6.8, deve-se a um ruído intrínseco do algoritmo de Monte Carlo. Depois de um transiente, o sistema segue um caminho aleatório no espaço de fase, adicionando assim um ruído Gaussiano na rugosidade  $W$  com o tempo.

Esse ruído gera um fator difusivo na média térmica, resultando em um comportamento assintótico  $t^{1/2}$ . Isto significa que  $\alpha \rightarrow \infty$  e a relação de escala de Family-Vicsek ( $z_W = \alpha/\beta_W$ ) não é mais válida. Um caminho para eliminar esse ruído intrínseco da rugosidade  $W$ , e estudar a evolução da superfície sem qualquer crescimento trivial, é definir uma nova rugosidade  $W^*$  de forma que

$$W(\epsilon, t) = t^{1/2}W^*(\epsilon, t). \quad (6.1)$$

Assim, a rugosidade sem ruído  $W^*(\epsilon, t)$  deve mostrar um comportamento similar a um crescimento de uma superfície regular num processo de crescimento, escalando com  $W^*(\epsilon, t \gg t_c) \sim \epsilon^{H^*}$ , para tempos pequenos  $W^*(t) \sim t^{\beta_W^*}$  e para tempos grandes com  $W^*(L, \infty) \sim L^{\alpha^*}$ , onde também  $t_c \sim L^{z_W^*}$ . Isto significa que para  $t \gg t_c$  para um dado  $L$ , a rugosidade sem ruído é constante com o tempo e o comportamento de  $W \sim t^{1/2}$  é preservado.

Nós esperamos que  $H^* = H$ ,  $z_W^* = z$ ,  $\beta_W^* = \beta_W - 1/2$  e que  $\alpha^*$  possa ser obtido agora através dos gráficos de  $W^*(L, \infty)$  em função de  $L$ . Na figura 6.15 nós mostramos alguns exemplos típicos do valor de saturação de  $W^*$  em função do tamanho do sistema  $L$  em uma escala logarítmica. Nós observamos que para transições de primeira ordem as curvas de  $W^* \times L$  saturam, o que resulta em  $\alpha^* = 0$  no limite termodinâmico. Isso é consistente com o fato de que nas transições de primeira ordem o comprimento de correlação é finito. No ponto tricrítico e nas transições de fase de segunda ordem, o expoente da lei de potência  $W_{sat}^* \sim L^{\alpha^*}$  é



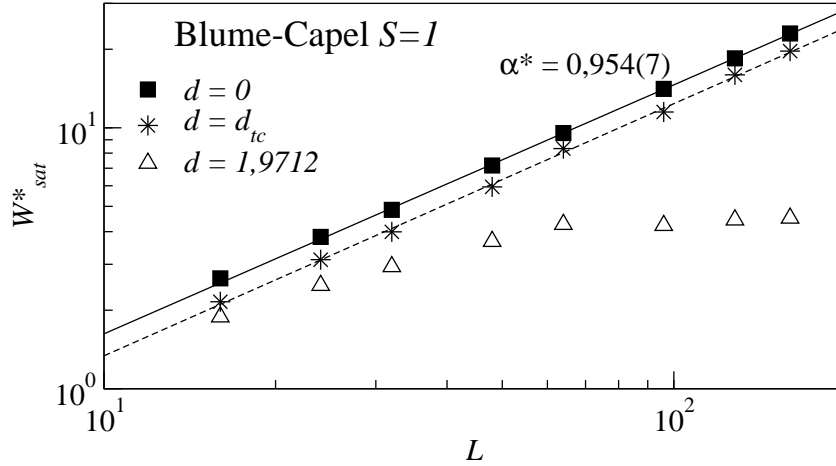


Figura 6.15: Comportamento do valor de saturação da rugosidade sem ruído  $W^*$  em função do tamanho do sistema  $L$ . As curvas mostradas são do modelo de Blume-Capel com  $d = 0$ ,  $d = 1,9172$  e  $d \simeq d_t$ . As barras de erro são menores que o tamanho dos símbolos.

justamente o expoente da rugosidade  $\alpha^*$ . Então, podemos mostrar que a relação de escala de Family-Vicsek se mantém para estes casos, com  $\alpha^*$  no lugar de  $\alpha$  e  $z_W = \alpha^*/\beta_W^*$ .

Por exemplo, para o modelo de Blume-Capel com  $d = 0$  nós obtemos da tabela 4.2  $\beta_W^* = 0,942 - 1/2 = 0,442$ . Portanto, o valor de  $\alpha^* = z\beta_W^* = 0,959$  está de acordo com o valor medido  $\alpha^* = 0,954(7)$  da figura 6.15. Resultados similares são obtidos para outras transições de segunda ordem, inclusive para o modelo de Potts. No ponto tricrítico nós obtemos  $\alpha^* = z\beta_W^* = 1,02$ , o que sugere que esta superfície pode ter uma super-rugosidade (o termo super-rugosidade é usado para  $\alpha^* > 1$ ).

Um gráfico na escala logarítmica da rugosidade  $W^*$  em função do tempo  $t$  para o modelo  $BC_{d=0}$  é mostrado na figura 6.16. O gráfico menor inserido nessa figura mostra o colapso destas curvas para  $\alpha^* = 0,954(7)$  e  $z = 2,17$ . Para tempos pequenos, o colapso falha porque o sistema ainda está descorrelacionado. Nós observamos que para transições de segunda ordem o expoente da rugosidade local  $H$  é diferente (menor) que o valor do expoente da rugosidade global  $\alpha^*$  indicando assim que essas superfícies não são auto-afins. Desde que as flutuações locais ou

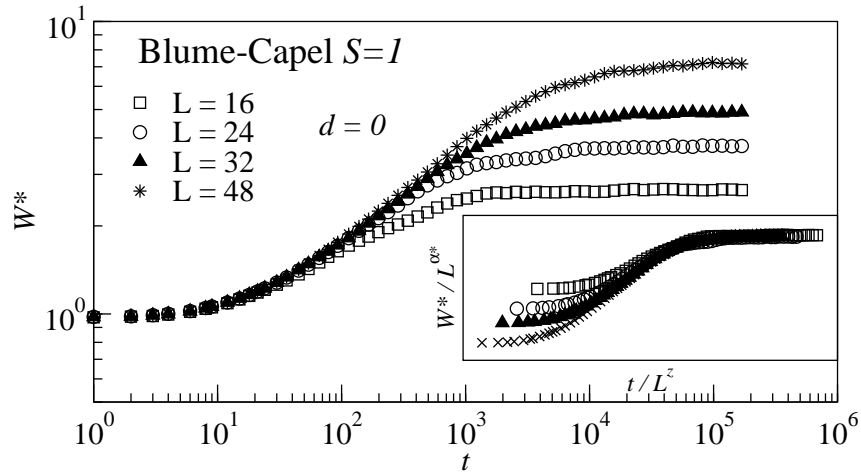


Figura 6.16: Comportamento do valor de saturação da rugosidade sem ruído  $W^*$  em função do tempo  $t$  para o modelo de Blume-Capel com  $d = 0$  para diferentes tamanhos de sistemas  $L$ . O detalhe mostra o colapso destas curvas para  $\alpha^* = 0,954(7)$  and  $z = 2,17$ .

globais das superfícies escalam com expoentes diferentes, a rugosidade sem ruído  $W^*$  apresenta o que se chama na literatura de escala anômala [52, 53, 54]. Por exemplo, para a classe de universalidade do modelo de Ising nós obtemos  $\alpha^* = 0,954(7)$ , enquanto que  $H \simeq 0,72$ , para o modelo de Blume-Capel com  $d \simeq d_t$  nós obtemos  $\alpha^* = 0,98(2)$  enquanto que  $H = 0,709(5)$ . Este fato é consistente com a idéia de que, em transições contínuas, as correlações nos modelos de spins são distintas para grandes e pequenas escalas. Como era esperado, para transições de primeira ordem a escala anômala é mais forte. Note que nesse caso  $\alpha^* = 0$  e  $H \simeq 1/2$ .

# Capítulo 7

## Modelos Rotor Planar e Relógio

Até agora utilizamos apenas modelos com spins discretos mapeados em modelos de crescimento de superfície e obtivemos resultados termodinâmicos interessantes, sem precisar utilizar nenhuma função termodinâmica. Neste capítulo, vamos aplicar a mesma metodologia num modelo de spin contínuo em duas dimensões (o modelo do Rotor Planar) e outro discreto (Relógio com  $p$  estados), sendo que esse último, no limite em que  $p \rightarrow \infty$ , reduz-se justamente ao Rotor Planar.

### 7.1 Resultados para o Modelo Rotor Planar

O modelo do Rotor Planar (spins com duas componentes), bem como o mais geral XY (spins com três componentes) não possuem ordem de longo alcance e o comprimento de correlação e a susceptibilidade divergem exponencialmente para temperaturas abaixo de  $T_{BKT}$ , sendo que o sistema é crítico para  $T < T_{BKT}$ . Em geral, o cálculo da temperatura de transição  $T_{BKT}$  não é trivial, pelo menos não tão simples quanto a temperatura crítica de modelos com transições contínuas. Vamos aqui obtê-la usando o expoente de crescimento  $\beta_W$  bem como a rugosidade da superfície gerada.

### 7.1.1 Temperatura de Transição $T_{BKT}$

Sabemos da definição do expoente de crescimento, equação (4.4), que não é necessário esperar que o sistema termalize para que possamos realizar o seu cálculo, resultando em pouco tempo computacional. A ideia inicial é verificar se esse expoente é hábil para detectar as transições de fases do modelo estudado.

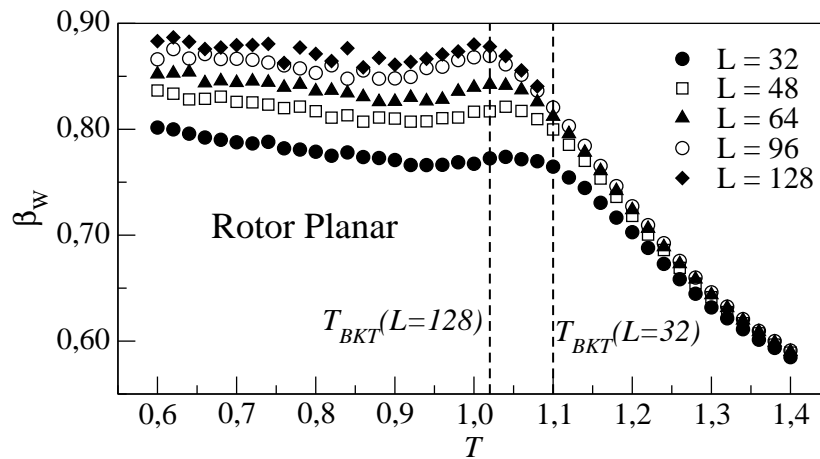


Figura 7.1: Expoente de crescimento  $\beta_W$  em função da temperatura  $T$  para o modelo Rotor Planar para diferentes tamanhos de redes  $L$ . As médias foram feitas com  $M = 10^4$  amostras com um tempo de  $t = 200$  PMC. As linhas verticais mostram as temperaturas de transição para duas redes extremas. As barras de erros são menores que os símbolos.

A figura 7.1 mostra o comportamento do expoente de crescimento  $\beta_W$  em função da temperatura  $T$  do modelo Rotor Planar para diferentes tamanhos de rede  $L$ . Notamos, primeiro, que para baixas temperaturas o valor de  $\beta_W$  tende a oscilar em torno de uma média, enquanto que o mesmo tende a saturar com o aumento do tamanho do sistema  $L$ . Notamos, também, que para temperaturas altas o expoente tende para  $1/2$ , independente do tamanho da rede. Como não temos a presença de um pico bem definido nesse expoente fica então difícil determinar, de uma maneira mais precisa, a temperatura na qual ocorre a transição para um tamanho típico de rede (o que não ocorre com a rugosidade, como veremos mais adiante). Podemos, entretanto, estimar a temperatura de transição como sendo aquela na qual o valor do expoente de crescimento começa a diminuir, a partir de um valor constante

para baixas temperaturas. Para as redes  $L = 32$  e  $L = 128$  as correspondentes temperaturas estão indicadas pelas linhas tracejadas verticais na figura 7.1. Pode-se ver claramente que existe uma dependência com o tamanho da rede. Uma análise de tamanho finito nesse caso deve levar em conta o caráter dessa transição, que não possui um comportamento tipo lei de potência.

Como sabemos que nesse modelo o comprimento de correlação  $\xi$  tem uma dependência exponencial dada por [45]

$$\xi = \exp\left(\frac{B}{\sqrt{T_{BKT}^L - T_{BKT}}}\right), \quad (7.1)$$

e que, com  $\xi \sim L$ , teremos

$$T_{BKT}^L = T_{BKT} + \frac{C}{(\ln L)^2}, \quad (7.2)$$

onde  $T_{BKT}^L$  é a estimativa da temperatura de transição para a rede  $L$ ,  $T_{BKT}$  é a temperatura de transição no limite termodinâmico,  $B$  e  $C$  são constantes. Uma análise de tamanho finito com a equação (7.2) está mostrada na figura

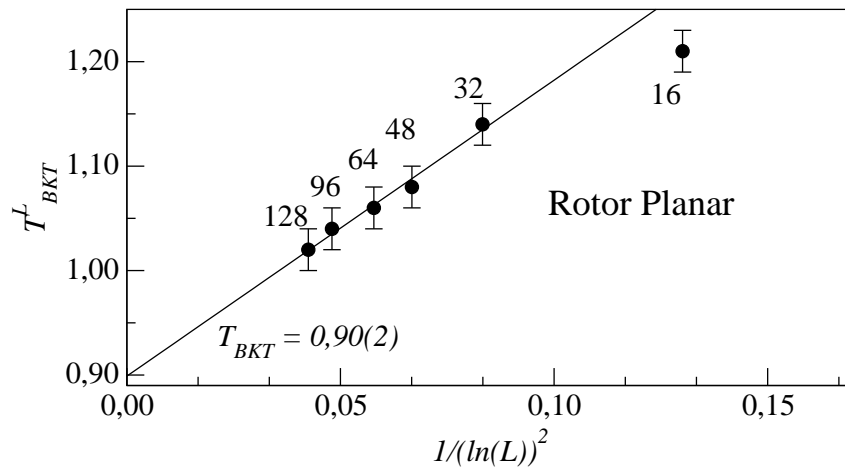


Figura 7.2: Temperatura de transição  $T_{BKT}^L$  em função de  $1/(\ln(L))^2$  para o modelo Rotor Planar. As médias foram feitas com  $M = 10^4$  amostras com um tempo de  $t = 200$  PMC.

7.2. Utilizando os maiores valores de redes (note o comportamento logarítmico) obtivemos um valor da temperatura de transição no limite termodinâmico  $T_{BKT} =$

$0,90(2)$ , concordando com os valores existentes na literatura [44]. Enfatizamos aqui que a grande vantagem de se usar o expoente de crescimento para determinar essa temperatura é que não precisamos esperar o sistema termalizar, diminuindo radicalmente o tempo de simulação de  $2 \times 10^4$  *PMC* para 200 *PMC*, o que implica em um ganho significativo no tempo real de processamento. Porém, parece que a precisão não é muito boa na determinação das temperaturas para cada rede.

A figura 7.3 mostra, por outro lado, o comportamento da rugosidade  $W$  em função da temperatura  $T$  para o modelo Rotor Planar para vários tamanhos de redes  $L$ . Note que nesse caso a rugosidade tem um pico bem definido, em uma temperatura que será considerada a correspondente temperatura de transição, a qual continua a depender do tamanho da rede, permitindo também uma análise de tamanho finito. Entretanto para essa grandeza foram necessários da ordem de  $2 \times 10^4$  *PMC*.

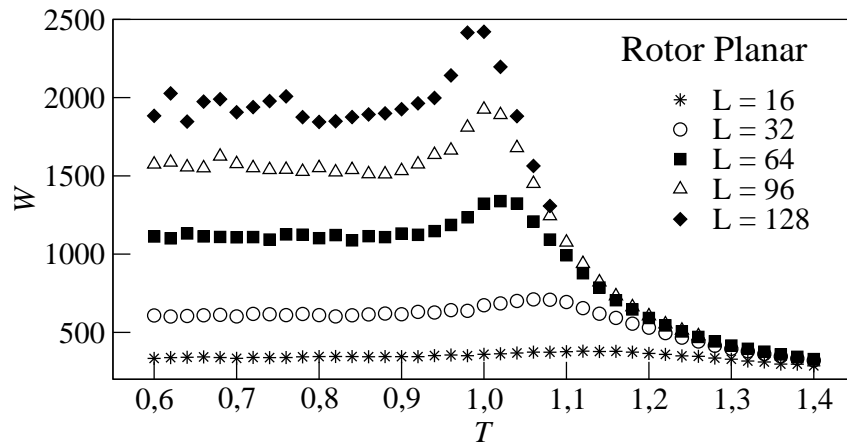


Figura 7.3: Rugosidade  $W$  em função da temperatura  $T$  para o modelo Rotor Planar com vários tamanhos de redes  $L$ . As médias foram feitas com  $M = 1000$  amostras com um tempo de  $t = 2 \times 10^4$  *PMC*.

A título de exemplo, a figura (7.4) mostra o comportamento de  $T_{BKT}^L$ , obtido através da rugosidade, em função de  $1/L^\phi$ , em que  $\phi$  é apenas um parâmetro de ajuste para a melhor reta. Pode-se notar que o ajuste é excelente e obtemos  $T_{BKT} = 0,975(2)$  para  $\phi = 0,96$ . Claro que nesse caso a temperatura não está em

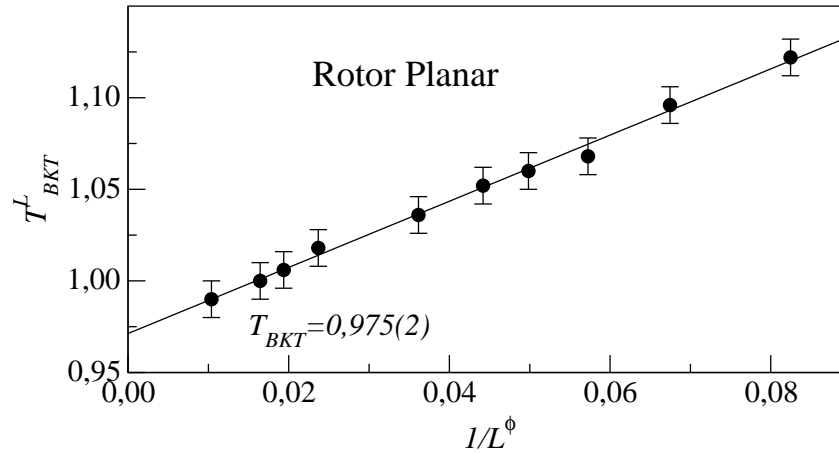


Figura 7.4: Temperatura de transição  $T_{BKT}^L$  em função de  $1/L^\phi$  para o modelo Rotor Planar, ajustando a melhor reta com  $\phi = 0,96$  para vários tamanhos de rede ( $L = 16, 20, 24, 28, 32, 40, 64, 80, 96$  e  $160$ ). As médias foram feitas com  $M = 1000$  amostras com um tempo de  $t = 2 \times 10^4$  *PMC*.

acordo com o que se espera  $T_{BKT} \approx 0,89$ .

Como para o modelo do Rotor Planar o comprimento de correlação  $\xi$  é uma função exponencial da temperatura, o comportamento de tamanho finito deve ser logarítmico, de acordo com a equação (7.2), ou seja, um grande aumento de rede  $L$  resulta em uma pequena variação na correspondente temperatura de transição  $T_{BKT}^L$ . Isso significa que seria necessário tamanhos de redes cada vez maiores para se atingir o comportamento assintótico. Na figura 7.5 foram portanto desprezados tamanhos de redes pequenos ( $L = 16 - 32$ ) para fazermos o ajuste. Encontramos, nesse caso, uma temperatura de transição  $T_{BKT} = 0,89(1)$ , que agora está de acordo com o valor encontrado na literatura [44, 55] e com o obtido pelo expoente da rugosidade para tempos pequenos. Uma inspeção na figura 7.5 mostra ainda que para a rugosidade o comportamento assintótico só é obtido para redes um pouco maiores do que no caso do expoente  $\beta_W$ .

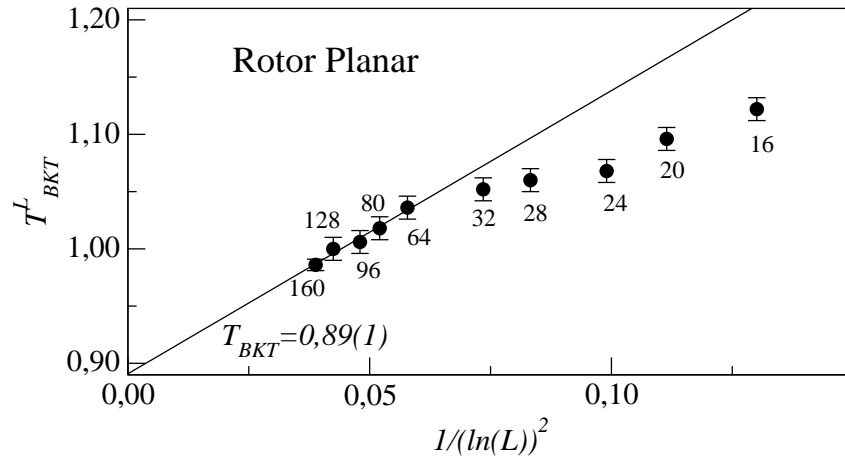


Figura 7.5: Temperatura de transição  $T_{BKT}^L$  em função de  $1/(\ln(L))^2$  para o modelo do Rotor Planar com vários tamanhos de rede. A linha sólida é o ajuste para os tamanhos  $L = 64, 80, 96, 128$  e  $160$ . As médias foram feitas com  $M = 1000$  amostras com um tempo de  $t = 2 \times 10^4$  PMC.

## 7.2 Resultados para o Modelo de Relógio com $p$ estados

Nesse caso trataremos o modelo nos casos  $p \geq 4$ , uma vez que para  $p = 2$  e  $p = 3$  que correspondem, respectivamente, aos modelos de Ising e de Potts de três estados, os mesmos já foram estudados em capítulos anteriores. Além do mais, a região  $p \geq 5$  é a mais interessante para esse modelo, devido a universalidade na temperatura de transição da fase onda de spin para a fase desordenada.

### 7.2.1 Expoente de Crescimento $\beta_W$

A figura 7.6 mostra o comportamento do expoente de crescimento  $\beta_W$  em função da temperatura  $T$  do modelo com  $p = 16$  para diferentes tamanhos de rede  $L$ . Podemos ver claramente uma transição a baixas temperaturas que corresponde a mudança da fase ferromagnética para a fase de onda de spin. Pode-se ainda ver que existe uma transição a temperaturas mais altas entre a fase onda de spin e a fase desordenada. Porém, aqui, devido a pequena dependência com o tamanho da rede



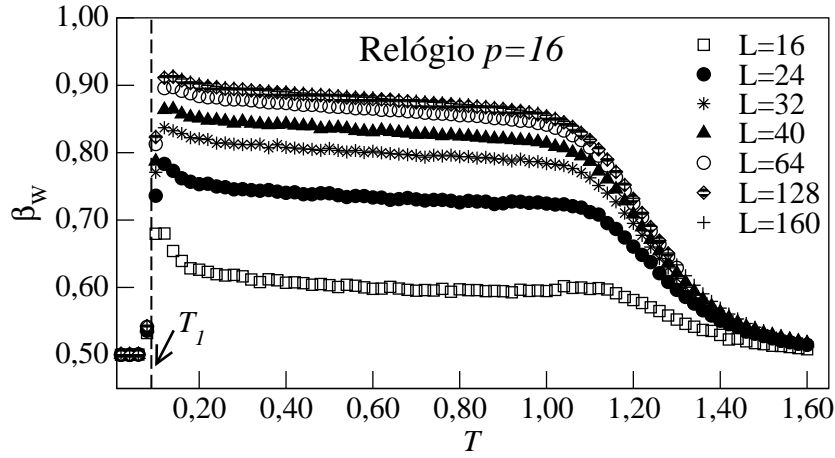


Figura 7.6: Expoente de crescimento  $\beta_W$  em função da temperatura  $T$  para o modelo de Relógio  $p = 16$  para diferentes tamanhos de redes  $L$ . As médias foram feitas com  $M = 10^4$  amostras com um tempo de  $t = 200$  PMC. A temperatura  $T_1$  indica a transição da fase ordenada ferromagnética para a fase ordenada de onda de spin (spin-wave). As barras de erros são menores que os símbolos.

essa temperatura de transição, diferentemente do que ocorreu no modelo do Rotor Planar da seção anterior, fica muito difícil estimar essa temperatura utilizando esse expoente. Notamos ainda que o valor de  $\beta_W$  satura com o aumento do tamanho da rede  $L$ , embora exista uma dependência clara para pequenos valores de  $L$ . Na

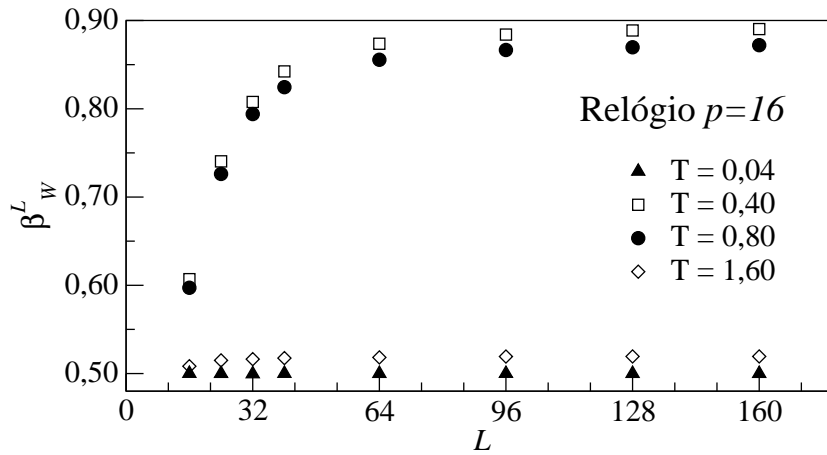


Figura 7.7: Expoente de crescimento  $\beta_W^L$  em função do tamanho da rede  $L$  para o modelo de Relógio  $p = 16$  para quatro temperaturas,  $T = 0,40$  e  $T = 0,80$  na fase onda de spin;  $T = 1,60$  na fase paramagnética e  $T = 0,04$  na fase ferromagnética. As médias foram feitas com  $M = 10^4$  amostras com um tempo de  $t = 200$  PMC. As barras de erros são menores que os símbolos.

figura 7.7 mostramos o comportamento do expoente de crescimento  $\beta_W$  em função do tamanho do sistema  $L$  para quatro valores de temperatura, a saber,  $T = 0,04$  na fase ferromagnética;  $T = 0,40$  e  $T = 0,80$  na fase onda de spin; e  $T = 1,60$  na fase paramagnética. Como esperado, tanto na fase ferromagnética quanto na fase paramagnética  $\beta_W \approx 1/2$ , já na fase onda de spin ( $T = 0,40$  e  $T = 0,80$ ) o valor de  $\beta$  cresce com o tamanho do sistema e satura para grandes valores de  $L$ .

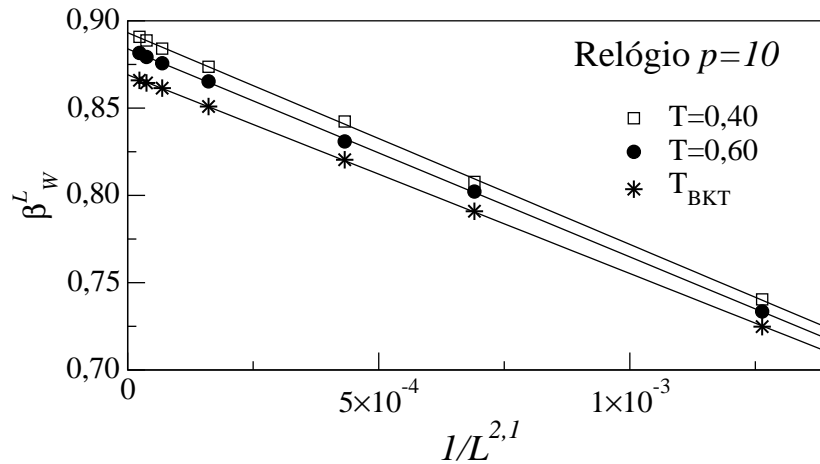


Figura 7.8: Análise de tamanho finito para o expoente de crescimento  $\beta_W^L$  para o modelo do Relógio com  $p = 10$ . A linha sólida é o ajuste para os tamanhos  $L = 24, 28, 32, 64, 80, 96$  e  $160$ . As médias foram feitas com  $M = 10^4$  amostras com um tempo de  $t = 200$  PMC. As barras de erros são menores que os símbolos.

Na figura 7.8 mostramos uma análise de tamanho finito para  $\beta_W^L$ , onde os ajustes são do tipo lei de potência  $1/L^\phi$ , com  $\phi = 2,1(1)$  sendo o melhor ajuste para as três temperaturas mostradas. Obtemos então os seguintes resultados  $\beta_W^{L=\infty}(T = 0,40) = 0,8932(6)$ ,  $\beta_W^{L=\infty}(T = 0,60) = 0,8839(4)$  e  $\beta_W^{L=\infty}(T_{BKT}) = 0,8691(2)$ . Note que esses valores estão próximos dos obtidos para a maior rede  $\beta_W^{L=160}(T = 0,40) = 0,890(5)$ ,  $\beta_W^{L=160}(T = 0,60) = 0,882(4)$  e  $\beta_W^{L=160}(T_{BKT}) = 0,866(4)$ . Portanto, o valor estimado do expoente de crescimento no limite termodinâmico é muito próximo daquele da maior rede.

Uma inspeção na figura 7.6 sugere que o valor da temperatura de transição  $T_1$  não depende do tamanho da rede  $L$ . De fato, na figura 7.9 mostramos o

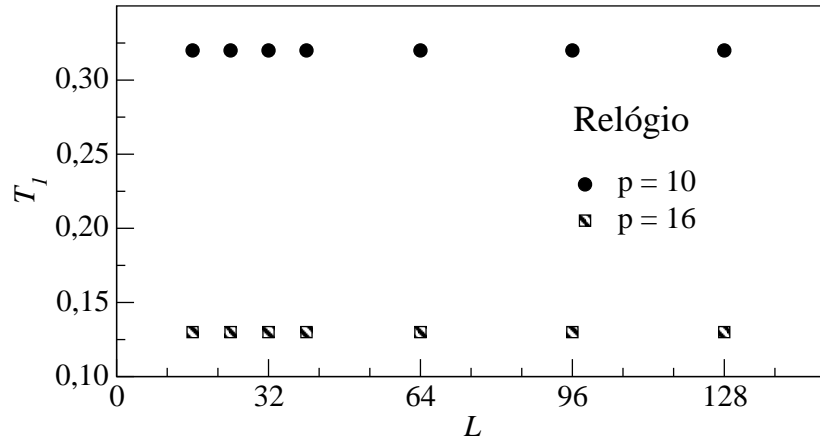


Figura 7.9: Temperatura de transição entre as fases ordenadas  $T_1$  em função do tamanho da rede  $L$  para o modelo de Relógio  $p = 16$  e  $p = 10$ . As médias foram feitas com  $M = 10^4$  amostras com um tempo de  $t = 200$  PMC. As barras de erros são menores que os símbolos.

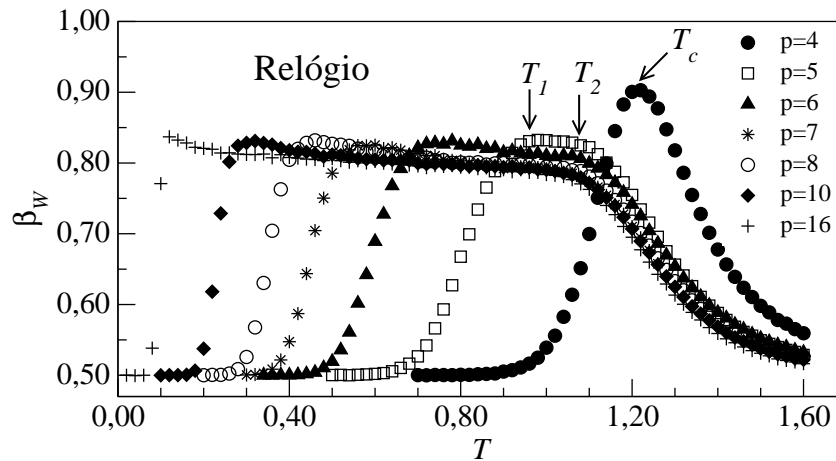


Figura 7.10: Comportamento do expoente de crescimento  $\beta_W$  em função da temperatura  $T$  para o modelo de Relógio com  $p$  estados em uma rede de tamanho  $L = 32$ . As médias foram feitas com  $M = 10^4$  amostras com um tempo de  $t = 200$  PMC. As barras de erros são menores que os símbolos.

comportamento da temperatura  $T_1$  em função do tamanho da rede  $L$  para o modelo de Relógio  $p = 16$  e  $p = 10$ . Embora as temperaturas sejam diferentes para diferentes valores de  $p$ , as mesmas são quase constantes para vários valores do tamanho de rede. Na figura 7.10 mostramos o comportamento do expoente de crescimento  $\beta_W$  em função da temperatura  $T$  para o modelo de Relógio com  $p$  estados em uma rede de tamanho  $L = 32$  e vários valores de  $p$ . Agora a

temperatura de transição  $T_1(p)$  depende do número de estados  $p$ , dependência essa já estudada por outros métodos [44]. Qualitativamente, percebemos algumas diferenças e semelhanças no comportamento dessas curvas variando apenas o valor de  $p$ . Com base na figura 7.10 vamos enumerar algumas dessas semelhanças e diferenças:

- $p = 4$   $\longrightarrow$  temos um único pico da rugosidade  $W$  na temperatura de transição  $T_c$ . Como esperado, esse valor é bem próximo do valor da metade da temperatura crítica do modelo de Ising ( $p = 2$ ), além de indicar somente uma transição contínua;
- $p = 5$   $\longrightarrow$  aparece um pequeno patamar, permitindo assim definir duas temperaturas de transição  $T_1$  e  $T_2$ , o que não foi possível determinar em trabalhos anteriores [44], porém, como vamos ver na seção 7.5, no limite termodinâmico essas temperaturas são iguais  $T_1 = T_2 = T_{BKT}$ ;
- $p = 6$   $\longrightarrow$  as temperaturas de transição são mais bem definidas e o comportamento da curva é semelhante aos comportamentos com valores de  $p$  maiores, mas o valor médio do expoente de crescimento na fase onda de spin  $\beta_W = 0,825$ , é um pouco maior que para os casos em que  $p > 6$ ;
- $p > 6$   $\longrightarrow$  temos uma região (aproximadamente  $T = 0,70 - 0,90$ ) em que o valor do expoente de crescimento é o mesmo para qualquer  $p > 6$ , por exemplo para  $T = 0,80$  temos  $\beta_W = 0,797$ . Todas as curvas tem o mesmo comportamento e o valor das temperaturas de transição  $T_1$  dependem do valor de  $p$ , mas a temperatura  $T_2$  parece ser a mesma para  $p > 6$ ;

### 7.2.2 Temperaturas de Transição $T_1$ , $T_2$ e $T_{BKT}$

Como mostrado na figura 7.9, o valor da temperatura de transição entre as fases “ordenadas” quase não depende de  $L$ . Assim, determinamos  $T_1$  para  $L = 32$ , o que

não é um valor muito pequeno e o tempo de computação é razoavelmente curto.

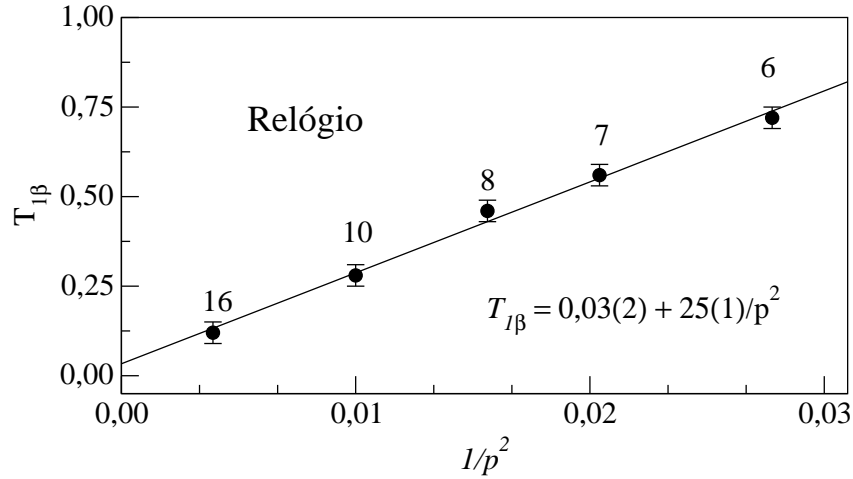


Figura 7.11: Temperatura de transição  $T_1$  em função de  $1/p^2$  para o modelo de Relógio com  $p$  estados em uma rede de tamanho  $L = 32$ . A linha contínua é o ajuste linear dos pontos e as médias foram feitas com  $M = 10^4$  amostras com um tempo de  $t = 200$  PMC.

Na figura 7.11 mostramos o comportamento dessa temperatura de transição  $T_1$  em função de  $1/p^2$  para o modelo de Relógio com  $p$  estados para uma rede de tamanho  $L = 32$ . A escolha de uma dependência com o inverso do quadrado no número de estados foi proposta anteriormente [44]. A linha sólida é o ajuste linear dos pontos para valores de  $p > 5$  onde encontramos  $T_{1\beta} = 0,04(2) + 25(1)/p^2$ , valores bem aproximados do valor esperado de acordo com a ref. [44] ( $T_{1\beta} = 23,4/p^2$ ).

Observando a figura 7.6 pode-se ver que o expoente de crescimento  $\beta_W$  é capaz de detectar, clara e quantitativamente, a temperatura de transição  $T_1$ . Por outro lado, dessa mesma figura notamos uma dificuldade em se determinar a temperatura  $T_2$ , pois além de não apresentar uma dependência muito nítida com o tamanho do sistema  $L$  (diferente do que ocorreu no caso contínuo da última seção), não temos um critério para se definir essa transição em uma rede finita. Sendo assim, devemos olhar agora para o comportamento da rugosidade  $W$  em função da temperatura  $T$  para tempos grandes ( $t \gg t_c$ ), o que está mostrado na figura 7.12. Notamos que o valor da temperatura de transição  $T_2(L)$  (bem como a própria temperatura  $T_1$ )

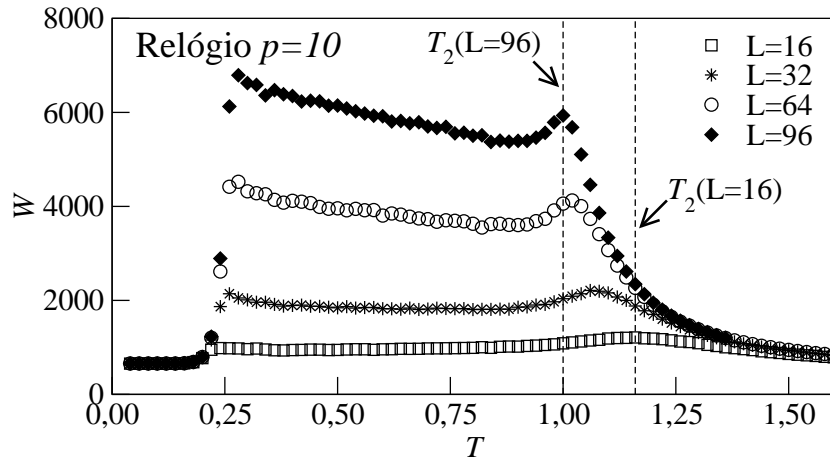


Figura 7.12: Rugosidade  $W$  em função da temperatura  $T$  para o modelo de Relógio com  $p = 10$  para vários tamanhos de rede. As médias foram feitas com  $M = 2000$  amostras com um tempo de simulação  $t = 2 \times 10^4$  *PMC*. As linhas pontilhadas mostram as temperaturas de transição  $T_2$  para duas redes extremas. As barras de erros são menores que os símbolos.

pode ser mais facilmente obtida e é também uma função do tamanho da rede.

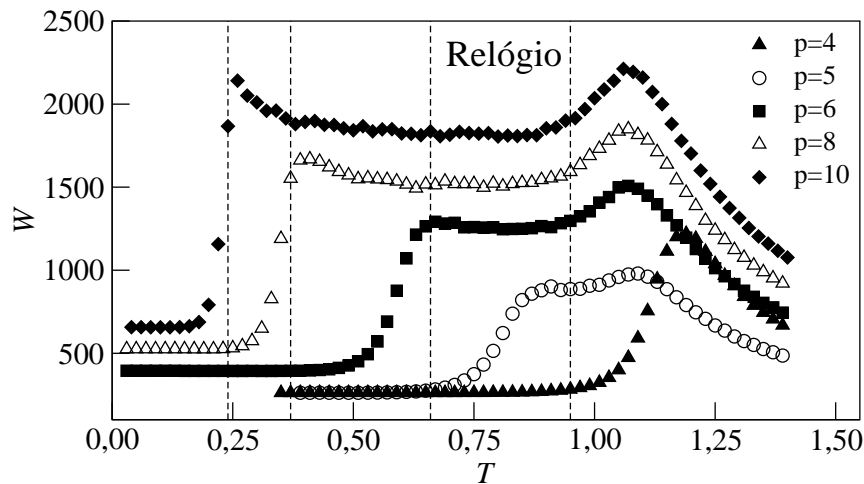


Figura 7.13: Rugosidade  $W$  em função da temperatura  $T$  para o modelo de Relógio com  $p$  estados para uma rede  $L = 32$ . As linhas tracejadas verticais indicam as temperaturas  $T_1$  de acordo com a referência [44]. As médias foram feitas com  $M = 2000$  amostras com um tempo de simulação  $t = 2 \times 10^4$  *PMC*. As barras de erros são menores que os símbolos.

Na figura 7.13 mostramos o comportamento da rugosidade  $W$  em função da temperatura  $T$  para o modelo de Relógio com  $p$  estados para uma rede  $L = 32$ , onde as linhas tracejadas indicam as temperaturas  $T_1$  dada pela ref. [44]. Vimos que

a temperatura de transição  $T_1$  é função de  $p$ , como já foi observado com o expoente de crescimento  $\beta_W$ . Dentro das barras de erros encontramos o mesmo resultado quando utilizamos o expoente de crescimento  $\beta_W$  ( $T_{1\beta} = 0,03(2) + 25(1)/p^2$ ) e quando utilizamos a rugosidade  $W$  ( $T_{1W} = 0,03(1) + 23,5(6)/p^2$ ), calculando então um valor médio temos  $T_1 = 0,03(2) + 24(1)/p^2$ . Na figura 7.14 mostramos os ajustes para os dois casos no modelo de Relógio com  $p$  estados.

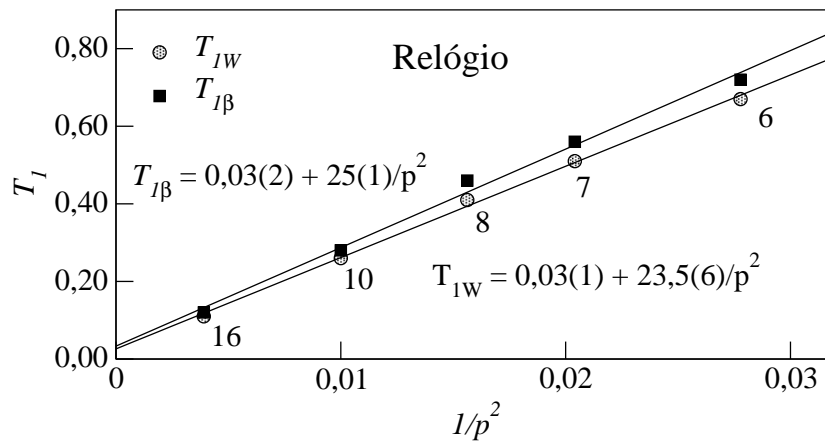


Figura 7.14: Temperatura de transição  $T_1$  em função de  $1/p^2$  para o modelo de Relógio com  $p$  estados. As linhas contínuas são os ajustes dos pontos, as médias foram feitas com  $M = 2000$  amostras com um tempo de  $t = 2 \times 10^4$  PMC.

Podemos observar também da figura 7.13 que as temperaturas de transição  $T_2$  para  $p > 5$  tem aproximadamente o mesmo valor ( $T_2 \approx 1,06$ ) para um dado tamanho de rede. Na verdade, já foi observado que para  $p > 7$  a temperatura de transição é a mesma do modelo Rotor Planar [44]. No presente caso, em que o tamanho da rede é finito ( $L = 32$ ), o sistema ainda não apresenta a mesma temperatura de transição do Rotor Planar no limite termodinâmico ( $T_2 = 0,89$ ). Esperamos que para tamanhos de redes maiores o modelo de Relógio com  $p = 10$  estados tenha a mesma temperatura  $T_2$  do Rotor Planar.

Como no caso do Rotor Planar, obtemos também um bom ajuste utilizando lei de potência ( $T_2^L = T_2^\infty + bL^\phi$ ), que sabemos não ser o ajuste correto. A título de exemplo, na figura 7.15 mostramos os dois ajustes do tipo lei de potência para

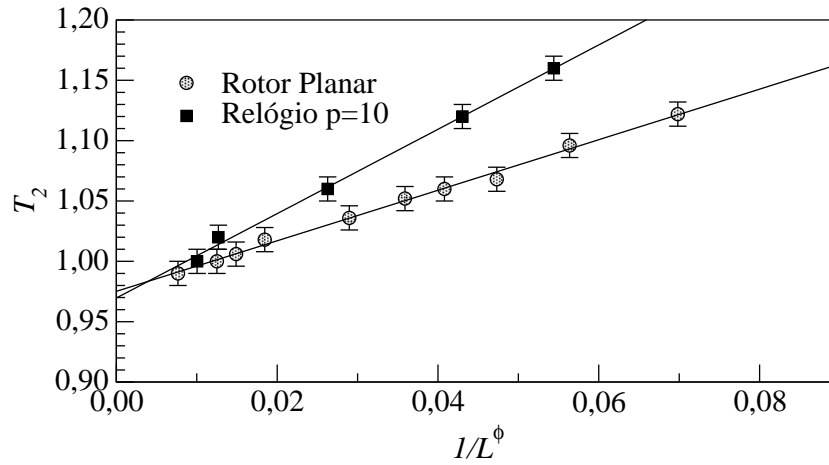


Figura 7.15: Temperatura de transição  $T_2$  em função de  $1/L^\phi$  para o modelo de Relógio com  $p = 10$  estados ( $\phi = 1,05$ ) para vários tamanhos de rede ( $L = 16, 20, 32, 64$  e  $80$ ) e Rotor Planar ( $\phi = 0,96$  e  $L = 16, 20, 24, 28, 32, 64, 80, 96, 128$  e  $160$ ), as linhas sólidas são os melhores ajustes para os pontos. As médias foram feitas com  $M = 1000 - 2000$  amostras com um tempo de  $t = 2 \times 10^4$  *PMC*.

a temperatura de transição  $T_2$  nos modelos de Relógio com  $p = 10$  estados e Rotor Planar, no limite termodinâmico encontramos as mesmas temperaturas  $T_2 = 0,975(2)$  com  $\phi = 0,96$  (Rotor Planar) e  $T_2 = 0,970(4)$  com  $\phi = 1,05$  (Relógio  $p = 10$ ), onde  $\phi$  é apenas um ajuste para a melhor reta. É interessante ressaltar que esse valor está 8% acima do valor encontrado na literatura para o modelo Rotor Planar  $T_{BKT} = 0,89$ . Entretanto, esse resultado indica um caráter universal para esses modelos, que será confirmado quando usarmos um ajuste logarítmico do tipo  $1/(\ln(L))^2$ .

Portanto, na figura 7.16 usamos este ajuste e dentro das barras de erros obtivemos o resultado esperado na literatura  $T_{BKT} = 0,89$  [44], sendo eles, Rotor Planar  $T_{BKT} = 0,89(1)$  e Relógio com  $p = 8$  estados  $T_{BKT} = 0,898(7)$ . Note que apesar de usarmos um ajuste linear na figura 7.15 e obter um valor diferente do esperado para a temperatura de transição  $T_2 = 0,97(2) \neq T_{BKT}$ , os valores dessas são os mesmos para os dois modelos. A diferença é que quando utilizamos um ajuste logarítmico essas temperaturas são iguais (dentro do erro) ao valor esperado, isso significa que independente do ajuste (linear ou logarítmico) a temperatura de



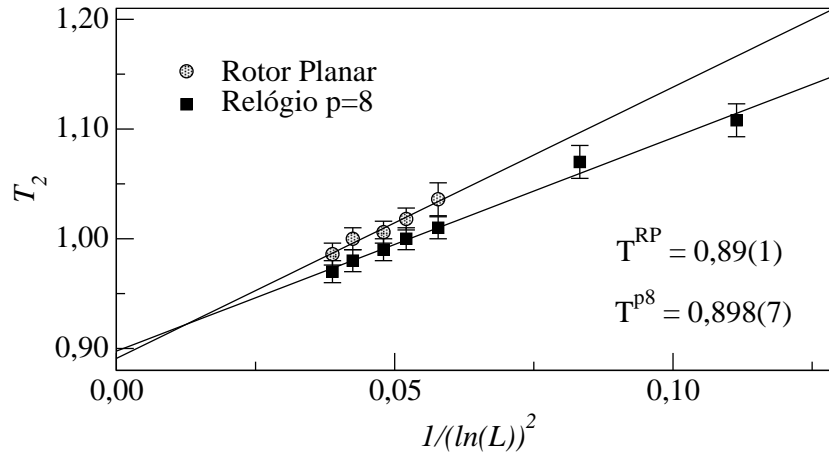


Figura 7.16: Temperatura de transição  $T_2$  em função de  $1/(\ln(L))^2$  para o modelo de Relógio com  $p = 8$  estados ( $L = 20, 32, 64, 80, 96, 128$  e  $160$ ) e Rotor Planar com ( $L = 64, 80, 96, 128$  e  $160$ ). As linhas sólidas são os ajustes dos pontos. As médias foram feitas com  $M = 1000 - 2000$  amostras com um tempo de  $t = 2 \times 10^4$  PMC.

transição do modelo de Relógio ( $p > 7$ ) é sempre igual a do modelo do Rotor Planar ( $T_2 = T_{BKT}$ ). Esses fatos confirmam que o modelo de Relógio ( $p > 7$ ) tem a mesma temperatura de transição  $T_2$  do Rotor Planar (caso limite em que  $p \rightarrow \infty$  no modelo do Relógio com  $p$  estados).

### 7.3 Rugosidade sem Ruído $W^*$ e Lei de Escala

Como discutido no capítulo 6, o valor do expoente da rugosidade sem ruído  $\alpha^*$  pode definir uma classe de universalidade, ou seja, modelos com mesmo valor de  $\alpha^*$  pertencem a mesma classe de universalidade. Além disso, foi mostrado também que  $\alpha^* = 0$  em transições de fase de primeira ordem, e  $\alpha^* > 0$  para transição de segunda ordem. Nesta seção vamos calcular o expoente da rugosidade  $\alpha^*$  (definido pela equação (4.5)) para verificar o seu valor nas transições  $T_1$  e  $T_2$ , isto é, quando o sistema muda da fase ferromagnética para a fase onda de spin e da fase onda de spin para a fase paramagnética, bem como para alguns valores de temperatura na fase onda de spin. Isso porque o expoente da rugosidade sem ruído na fase ferromagnética e na fase paramagnética é nulo.

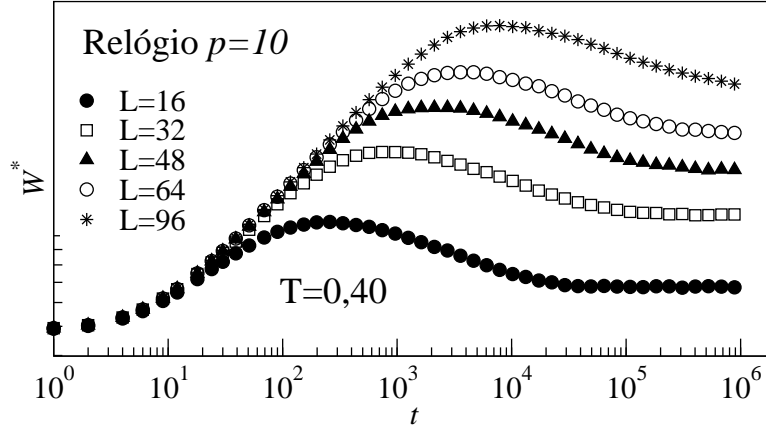


Figura 7.17: Rugosidade sem ruído  $W^*$  em função do tempo  $t$  para o modelo Relógio com  $p = 10$  estados para uma temperatura  $T = 0,40$  e vários tamanhos de  $L$ . As médias foram feitas com  $M = 1000$  amostras e um tempo máximo de  $t = 10^6$  PMC.

Na figura 7.17 mostramos o comportamento da rugosidade sem ruído (definida pela equação 6.1) em função do tempo  $t$  para uma dada temperatura típica  $T = 0,40$ , na fase onda de spin para o modelo de Relógio com  $p = 10$  estados. Observamos que após a ocorrência de um máximo, para tempos grandes  $t \gg t_c$  a rugosidade sem ruído  $W^*$  satura, apresentando além disso uma dependência com o tamanho da rede  $L$  com a esperada lei de escala dada por  $W^*(L, t \gg t_c) = W_{sat}^*(L) \sim L^{\alpha^*}$ . Antes de calcular esse expoente, vejamos o que acontece com o Rotor Planar (já estudado na seção anterior). Nesse caso a rugosidade sem ruído  $W^*$  também satura para tempos grandes, como é mostrado na figura 7.18. Note que existe uma diferença de como rugosidade satura nesses dois modelos. No modelo do Relógio com  $p = 10$  estados a rugosidade aumenta partindo de um mesmo valor, independente do tamanho da rede, para tempos muito pequenos  $t \ll t_c$ , cresce até um certo tempo, diminui de valor e para tempos grandes  $t \gg t_c$  satura. No caso do Rotor Planar o comportamento é mais suave. Entretanto, esse comportamento diferente nos dois casos não influencia o cálculo do expoente da rugosidade sem ruído, pois o mesmo só depende do seu valor saturado. Na figura 7.19 mostramos esse valor de saturação  $W_{sat}^*(L)$  em função do tamanho da rede  $L$  para os modelos

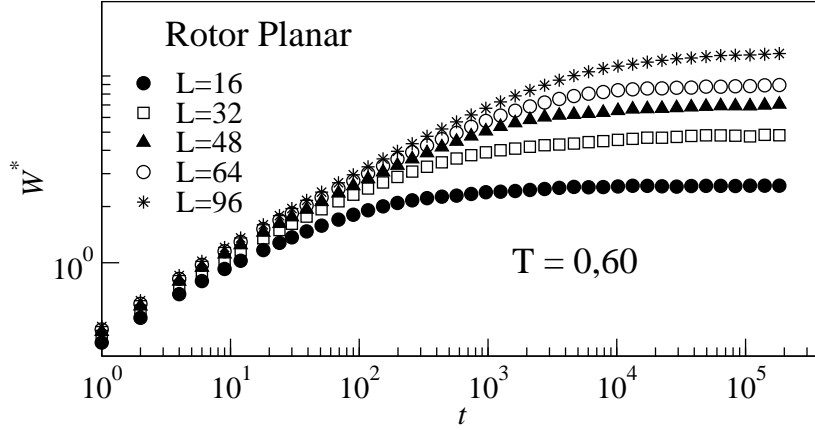


Figura 7.18: Rugosidade sem ruído  $W^*$  em função do tempo  $t$  para o modelo Rotor Planar para uma temperatura típica  $T = 0,60$  na região de onda de spin. As médias foram feitas com  $M = 1000$  amostras e um tempo máximo de  $t = 2 \times 10^5$  *PMC*.

do Relógio com  $p = 10$  e Rotor Planar, obtidos das figuras 7.17 e 7.18. Como exemplo, são mostrados também na mesma figura o comportamento da rugosidade sem ruído para algumas temperaturas típicas a saber,  $T = 0,40$  (fase onda de spin) e  $T_1 = 0,24$  (transição da fase ordenada para fase onda de spin) para o modelo do Relógio com  $p = 10$ ,  $T = 0,60$  (fase onda de spin) e  $T_{BKT}$  (transição da fase

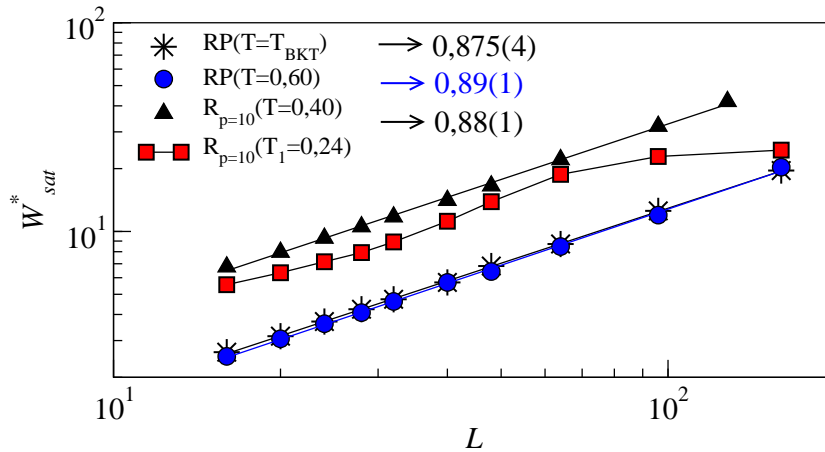


Figura 7.19: Comportamento do valor de saturação da rugosidade sem ruído  $W^*$  em função de vários tamanhos da rede  $L$ . As curvas mostradas são dos modelos de Relógio com  $p = 10$  ( $T = 0,24$  e  $T = 0,40$ ) e Rotor Planar ( $T = 0,60$  e  $T = T_{BKT}$ ). Os valores mostrados são dos expoentes da rugosidade sem ruído. As barras de erro são menores que o tamanho dos símbolos. As médias foram feitas com  $M = 100 - 2000$  amostras com um tempo de  $t = 10^5 - 10^7$  *PMC*.

onda de spin para a fase desordenada) para o Rotor Planar. Note que apenas no caso de  $T_1 = 0,24$  o valor de saturação da rugosidade sem ruído não segue uma lei de potência e satura com o aumento da rede  $L$ , ou seja,  $\alpha^* = 0$ . Na ref. [44] foi conjecturado que a transição da fase ordenada para a fase onda de spin é de segunda ordem, porém nossos resultados ( $\alpha^* = 0$ ) indicam uma transição de primeira ordem, como discutido no capítulo 6. Nos outros casos o valor de saturação da rugosidade sem ruído segue uma lei de potência com o expoente diferente de zero. Os valores calculados foram  $\alpha^* = 0,875(4)$  em  $T = T_{BKT}$  e  $\alpha^* = 0,89(1)$  em  $T = 0,60$  no Rotor Planar,  $\alpha^* = 0,88(1)$  para  $T = 0,40$  e  $\alpha^* = 0,86(2)$  para  $T = T_{BKT}$  no modelo do Relógio com  $p = 10$ , os quais estão mostrados na tabela 7.1 (para uma maior clareza da figura 7.19, não foram mostrados os dados para  $T = T_{BKT}$  no modelo do Relógio). De modo similar obtemos  $\alpha^* = 0,87(1)$  para o modelo do Relógio  $p = 10$  na temperatura  $T = 0,60$ , valor bem próximo daquele obtido na temperatura  $T = 0,40$ . Note que independente da temperatura ou modelo, dentro das barras de erro,  $\alpha^*$  é o mesmo tanto na fase onda de spin quanto na transição de Berezinski-Kosterlitz-Thouless. Isso confirma não somente o caráter universal da linha de transição  $BKT$ , como também a universalidade “estendida” na fase onda de spin do modelo do Relógio com  $p$  estados (os pontos para temperatura  $T = 0,60$  encontram-se dentro da região onde se espera quantidades termodinâmicas independentes de  $p$  [44]).

Outra quantidade de interesse é o expoente dinâmico  $z$ . Para o modelo de

	$RP(T_{BKT})$	$RP(T = 0,60)$	$R_{p=10}(T_1 = 0,24)$	$R_{p=10}(T = 0,40)$	$R_{p=10}(T_{BKT})$
$\alpha^*$	0,875(4)	0,89(1)	0	0,88(1)	0,86(2)

Tabela 7.1: Tabela do valores calculados para o expoente da rugosidade sem ruído  $\alpha^*$ , para os modelos de Relógio com  $p = 10$  estados ( $R_p = 10$ ) e Rotor Planar ( $RP$ ).

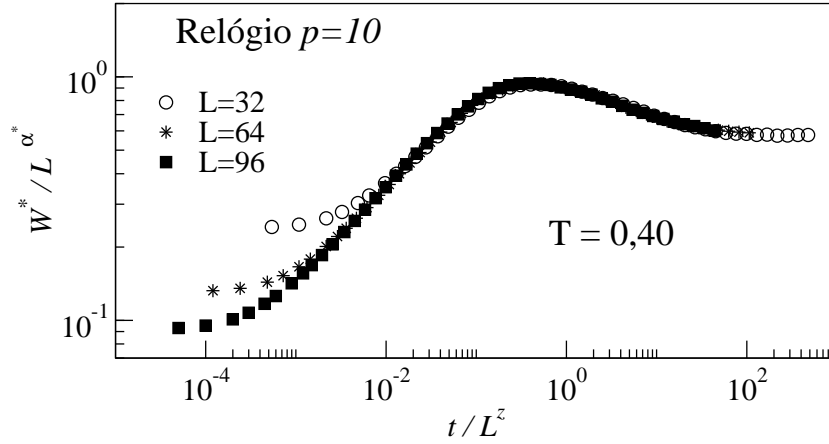


Figura 7.20: Colapso da rugosidade sem ruído  $W^*$  em função do tempo  $t$  para modelo de Relógio com  $p = 10$  com vários tamanhos da rede  $L$ .  $z$  é o expoente dinâmico e  $\alpha^*$  e o expoente da rugosidade sem ruído. As médias foram feitas com  $M = 2000$  amostras com um tempo de  $t = 2 \times 10^4$  PMC.

Relógio com  $p = 10$  estados em  $T = 0,40$ , do capítulo anterior temos que  $\beta_W^* = \beta_W - 1/2$  e da seção 7.2.1 que  $\beta_W(L = \infty) = 0,8932(6)$ , portanto  $\beta_W^*(L = \infty) = 0,3932(6)$  e da tabela 7.1 temos  $\alpha^* = 0,88(1)$ . Como da equação (4.6) temos  $z = \alpha^*/\beta_W^*$ , podemos calcular o expoente dinâmico  $z = 2,24(3)$ , que está de acordo com os valores encontrados na literatura [45] para o algoritmo de Banho Térmico utilizado nesse modelo. Para o modelo do Rotor Planar, no qual usamos o algoritmo de Metropolis, em  $T = T_{BKT}$ , sabemos que  $\beta_W^*(L = \infty) = 0,404(2)$  e  $\alpha^* = 0,875(7)$ , resultando em  $z = 2,17(2)$ , também concordando o valor esperado para esse algoritmo. É importante dizer que escolhemos valores típicos de temperatura  $T$  para efetuar esses cálculos, pois para quaisquer outros valores na mesma fase obtíamos o mesmo resultado, independente do modelo.

Observando mais atentamente as figuras 7.17 e 7.18 vemos que o valor da rugosidade sem ruído  $W^*$  possui uma dependência não somente com o tamanho da rede  $L$ , mas também com o tempo de relaxação  $t_c$  (definido pela eq. (4.6)). Utilizando então a relação de escala de *Family-Vicsek* (4.12), podemos reescalar a rugosidade sem ruído e o tempo de maneira a eliminar a dependência do tamanho da rede  $L$ . Na figura 7.20 mostramos o colapso das curvas da figura 7.17 para o

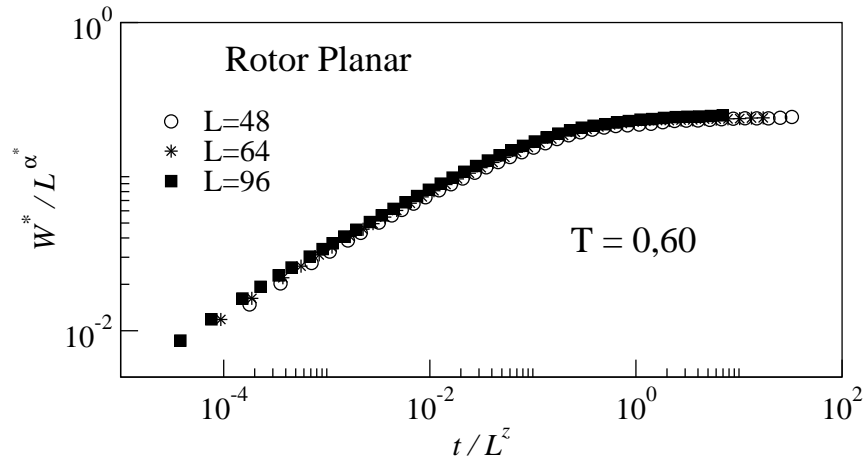


Figura 7.21: Colapso da rugosidade sem ruído  $W^*$  em função do tempo  $t$  para modelo Rotor Planar com vários tamanhos da rede  $L$ .  $z$  é o expoente dinâmico e  $\alpha^*$  o expoente da rugosidade sem ruído. As médias foram feitas com  $M = 1000$  amostras com um tempo de  $t = 2 \times 10^4$  PMC.

modelo de Relógio com  $p = 10$  estados. Para tempos pequenos ( $t \ll t_c$ ) temos um transiente no qual o sistema fica descorrelacionado, não tendo assim dependência com o tamanho da rede  $L$ . Na figura 7.21 mostramos o mesmo colapso das curvas da figura 7.18 reescaladas com o tamanho da rede  $L$ . Esses colapsos mostram que a relação de escala de *Family-Vicsek* é válida para os modelos de Relógio com  $p$  estados e Rotor Planar, bem como para os outros modelos estudados neste trabalho.

## 7.4 Diagrama de Fases

Na seção 6.1.3, salientamos a importância de se ter o diagrama de fases de um sistema. Apresentamos portanto, na figura 7.22 o diagrama de fases para o modelo de Relógio com  $p$  estados, obtido utilizando a presente técnica. Notamos claramente a presença de três fases distintas, a saber, a fase ordenada ferromagnética para  $T < T_1$ , a fase onda de spin para  $T_1 < T < T_2$  e a fase desordenada paramagnética para  $T > T_2$ . Os quadrados azuis são as temperaturas críticas da região onde não temos a fase onda de spin, isto é, só há uma temperatura de transição  $T_c$  da fase ordenada para a fase desordenada. Os círculos verdes são os valores da temperatura

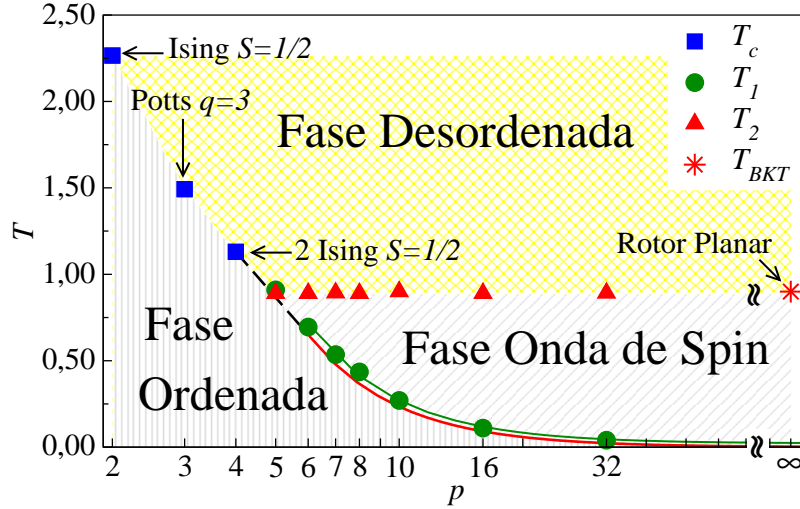


Figura 7.22: Diagrama de fases para o modelo de Relógio com  $p$  estados. Os quadrados azuis são as temperaturas críticas  $T_c$  dos modelos de Ising ( $p = 2$ ), Potts ( $q = 3$ ) e dois modelos de Ising desacoplados ( $p = 4$ ). Os círculos verdes são as temperaturas de transição  $T_1$  ( $p > 5$ ); a linha contínua verde é o ajuste de  $T_1(p)$ ; a linha vermelha é o correspondente ajuste obtido na ref. [44]. Os triângulos vermelhos são as temperaturas de transição  $T_2$  ( $p \geq 5$ ) e o asterisco vermelho é a temperatura  $T_{BKT}$  para o Rotor Planar ( $p = \infty$ ).

de transição  $T_1$  obtidos da média dos valores de  $T_{1\beta}$  e  $T_{1W}$  da figura 7.14 e a linha verde é o correspondente ajuste desses dados. A linha vermelha é o resultado obtido para  $T_1$  na ref. [44], a saber,  $T_1 = 23,4/p^2$ . Como já foi discutido anteriormente, e da figura 7.22, vê-se que os valores estão bem próximos. Enfatizamos aqui que essa temperatura  $T_1$  foi obtida para uma rede  $L = 32$ , uma vez que, como mostrado na figura 7.9, não observamos nenhuma dependência dessa temperatura com o tamanho da rede  $L$  nas simulações por nós realizadas. Os triângulos vermelhos correspondem as temperaturas de transição  $T_2$  para  $p \geq 5$ . Observe que elas têm o mesmo valor de  $T_{BKT}$ , dentro das barras de erros, que são menores que os símbolos. O asterisco vermelho localiza a temperatura do Rotor Planar no limite  $p \rightarrow \infty$ .

Esse diagrama de fases tem algumas semelhanças e diferenças com o diagrama apresentado por Lappili *et al* [44]. Dentre as semelhanças podemos citar: *i*) há uma excelente concordância com as temperaturas críticas  $T_c$  para  $p \leq 4$ ; *ii*) levando em conta as barras de erros, obtemos os mesmos resultados para a

temperatura de transição  $T_1$  para  $p > 5$ ; *iii*)  $T_2$  é constante  $p \geq 8$ . Quanto às diferenças temos: *i*) a temperatura  $T_2$  por nós obtida é a mesma que a do Rotor Planar para  $p \geq 5$ , enquanto que na ref. [44] a temperatura por eles obtida é diferente, bem como o caráter da transição, para  $p \leq 7$ ; *ii*) temos um indício da transição em  $T_1$  ser de primeira ordem, como foi comentado na seção 7.3. Com relação ao item *i*, convém ainda ressaltar que, enquanto Lappili *et al* [44] afirmam ser uma transição em  $T_2$  diferente de *BKT* para  $p \leq 7$ , Challa *et al* [42] propõe que para  $p \geq 5$  a transição é do tipo Berezinski-Kosterlitz-Thouless. Para Lappili *et al* uma transição é do tipo *BKT* quando acontece os seguintes fatos: 1) descontinuidade no módulo da helicidade; 2) comprimento de correlação com divergência exponencial; 3) decaimentos da função de correlação e da magnetização dependentes da temperatura. Para nós, ser *BKT* é ter características similares às encontradas para transição no modelo Rotor Planar. Como o caso  $p = 5$  parece não estar ainda muito claro, vamos discutir seus resultados na próxima seção.

## 7.5 Modelo do Relógio com $p = 5$

Até hoje, pelo que conhecemos da literatura, não se tem uma idéia clara do tipo de transição que ocorre na região  $5 \leq p \leq 7$ . Para Eltizur e colaboradores [41] é tipo *BKT* para  $p \geq 6$  e eles não dizem como deve ser em  $p = 5$ . Já os trabalhos das referências [42, 43] afirmam que para  $p = 6$  é *BKT* nas temperaturas  $T_1$  e  $T_2$ . Contrariando os resultados acima, Lapilli e colaboradores [44] afirmam que a transição  $T_1$  não é *BKT* para  $p \geq 5$  e  $T_2$  só é do tipo *BKT* para  $p \geq 8$ , inclusive com colapso termodinâmico. Veremos nessa seção como os resultados da presente técnica podem dar informações ao caso específico  $p = 5$ .

Na figura 7.23 mostramos o comportamento da rugosidade  $W$  em função da temperatura  $T$  para  $p = 5$ , onde se observa, claramente, que a temperatura de transição  $T_2$  tem uma dependência com o tamanho da rede  $L$ , enquanto  $T_1$  é



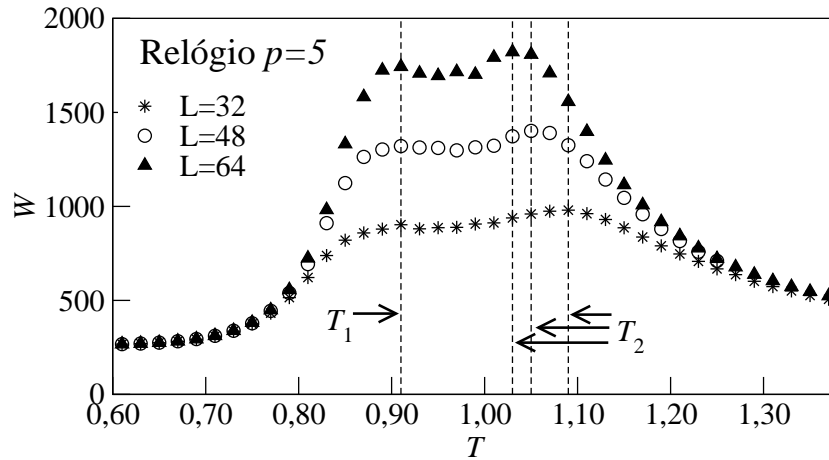


Figura 7.23: Rugosidade  $W$  em função da temperatura  $T$  para o modelo de Relógio com  $p = 5$  para vários tamanhos de rede  $L$ . As linhas pontilhadas mostram as temperaturas de transição  $T_2$  e  $T_1$ . As médias foram feitas com  $M = 2000$  amostras com um tempo de simulação  $t = 2 \times 10^4$  PMC. As barras de erros são menores que os símbolos.

praticamente o mesmo  $T_1 = 0,91(2)$ . Estimamos o valor de  $T_1(L)$  e  $T_2(L)$  como sendo o pico do valor da rugosidade para o tamanho  $L$ .

Na figura 7.24 estão mostradas algumas análises de tamanho finito para a temperatura  $T_2$  com dois tipos de comportamento, um com lei de potência e outro logarítmico. As temperaturas de transição encontradas, no limite termodinâmico,

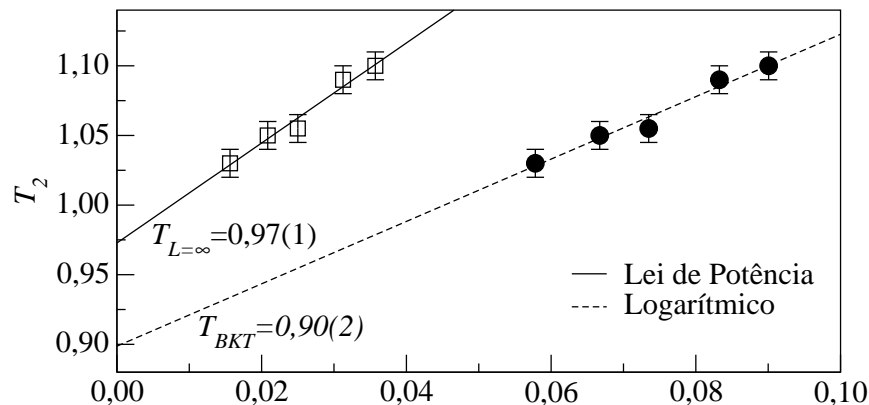


Figura 7.24: Comportamento da temperatura de transição  $T_2$  em função do tamanho da rede  $L$  para o modelo de Relógio com  $p = 5$  e vários tamanhos de rede  $L = 28, 32, 40, 48, 64, 80$ . Os círculos cheios são os pontos ajustados ao ajuste logarítmico do tipo  $1/(\ln(L))^2$  e os quadrados vazios são os mesmos pontos com um ajuste do tipo lei de potência  $1/L^\phi$  com  $\phi = 1$ . As médias foram feitas com  $M = 2000$  amostras com um tempo de simulação  $t = 2 \times 10^4$  PMC.

---

para os dois ajustes foram  $T_2 = 0,97(1)$  para o ajuste linear e  $T_2 = 0,90(2)$  para o ajuste logarítmico. Dentro das barras de erro, esses valores são iguais aos obtidos para  $p > 5$ , indicando que para  $p = 5$  temos uma mesma temperatura de Berezinkii-Kosterlitz-Thouless  $T_{BKT} = 0,89$ . Notamos também que essa temperatura  $T_2$  converge para o valor correspondente à temperatura  $T_1$ , sugerindo realmente que temos somente uma transição em  $p = 5$ . Salientamos aqui, que esse resultado ainda não tinha sido obtido em trabalhos anteriores, ajudando a esclarecer uma parte das dúvidas que a literatura traz nessa região. Tendo em vista o exposto acima, isto é, a mesma temperatura  $BKT$  para  $p \geq 5$  somos levados a acreditar que a universalidade “estendida” é também aplicável para  $p \leq 7$ . Entendemos como universalidade “estendida” o fato os valores numéricos das grandezas termodinâmicas acima de uma determinada temperatura terem o mesmo valor numérico [44].

# Capítulo 8

## Conclusões

Estudamos a representação de interfaces definindo um modelo de crescimento baseado na dinâmica dos modelos de Potts com  $q$  estados, Blume-Capel com  $S = 1$ , Relógio com  $p$  estados e Rotor Planar em uma rede quadrada e estudamos os expoentes da rugosidade das interfaces geradas por esses modelos. Utilizamos as técnicas desenvolvidas na área de crescimento de superfícies para caracterizar a criticalidade desses modelos magnéticos.

### 8.1 Modelos de Potts e Blume-Capel

Nós mostramos que o crescimento das superfícies exibe características dinâmicas diferentes, medidas pelo expoente de crescimento  $\beta_W$ , o expoente de Hurst  $H$  e o expoente da rugosidade sem ruído  $\alpha^*$ . Para  $T \neq T_c$  o crescimento é sempre descorrelacionado, ou seja, temos uma deposição aleatória dando um expoente de crescimento  $\beta_W \simeq 1/2$  e  $H \simeq 1/2$ . Próximo à temperatura de transição  $T \simeq T_c$  a rugosidade apresenta uma mudança no comportamento, passa de um regime correlacionado ( $t < t_c$ ) para um descorrelacionado ( $t > t_c$ ). Neste “*cruzamento*” o expoente de crescimento muda de valor  $\beta_W^{(c)} > 1/2$  para  $\beta_W \simeq 1/2$ . O tempo de “*cruzamento*”  $t_c$  mede a o tempo de relaxação  $\tau$  do sistema finito para os modelos

de spins em  $T_c$ .

Para um tempo fixo  $t \gg t_c$ , a rugosidade  $W$  tem um pico em uma temperatura  $T_W(L)$ . Quando tomamos este valor de  $T_W(L)$  em função de  $L^{-1/x}$  no limite termodinâmico, este concorda com o valor da temperatura crítica dos modelos de spins na rede quadrada. Os picos em  $W$  nas transições de segunda ordem são mais suaves do que nas transições de primeira ordem e no ponto tricrítico.

Da tabela 6.1 nós podemos notar que os expoentes de crescimento e de Hurst ( $\beta_w$  e  $H$ ) das superfícies para  $q = 2$ ,  $d = 0$  e  $d = 1,95$  (isto é, transições de fase de segunda ordem) indicam a mesma classe de universalidade (dentro das barras de erros), como era esperado. Para  $q = 3$ ,  $q = 4$ , e no ponto tricrítico, os expoentes são diferentes e estão de acordo com a equação (4.31). Entretanto, nestes casos, os valores dos expoentes não mudam muito, mesmo para classes de universalidade diferentes, como por exemplo os modelos de Potts  $q = 3$  com  $H = 0,730(4)$  e Ising  $S = 1/2$  com  $H = 0,725(6)$ .

A relação de escala de Family-Vicsek é válida para a rugosidade sem ruído  $W^*$  com uma relação de escala anômala intrínseca, característica de superfícies que não são auto-afins.

## 8.2 Modelos Rotor Planar e Relógio

Mostramos também que o método proposto nesse trabalho pode ser aplicado não somente em modelos com spins discretos (Potts, Blume-Capel e Relógio), mas também para modelos com spins contínuos (Rotor Planar). Obtivemos uma temperatura de transição para o modelo do Rotor Planar  $T_{BKT} = 0,89(1)$  que está de acordo com os valores encontrados na literatura, indicando que o método é eficiente também nesse caso.

Para o modelo do Relógio conseguimos detectar as suas três fases (ordenada, onda de spin e desordenada). O expoente da rugosidade sem ruído é nulo tanto na

fase ordenada quanto na desordenada, o que já era de se esperar, pois o sistema está descorrelacionado. Na fase onda de spin o valor do expoente da rugosidade sem ruído é aproximadamente constante  $\alpha^* \approx 0,87$  em qualquer temperatura, sendo esse valor, dentro da barra de erro, o mesmo do Rotor Planar para qualquer  $p > 5$ , indicando assim um caráter universal. Determinamos também as temperaturas críticas dos modelos de duas maneiras diferentes, uma via expoente de crescimento  $\beta_W$  e outra via Rugosidade  $W$  e obtivemos os mesmos resultados, dentro das barras de erro. Tanto a temperatura  $T_1$  quanto a temperatura  $T_2$  estão em concordância com os valores obtidos por outros métodos. Além disso conseguimos determinar essas temperaturas para  $p = 5$ , e mostramos que elas se igualam no limite termodinâmico, resultado este ainda não encontrado por nós na literatura.

Nesses modelos, verificamos que a relação de escala de Family-Vicsek também é válida.

### 8.3 Comentários Finais

De acordo como o presente estudo, podemos determinar a ordem da transição, a temperatura crítica, como também alguns expoentes críticos estáticos e dinâmicos dos modelos de spins através do mesmo método de escala aplicados em fenômenos de crescimento de superfície. Nossos resultados para o expoente de Hurst no equilíbrio ( $t \gg t_c$ ) são consistentes com as correlações de longo alcance na segunda ordem ( $H > 1/2$ ) e com correlações de curto alcance ( $H = 1/2$ ) nas transições de fase de primeira ordem. Além do mais, o expoente da rugosidade sem ruído  $\alpha^*$  é nulo em uma transição de primeira ordem, enquanto que para transições de segunda ordem,  $\alpha^* > 0$ . Embora esse estudo seja restrito aos modelos de Potts, Blume-Capel, Relógio e Rotor Planar, todos em uma rede quadrada, nós acreditamos que essa técnica de mapeamento possa ser estendida ao estudo de qualquer transição observada em modelos de spins. Por exemplo: *i*) modelo de Blume-Capel para spin

---

$S = 3/2, 2, \dots$ ; *ii*) modelos diluídos para os quais as temperaturas de transição não são triviais de serem obtidas através do uso de métodos padrões; *iii*) o modelo XY vetorial de Blume-Emmery-Griffiths, dentre outros. Pretendemos investigar essas transições em trabalhos futuros.

# Referências Bibliográficas

- [1] Ashcroft/Mermin, *Solid State Physics* (Saunders College Publishing, NY, 1976).
- [2] H. Eugene Stanley, *Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena* (Oxford University Press, NY, 1971).
- [3] K. Huang, *Statistical Mechanics*, (John Wiley and Sons, NY, 1987).
- [4] Sílvio R. A. Salinas, *Introdução à Física Estatística*, (EDUSP, São Paulo, 1997).
- [5] V.L. Berezinskii, Sov. Phys. JEPT **34**, 610 (1972).
- [6] J. M. Kosterlitz e D. J. Thouless, J. Phys. C, **6**, 1181 (1973).
- [7] E. Domany e W. Kinzel, Phys. Rev. Letters, **53**, 311 (1984).
- [8] A. Bakk, J. S. Hoye, Physica A, **323** 504-518 (2003).
- [9] A. Nussbaumer e colaboradores, Europhysics Letters, **75**, 716-722 (2006).
- [10] A. Grabowski e R. A. Kosiński, Physica A, **361**, 651-664 (2006).
- [11] K. Suchecki e J. A. Holyst, Phys. Rev. E, **74**, 011122 (2006).
- [12] F. Gerl, Karin Bauer e U. Krey, Z. Phys. B - Condensed Matter **88**, 339-347 (1992).

- 
- [13] M. Yoshioka, Phys. Review Letters, **102** 158102 (2009).
- [14] E. D. Leonel e P. V. E. McClintock, Phys. Rev. E, **70**, 016214 (2004).
- [15] A. L. Barabási e H. E. Stanley, *Fractal Concepts in Surface Growth* (Cambridge University Press, Cambridge) 1995.
- [16] S. C. Ferreira, S. G. Alves, A. F. Brito e J. G. Moreira, Phys. Rev. E, **71**, 051402 (2005).
- [17] F. Family e T. Vicsek, *Dynamics of Fractal Surfaces*, (World Scientific, Singapore) 1991.
- [18] P. Meakin, *Fractals, Scaling and Growth far from Equilibrium* (Cambridge University Press, Cambridge) 1998.
- [19] J. A. Sales, M. L. Martins e J. G. Moreira, Phys. A, **245**, 461 (1997).
- [20] J. A. Sales, M. L. Martins e J. G. Moreira, J. Phys. A, **32**, 885 (1999).
- [21] A. P. F. Atman e J. G. Moreira, Eur. Phys. J. B, **16**, 501 (2000).
- [22] A. P. F. Atman, R. Dickman e J. G. Moreira, Phys. Rev. E, **66**, Art. 016113 (2002).
- [23] J. A. Redinz e M. L. Martins, Phys. Rev. E, **63**, Art. 066133 (2001).
- [24] A. Faissal Brito e J. A. Redinz, Physica A **333**, 269-277 (2004).
- [25] L. Schulke e B. Zheng, Physics Letters A **204**, 295-298 (1995).
- [26] T. Tomé e M.J. Oliveira, Phys. Rev. E, **58**, Art. 4242 (1998).
- [27] E. Ising, Z. Physic, **253** (1925).
- [28] S. Kobe, Braz. J. Phys. **30** 649 (2000).



- 
- [29] R. E. Peierls, Proc. Camb. Phil. Soc. **32**, 471 (1936).
- [30] L. Onsager, Phys. Rev., **65** 117 (1944).
- [31] R. B. Potts, Proc. Cambridge Philos. Soc. **106**, 48 (1952).
- [32] J. A. Glazier e F. Graner, Phys. Rev. E, , **47**, 2128 (1993).
- [33] M. A. Knewitz and J. C. M. Mombach, Comp. Biol. and Medic., **59**, 36 (2006).
- [34] G. L. Thomas, J. C. M. Mombach, M. A. P. Idiart, C. Quilliet e F. Graner, Cool. Surf. A, **90**, 263 (2005).
- [35] P. Peczak, D. P. Landau, Phys. Rev. E, **39**, 11932 (1989).
- [36] C. Tsallis, A. C. N. de Magalhães, Physics Reports **268**, 305-430 (1996).
- [37] B. Bercher, P. Butera, W. Janke and L. Shchur, Computer Physics Communications, **180**, 493 (2009).
- [38] M. Blume, Phys. Rev. **141** 517 (1966).
- [39] H. W. Capel, Physica **32** 966 (1966).
- [40] J. C. Xavier , F. C. Acaraz, D. Penã Lara e J. A. Plascak, Phys. Rev. B **57**, 11575-11581 (1998).
- [41] S. Elitzur, R. B. Pearson e J. Shigemitsy, Phys. Rev. D, **12**, 3698 (1979).
- [42] Murty S. S. Challa e D. P. Landau, Phys. Rev. D, **33**, 437 (1986).
- [43] E. Rastelli, S. Regina e A. Tassi, Phys. Rev. B, **69**, 174407 (2004).
- [44] Cintia M. Lapilli, Peter Pfeifeir and Carlos Wexler, Phys. Rev Letters **96** 140603 (2006).

- 
- [45] D. P. Landau e K. Binder in *A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics* (Cambridge University Press, Cambridge, 2000).
- [46] D. P. Landau, J. Mag. Mag. Mat. **200** 231 (1999).
- [47] H. Kalos e P. A. Whitlock, *Monte Carlo Methods vol.1*, (Wiley and Sons, NY, 1986).
- [48] N. Metropolis, A. Rosenbluth, M. Rosenbluth, A. Teller e E. Teller e J. Chem. Phys. **21** 1087 (1953).
- [49] V. L. Líbero, Rev. Brasileira de Física, **22**, 3, (2000).
- [50] M. E. J. Newman and G. T. Barkema, *Monte Carlo Methods in Statistical Physics* (Clarendon Press - Oxford, NY, 1999).
- [51] D. P. Landau e R. H. Swendsen, Physical Review Letters, **46**, 1437 (1981).
- [52] Juan M. López e Miguel A. Rodrigues, Phys. Rev E **54** R2189 (1996).
- [53] Juan M. López, Miguel A. Rodrigues and Rodolfo Cuerno, Phys. Rev E **56** 3993 (1997).
- [54] Juan M. López e Jean Schmittbuhl, Phys. Rev E **57** 6405 (1998).
- [55] W.J. Shugard, J.D. Weeks e G.H. Gilmer, Phys. Rev Letters **41** 1399 (1978).
- [56] A. F. Brito, J. A. Redinz e J. A. Plascak, Phys. Rev E **75** 046106 (2007).

# Livros Grátis

( <http://www.livrosgratis.com.br> )

Milhares de Livros para Download:

[Baixar livros de Administração](#)

[Baixar livros de Agronomia](#)

[Baixar livros de Arquitetura](#)

[Baixar livros de Artes](#)

[Baixar livros de Astronomia](#)

[Baixar livros de Biologia Geral](#)

[Baixar livros de Ciência da Computação](#)

[Baixar livros de Ciência da Informação](#)

[Baixar livros de Ciência Política](#)

[Baixar livros de Ciências da Saúde](#)

[Baixar livros de Comunicação](#)

[Baixar livros do Conselho Nacional de Educação - CNE](#)

[Baixar livros de Defesa civil](#)

[Baixar livros de Direito](#)

[Baixar livros de Direitos humanos](#)

[Baixar livros de Economia](#)

[Baixar livros de Economia Doméstica](#)

[Baixar livros de Educação](#)

[Baixar livros de Educação - Trânsito](#)

[Baixar livros de Educação Física](#)

[Baixar livros de Engenharia Aeroespacial](#)

[Baixar livros de Farmácia](#)

[Baixar livros de Filosofia](#)

[Baixar livros de Física](#)

[Baixar livros de Geociências](#)

[Baixar livros de Geografia](#)

[Baixar livros de História](#)

[Baixar livros de Línguas](#)

[Baixar livros de Literatura](#)  
[Baixar livros de Literatura de Cordel](#)  
[Baixar livros de Literatura Infantil](#)  
[Baixar livros de Matemática](#)  
[Baixar livros de Medicina](#)  
[Baixar livros de Medicina Veterinária](#)  
[Baixar livros de Meio Ambiente](#)  
[Baixar livros de Meteorologia](#)  
[Baixar Monografias e TCC](#)  
[Baixar livros Multidisciplinar](#)  
[Baixar livros de Música](#)  
[Baixar livros de Psicologia](#)  
[Baixar livros de Química](#)  
[Baixar livros de Saúde Coletiva](#)  
[Baixar livros de Serviço Social](#)  
[Baixar livros de Sociologia](#)  
[Baixar livros de Teologia](#)  
[Baixar livros de Trabalho](#)  
[Baixar livros de Turismo](#)