



Instituto de Física (UFMT)

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

2010

**Simulações de Monte Carlo no Modelo de Baxter-Wu
Spin-1**

Lucas Nunes Jorge

Orientador:

Prof. Dr. Paulo Henrique Lana Martins

— Setembro de 2010 —

Livros Grátis

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

Milhares de livros grátis para download.

Lucas Nunes Jorge

Simulações de Monte Carlo no Modelo de Baxter-Wu

Dissertação apresentada ao Curso de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal de Mato Grosso como parte dos requisitos necessários para a o exame de qualificação.

Orientador:

Prof. Dr. Paulo Henrique Lana Martins

Cuiabá-MT

— Setembro de 2010 —

À Deus e aos meus pais Carlos Jorge e Denise Jorge e meus irmãos Thiago e Rafael e sua esposa Angélica Jorge e à minha esposa Samára Jorge, pois não teria chegado tão longe sem o amor incondicional de minha família.

“Ele é o que está assentado sobre o globo da Terra[...] [...] é Ele o que estende os céus como cortina, e os desenrola como tenda, para neles habitar.”

Isaías 40:22 - 200 anos antes de Pitágoras postular que a Terra era redonda.

Agradecimentos

Agradeço e dedico este trabalho primeiramente ao Senhor nosso Deus por toda a paciência e misericórdia que tem tido comigo e por ter dado-me forças para chegar até aqui. Agradeço também a toda minha família pela paciência e compreensão, ao professor Paulo pela paciência, dedicação e atenção, que sempre me orientou e me aconselhou durante esta fase tão importante da minha vida e agradeço aos meus bons amigos que sempre estiveram comigo neste mestrado.

Resumo

Dentre os vários modelos de spin utilizados para descrever sistemas magnéticos, aquele conhecido por Baxter-Wu é particularmente interessante por considerar interações entre tripletos. Dessa forma, o modelo não apresenta simetria de inversão dos spins, como ocorre nos modelos mais conhecidos (Ising, Heisenberg etc). Inicialmente proposto por Woods e Griffiths em 1972, foi resolvido exatamente por Baxter e Wu em 1973 para o caso de spin-1/2. Considerando spin-1, em que as variáveis de spin podem assumir os valores +1, -1 ou 0, podemos incluir ainda um termo de campo cristalino. Neste modelo mais completo, temos solução exata apenas para alguns casos limites. Os resultados encontrados na literatura mostram que o diagrama de fases deste modelo é bastante interessante, apresentando linhas de transições de primeira e segunda ordem. Espera-se que haja um ponto multicrítico, cuja localização não está muito bem definida. Neste trabalho, realizamos simulações computacionais (utilizando a conhecida técnica de Monte Carlo) para obter a multicriticalidade do modelo.

Palavras-chave: Modelo de Baxter-Wu, Multicriticalidade, Monte Carlo..

Áreas do conhecimento: Matéria Condensada, Mecânica Quântica e Física Estatística.

Abstract

Among the various models used to describe spin magnetic systems, one known by Baxter-Wu is particularly interesting considering interactions between triplets. Thus, the model has no inversion symmetry of the spins, as in most known models (Ising, Heisenberg, etc.). Initially proposed by Woods and Griffiths in 1972, was solved exactly by Baxter and Wu in 1973 for the case of spin-1 / 2. Whereas spin-1, where the spin variables can take values +1, 0 or -1, we can also include a term crystal field. In this more complete model, we have the exact solution only for some limiting cases. The findings in the literature show that the phase diagram of this model is very interesting as lines of transitions of first and second order. It is expected that there is a multicriteria point, whose location is not very well defined. We carried out computer simulations (using the known Monte Carlo technique) to obtain the multicriticalidade model.

Keywords: Baxter-Wu Model , Multicriticalidade, Monte Carlo.

Knowledge Areas: Condensed Matter, Quantum Mechanics and Solid State Physics.

Conteúdo

1	Introdução	11
2	O Método Monte Carlo	13
2.1	Amostragem de Grandezas Físicas	14
2.1.1	Algoritmo de Metropolis	17
2.1.2	O Método do Histograma	18
3	Transições de Fase e Teoria de Escala de Tamanho Finito	21
3.1	Transição de Fase e Fenômenos Críticos	21
3.1.1	Expoentes Críticos	23
3.2	Teoria de Escala de Tamanho Finito	25
4	O Modelo de Baxter-Wu	30
4.1	O Modelo de Ising	30
4.2	O Modelo de Baxter-Wu	31
4.2.1	Modelo de Baxter-Wu spin-1	33
5	Resultados e Discussões	37
5.1	Caracterização da redes $L = 12$ e $L = 18$	38
5.1.1	Valor médio da magnetização versus campo cristalino .	38
5.1.2	Cumulante reduzido do parâmetro de ordem versus campo cristalino	40
5.1.3	Caracterização de sistemas com $D = 1,22$	42
5.1.4	Caracterização do modelo com $D = 1,60$	47
5.1.5	Cumulante reduzido do parâmetro de ordem versus temperatura como função do campo cristalino	50

6 Conclusão e Perspectivas

53

Lista de Figuras

3.1	Diagrama de fases para um ferromagneto uniaxial simples $H \times T$. A linha de coexistência entre as fases ferro-1 e ferro-2 é dada por $H = 0$ e em $T < T_c$	22
3.2	Magnetização espontânea versus temperatura para um ferromagneto uniaxial simples.	23
4.1	Rede triangular inicial proposta por Wood e Griffiths [22]	32
4.2	Rede triangular do modelo de Baxter-Wu.	32
4.3	Rede triangular do modelo de Baxter-Wu formada por três subredes e a rede com spin $s_i = 0$	34
4.4	Transição de fase com $T = 0$	34
4.5	Transição de fase em uma rede BW a $T \neq 0$, de acordo com a referência [14]	35
4.6	Transição de fase em uma rede BW a $T \neq 0$ [12]	36
5.1	Valor médio do parâmetro de ordem versus campo cristalino para $L = 12$ e $T = 1,000$ a $T = 1,500$	38
5.2	Valor médio do parâmetro de ordem versus campo cristalino para $L = 18$ e $T = 1,000$ a $T = 1,500$	39
5.3	Cumulante reduzido do parâmetro de ordem versus campo cristalino para $L = 12$ e $T = 1,000$ a $T = 1,500$	40
5.4	Cumulante reduzido do parâmetro de ordem versus campo cristalino para $L = 18$ e $T = 1,000$ a $T = 1,500$	41
5.5	Comportamento do calor específico para os tamanhos de rede $L = 12, 15, 18, 36$ para $D = 1, 22$ e T variando de $T = 1, 2050$ a $T = 1, 3050$	42

5.6	Valor médio da energia versus a temperatura para os tamanhos de rede $L = 12, 15, 18, 36$ para $D = 1.22$ e T variando de $T = 1, 2050$ a $T = 1, 3050$	43
5.7	Valor médio do parâmetro de ordem versus temperatura para os tamanhos de rede $L = 12, 15, 18, 36$ para $D = 1.22$ e T variando de $T = 1, 2050$ a $T = 1, 3050$	44
5.8	Cumulante reduzido do parâmetro de ordem para os tamanhos de rede $L = 12, 15, 18, 36$ para $D = 1.22$ e T variando de $T = 1, 2050$ a $T = 1, 3050$ com $T_c = 1, 264(1)$	45
5.9	Aproximação do cruzamento dos cumulantes reduzidos do parâmetro de ordem para os tamanhos de rede $L = 12, 15, 18, 36$ com $T_c = 1, 2637(6)$	46
5.10	Comportamento do calor específico para os tamanhos de rede $L = 12, 15, 18, 36$ para $D = 1, 60$ e T variando de $T = 0, 950$ a $T = 1, 095$	47
5.11	Valor médio da energia para os tamanhos de rede $L = 12, 15, 18, 36$ para $D = 1.60$ e T variando de $T = 0, 950$ a $T = 1, 0950$	48
5.12	Valor médio do parâmetro de ordem para os tamanhos de rede $L = 12, 15, 18, 36$ para $D = 1.60$ e T variando de $T = 0, 950$ a $T = 1, 0950$	49
5.13	Cumulante reduzido do parâmetro de ordem para os tamanhos de rede $L = 12, 15, 18, 36$ para $D = 1.60$ e T variando de $T = 0, 950$ a $T = 1, 095$ com $T_c = 1, 044(1)$	50
5.14	Cumulante reduzido do parâmetro de ordem para os tamanhos de rede $L = 12, 15, 18, 36$ para $D = 1.22$ e T variando de $T = 1, 2050$ a $T = 1, 3050$ com $T_c = 1, 044(1)$	51

Lista de Tabelas

5.1	<i>Parâmetros utilizados na simulação de MC para o cálculo do cumulante de quarta ordem versus $T(D)$. Os valores foram retirados da referência [12]</i>	52
-----	---	----

Capítulo 1

Introdução

As transições de fases são observadas desde o final do século XIX, com o trabalho experimental de Andrews em 1869 que estudou o fenômeno da opalescência crítica e de van der Waals, que quatro anos mais tarde caracterizou a transição de fases entre as fases líquida e gasosa em fluidos. Nas transições ferromagnéticas temos a abordagem de Curie-Weiss e mais a frente, Landau introduziu o conceito de parâmetro de ordem e formulou uma expressão para o potencial termodinâmico, o qual era escrito como uma série de potências. Após o século XX houve um aprofundamento no estudo de fenômenos críticos e das transições de fases, com a introdução dos expoentes críticos, os quais caracterizam grandezas termodinâmicas de interesse físico nas proximidades das regiões críticas. A forma como o ferromagnetismo de momentos localizados foi tratado por Ernest Ising foi a precursora para o estudo e caracterização de sistemas magnéticos. Como modelo inicial, o Modelo de Ising tratava da transição de fases que ocorre em um ferromagneto simples cujas interações entre os momentos magnéticos, ou *spins*, ocorrem aos pares cuja solução exata para uma rede cristalina com campo externo nulo foi dada por Onsager em 1944. Em nosso trabalho abordamos o Modelo de Baxter-Wu (BW), onde, neste modelo as interações entre os spins ocorrem em tripletos, a solução exata para o caso spin-1/2 foi obtida por Woods e Griffiths em 1972. O problema apresentado no BW Spin-1, e que motivou este trabalho é que o referido modelo apresenta uma multicriticalidade envolvendo possivelmente um ponto pentacrítico, o qual não é muito bem definido, assim, o

objetivo deste trabalho é realizar simulações de Monte Carlo no modelo BW spin-1 utilizando o algoritmo de Metropolis e a teoria de escala de tamanho finito para calcular grandezas físicas importantes tais como magnetização, cumulantes de quarta ordem, calor específico, entre outras para caracterizar o modelo em questão e obter o ponto pentacrítico. Além disso utiliza-se a teoria de escala de transições de fase para obter o ponto pentacrítico. O avanço das simulações computacionais possibilitou o estudo de sistemas complexos que são difíceis de serem resolvidos exatamente. Elas corroboram resultados experimentais e também ajudam na interpretação de dados.

O nosso objetivo neste trabalho é utilizar as simulações de Monte Carlo para estudar a multicriticalidade no modelo de Baxter-Wu spin-1.

No segundo capítulo desta dissertação falamos sobre o método de Monte Carlo onde abordamos os assuntos referentes a amostragem de grandezas físicas. Alguns temas, como amostragem por importância, processos de Markov, técnica do histograma simples e Algoritmo de Metropolis são discutidos.

No capítulo 3 abordamos as transições de fases e fenômenos críticos bem como a teoria de escala de tamanho finito.

O capítulo 4 trata dos modelos magnéticos. O modelo de Ising foi inserido devido à sua razão histórica sendo o modelo pioneiro na descrição da transição de fases em um sistema magnético e falamos também sobre o modelo de Baxter-Wu que é o modelo alvo do nosso trabalho.

O quinto capítulo aborda os resultados obtidos nas simulações e no último capítulo temos as considerações finais e as perspectivas de continuação do trabalho.

Capítulo 2

O Método Monte Carlo

Introdução

A simulação computacional vem se tornando cada vez mais essencial para o estudo de sistemas físicos. Uma das razões é que os modelos teóricos dos sistemas físicos são cada vez mais sofisticados, mais realistas e também mais complexos dificultando a obtenção de soluções exatas. Nas simulações avaliam-se as grandezas físicas de interesse dos sistemas, no entanto, em alguns casos, não se resolve explicitamente as equações que as descrevem.

Os métodos computacionais mais utilizados são a Dinâmica Molecular (DM) e o Monte Carlo (MC). O primeiro está associado a situações de caráter determinístico via integração direta das equações de movimento do sistema, ao passo que o segundo tem como característica ser um método estocástico, ou seja, não determinístico, onde obtemos os valores esperados das grandezas físicas do sistema a partir das probabilidades das configurações do próprio sistema. O objetivo do método de Monte Carlo é obter grandezas a partir de médias probabilísticas em situações onde é difícil, ou impossível, obter resultados de formas analítica, como é o caso do modelo de Ising tridimensional entre outros.

2.1 Amostragem de Grandezas Físicas

As simulações de MC são comumente utilizadas para calcular valores esperados $\langle Q \rangle$ de quantidades observáveis Q tais como energia interna ou a magnetização de um sistema termodinâmico. Para uma quantidade Q , que pode variar no tempo, podemos escrever o seu valor esperado a partir dos valores em cada um dos estados m (Q_m):

$$\langle Q \rangle = \sum_m Q_m \omega_m(t) \quad (2.1)$$

onde $\omega_m(t)$ denota um conjunto de pesos que representam a probabilidade do sistema estar em um estado m num instante t e Q_m é o valor do observável Q quando o sistema se encontra no estado m .

Podemos escrever também uma equação que representa a evolução temporal de $\omega(t)_m$ em termos de $P(m \rightarrow l)$, que é a probabilidade de transição de um estado inicial m para um estado final l definindo $P(m \rightarrow l)dt$ como a probabilidade do sistema passar de um estado m para um estado l em um intervalo de tempo dt . Assim temos a equação mestra para a evolução de $\omega(t)_m$ em termos de $P(m \rightarrow l)$.

$$\frac{d\omega_m(t)}{dt} = \sum_l [\omega_l(t)P(l \rightarrow m) - \omega_m(t)P(m \rightarrow l)] \quad (2.2)$$

No segundo membro, o termo da esquerda representa a transição do estado l para o estado m , e o termo da direita representa a transição de m para outros estados. As probabilidades $\omega_m(t)$ devem obedecer à condição de que:

$$\sum_m \omega_m(t) = 1 \quad (2.3)$$

Note que a equação (2.1) contém informações sobre os valores esperados reais que podem ser obtidos em medidas experimentais.

Se tivermos um sistema onde os dois termos no lado direito da equação (2.2) se cancelam para todo o m , o termo $d\omega_m/dt$ torna-se nulo, por conseguinte os pesos da probabilidade do sistema estar no estado m (ω_m) serão constantes pelo resto do tempo. Este estado é chamado estado *estacionário*

e a escolha:

$$\omega_l(t)P(l \rightarrow m) = \omega_m(t)P(m \rightarrow l) \quad (2.4)$$

representa a condição do *balanço detalhado*. Um sistema estacionário que satisfaça a condição do balanço detalhado é dito em *equilíbrio*. Os valores que os pesos ω_m assumem ao longo do resto do tempo no equilíbrio são chamados de probabilidades de ocupação de equilíbrio [1] e, para um estado qualquer m , são dados por:

$$p_m = \lim_{t \rightarrow \infty} \omega_m(t) \quad (2.5)$$

Gibbs em 1902 [4] demonstrou pelo ensemble canônico que para um sistema em equilíbrio térmico com um reservatório a temperatura absoluta T , as probabilidades de ocupação são dadas por:

$$p_m = \frac{e^{-E_m/kT}}{\sum_m e^{-E_m/kT}} \quad (2.6)$$

onde E_m é a energia do estado m e k é a constante de Boltzmann que é dada por $1,38 \times 10^{-23} JK^{-1}$. Podemos usar a notação abreviada $\beta = 1/kT$ e também utilizar uma constante de normalização Z que é definida como:

$$Z = \sum_m e^{-\beta E_m} \quad (2.7)$$

Portanto a equação para probabilidade p_m torna-se:

$$p_m = \frac{1}{Z} e^{-\beta E_m} \quad (2.8)$$

A equação acima é chamada de função de distribuição de Boltzmann e o termo Z é mais conhecido como *função de partição* e está associado à normalização da probabilidade p_m . Portanto, as equações (2.1), (2.4) e (2.6) nos fornecem subsídios para estimar o valor esperado $\langle Q \rangle$ para um sistema em equilíbrio:

$$\langle Q \rangle = \sum_m Q_m p_m \quad (2.9)$$

logo

$$\langle Q \rangle = \frac{1}{Z} \sum_m Q_m e^{-\beta E_m} \quad (2.10)$$

Um dos problemas encontrado nas simulações reside no fato de que o número de estados de um sistema termodinâmico é muito maior grande, assim, uma das dificuldades é mensurar um conjunto de configurações de modo a obtermos bons resultados para uma dada grandeza Q .

Um dos meios possíveis para realizarmos tal medida pode ser feito da seguinte maneira: em vez de tomarmos todas as configurações possíveis, podemos realizar a simulação considerando apenas as configurações mais importantes, ou mais prováveis, onde cada estado do sistema pode ser escolhido com uma probabilidade proporcional ao peso de Boltzmann. Este método é conhecido como “*Importance Sampling*” [1, 2].

Para uma dada grandeza Q , seu valor médio pode ser calculado como:

$$\langle Q \rangle = \frac{\sum_m Q_m e^{-\beta E_m}}{\sum_m e^{-\beta E_m}} \quad (2.11)$$

Escolhendo um subconjunto com M estados $(\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_M)$ o cálculo do valor esperado $\langle Q \rangle$ se reduz a uma média aritmética simples sobre os M estados escolhidos:

$$Q_M = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M Q_{\mu_i} \quad (2.12)$$

No entanto para que a média Q_M forneça estados de acordo com a distribuição de Boltzmann (equação 2.2) utiliza-se o processo de Markov. O processo markoviano consiste em gerar de modo aleatório um novo estado ν a partir de um estado inicial μ de acordo com a probabilidade de transição $P(\mu \rightarrow \nu)$. A energia dos estados μ e ν são respectivamente E_μ e E_ν e a probabilidade de transição deve satisfazer as seguintes condições:

- não varia com o tempo;
- depende somente dos estados μ e ν e não dos estados anteriores;
- o processo deve evoluir de modo que obedeça a condição de ergodicidade. A condição ergódica impõe que um determinado estado seja

alcançado, a partir de um estado inicial, para um longo tempo computacional.

- a condição de equilíbrio deve ser dada pela relação

$$P_\mu P(\mu \rightarrow \nu) = P_\nu P(\nu \rightarrow \mu) \quad (2.13)$$

que afirma que após certa quantidade de transições obteremos uma situação de equilíbrio.

Para que a distribuição de probabilidades seja uma distribuição de Boltzmann deve-se escolher P_μ e P_ν como pesos de Boltzmann (equação 3.2). Desta forma a equação do balanço detalhado resulta em:

$$\frac{P(\mu \rightarrow \nu)}{P(\nu \rightarrow \mu)} = e^{-\beta(E_\nu - E_\mu)} \quad (2.14)$$

Note que 2.13 garante as condições ergódicas e a distribuição de Boltzmann no equilíbrio.

2.1.1 Algoritmo de Metropolis

Desenvolvido por Nicolas Metropolis *et al* em 1953, o algoritmo de Metropolis [3] foi introduzido inicialmente em um artigo sobre simulações de uma esfera rígida de gases. O referido algoritmo é um dos mais famosos em simulações de MC por fornecer uma amostragem satisfatória de determinadas grandezas físicas em muitos dos modelos teóricos e também por ser de fácil implementação nas simulações.

O algoritmo de Metropolis possibilita gerar configurações de acordo com a distribuição de Boltzmann [2] de modo que para gerar um novo estado ν partimos de um estado anterior μ , e, através de um processo markoviano e que obedeça a condição do balanço detalhado, são geradas configurações subsequentes com uma probabilidade de transição entre os estados μ e ν . Esta probabilidade de transição depende da diferença entre energias dos respectivos estados. Se o novo estado do sistema tiver menor energia, ou seja, tiver uma variação de energia $\Delta E = E_\nu - E_\mu$ negativa, aceita-se a nova configuração com probabilidade igual a 1, caso contrário, esta nova configuração

é aceita com com uma probabilidade proporcional a $e^{-\beta\Delta E}$.

Portanto a probabilidade de transição de um estado μ para um estado ν pode ser escrita da seguinte maneira:

$$P(\mu \rightarrow \nu) = \begin{cases} e^{-\beta\Delta E} & \text{se } E_\nu > E_\mu \\ 1 & \text{se } E_\nu \leq E_\mu \end{cases} \quad (2.15)$$

Um modelo para implementação deste algoritmo é descrito a seguir[5]:

- (1) Definimos um estado inicial para o sistema de spins;
- (2) Escolhemos um sítio i qualquer da rede;
- (3) Caso haja a inversão do spin, calcula-se a variação de energia ΔE ocorrida;
- (4) Geramos um número aleatório r distribuído no intervalo $[0, 1]$;
- (5) Se $r \leq e^{-\beta\Delta E}$, trocamos o sinal do spin i . Se não, mantemos a mesma configuração.

A cada N sítios escolhidos considera-se um passo de Monte Carlo. A cada passo são avaliadas as quantidades de interesse e após muitos passos toma-se uma média sobre esses valores. Neste trabalho utilizamos o algoritmo de Metropolis para o cálculo das magnetizações da rede, os valores médios da energia, o calor específico, os cumulantes da energia e do parâmetro de ordem.

2.1.2 O Método do Histograma

O *Método do histograma* é uma técnica que permite fazer uma simulação de Monte Carlo a uma dada temperatura e extrapolar os resultados para temperaturas próximas à temperatura simulada. Este método é baseado nas ideias de Valleau e Card [6] que foram publicadas em 1972 e foi aplicada aos fenômenos críticos por Dickman e Shieve [7] e também por Ferrenberg e Swendsen [8].

Considere uma Simulação de Monte Carlo cujas configurações são geradas de acordo com a distribuição:

$$P_{\beta_0}(m) = \frac{1}{Z(\beta_0)} e^{-\beta_0 H(m)} \quad (2.16)$$

a qual representa a probabilidade de obter a configuração m à temperatura β_0 . Escrevendo a expressão acima em termos da energia temos:

$$P_{\beta_0}(E) = \frac{1}{Z(\beta_0)} W(E) e^{-\beta_0 E} \quad (2.17)$$

onde $W(E)$ é a densidade de estados com energia m :

$$W(E) = \sum_m \delta_{E, H(m)} \quad (2.18)$$

$W(E)$ depende apenas da estrutura do espaço de fases, ou seja, independe da temperatura. O valor médio de uma grandeza Q é dado pela expressão (2.10), que neste caso torna-se:

$$\langle Q \rangle_{\beta_0} = \frac{1}{Z(\beta_0)} \sum_E Q W(E) e^{-\beta_0 E} \quad (2.19)$$

Suponha que $H(E)$ seja o espectro (histograma) de energia, obtido através de um número finito de medidas N_{MCS} . $H(E)$ é, portanto, o número de vezes que os estados de energia E aparecem durante a simulação. A razão $H(E)/N_{MCS}$ fornece uma estimativa da distribuição expressa por (2.16). Logo:

$$\frac{H(E)}{N_{MCS}} \approx P_{\beta_0}(E) = \frac{1}{Z(\beta_0)} W(E) e^{-\beta_0 E} \quad (2.20)$$

temos portanto

$$W(E) \approx \frac{H(E)}{N_{MCS}} Z(\beta_0) e^{\beta_0 E} \quad (2.21)$$

Quando $N_{MCS} \rightarrow \infty$ a relação acima torna-se uma igualdade.

Uma distribuição de energias para uma dada temperatura ligeiramente diferente β é escrita como:

$$P_{\beta}(E) = \frac{1}{Z(\beta)} W(E) e^{-\beta E} \quad (2.22)$$

Substituindo a expressão para $W(E)$ na equação acima temos:

$$P_{\beta}(E) \approx \frac{Z(\beta_0)}{Z(\beta)} \frac{H(E)}{N_{MCS}} e^{-(\beta - \beta_0)E} \quad (2.23)$$

Sendo

$$Z(\beta) = \sum_E W(E) e^{-\beta E} \quad (2.24)$$

Substituindo a expressão para $W(E)$ na equação acima resulta:

$$Z(\beta) \approx \sum_E \frac{H(E)}{N_{MCS}} Z(\beta_0) e^{-(\beta-\beta_0)E} \quad (2.25)$$

e

$$Z(\beta) = \frac{Z(\beta_0)}{N_{MCS}} \sum_E H(E) e^{-(\beta-\beta_0)E} \quad (2.26)$$

Então substituindo a expressão acima em (2.21) resulta em:

$$P_\beta(E) \approx \frac{H(E) e^{[-\Delta\beta E]}}{\sum_E H(E) e^{[-\Delta\beta E]}} \quad (2.27)$$

onde $\Delta\beta = \beta - \beta_0$.

A equação (2.26) é a equação fundamental da técnica do histograma a qual permite realizar medidas de um dado observável Q , feitas durante uma simulação de Monte Carlo a uma temperatura β_0 , e extrair dessas medidas uma estimativa do valor esperado de Q a uma temperatura diferente β , no entanto uma das limitações desta técnica é que o intervalo $\Delta\beta$ não deve ser muito grande.

Capítulo 3

Transições de Fase e Teoria de Escala de Tamanho Finito

Introdução

Transições de fase são comuns em vários tipos de sistemas macroscópicos como por exemplo, em ligas metálicas, materiais magnéticos, fluidos, entre outros. Elas são observadas desde o final do século XIX, muito embora somente depois de 1970 houve um refinamento de sua teoria. Os fenômenos críticos são um objeto interessante de estudo devido a singularidades que alguns sistemas exibem durante as transições de fase. Podemos citar por exemplo um material ferromagnético que perde a sua magnetização ao atingir a temperatura de Curie, ou a opalescência crítica, onde ocorre grandes flutuações no índice de refração de misturas fluidas binárias, como o hexanol e o metano.

3.1 Transição de Fase e Fenômenos Críticos

Segundo Ehrenfest as transições de fase são classificadas de acordo com a descontinuidade na derivada de menor ordem da energia livre. Deste modo, se a descontinuidade for na primeira derivada temos uma transição de primeira ordem. Caso a descontinuidade seja na segunda derivada temos uma transição de segunda ordem. Uma classificação mais moderna separa as transições

em contínuas, que correspondem às transições de segunda ordem quando o calor latente e a variação do parâmetro de ordem se anulam, e em descontínuas, que corresponde às transições de primeira ordem que apresentam calor latente não nulo e variação descontínua no parâmetro de ordem.

Um sistema cuja análise é interessante é um ferromagneto uniaxial simples, que é um sistema simétrico. Definimos as magnetizações de um ferromagneto como ferro-1 (“spins ordenados para cima”) e ferro-2 (“spins ordenados para baixo”). No diagrama de fases temos o campo externo aplicado H versus a temperatura T .

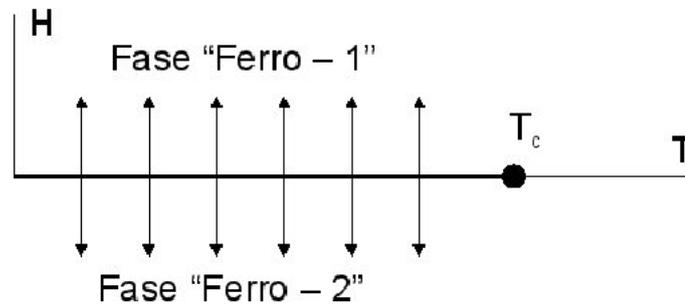


Figura 3.1: Diagrama de fases para um ferromagneto uniaxial simples $H \times T$. A linha de coexistência entre as fases ferro-1 e ferro-2 é dada por $H = 0$ e em $T < T_c$

A campo externo nulo ($H = 0$), temos uma temperatura crítica T_c acima da qual não há magnetização ($M = 0$) portanto uma fase mais simétrica e abaixo de T_c temos uma linha de coexistência entre as fases ferro-1 e ferro-2, ou seja, abaixo de T_c há uma quebra de simetria no sistema, o que caracteriza uma transição de segunda ordem. Ao longo da curva de coexistência ($H = 0, T < T_c$) as fases ordenadas ferro-1 e ferro-2 possuem a mesma energia livre, as suas magnetizações espontâneas são iguais em módulo, acima de T_c o ferromagneto perde a sua magnetização espontânea.

Note que a magnetização M está associada à quebra espontânea de simetria do sistema. Grandezas físicas desse tipo são chamadas de *parâmetro de ordem*[9]. O conceito de parâmetro de ordem foi introduzido por Landau: parâmetros de ordem são grandezas que estão associadas à simetria do sistema, no caso de um ferromagneto o parâmetro de ordem é a magnetização do

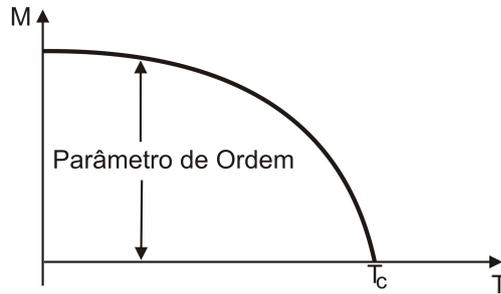


Figura 3.2: Magnetização espontânea versus temperatura para um ferromagneto uniaxial simples.

sistema. Portanto podemos dizer que, para um ferromagneto uniaxial temos uma temperatura crítica acima da qual há uma fase simétrica e abaixo da mesma há uma quebra espontânea de simetria do sistema, pois o parâmetro de ordem é diferente de zero.

3.1.1 Expoentes Críticos

O estudo de fenômenos críticos concerne à compreensão do comportamento de grandezas termodinâmicas nas proximidades do ponto crítico. Grandezas relevantes são os ditos expoentes críticos, os quais são definidos como: $\alpha, \beta, \gamma, \delta, \eta$ e ν . Os expoentes críticos descrevem o comportamento de uma função geral $f(t)$:

$$t \equiv \frac{T - T_c}{T_c} \quad (3.1)$$

onde t é uma variável adimensional que nos fornece a “distância” em relação ao ponto crítico.

Uma característica importante é que os valores dos expoentes críticos de um modelo são independentes de alguns parâmetros tais como a energia de interação J entre os primeiros vizinhos no modelo de Ising por exemplo. Somente propriedades relativamente “fortes”, como a dimensionalidade da rede, ou o número de dimensões do parâmetro de ordem afetam os expoentes críticos.

O conjunto de expoentes críticos nos leva a uma classe de universalidade.

Todos os modelos que pertencem a uma mesma classe de universalidade possuem os mesmos expoentes críticos.

Nas proximidades do ponto crítico determinadas grandezas termodinâmicas possuem um comportamento singular, de modo que essas grandezas são muito bem descritas por leis de potência. Por exemplo, para descrever um ferromagneto, na ausência de um campo externo H , consideramos que a magnetização espontânea se anule da seguinte forma

$$M \sim (-t)^\beta, \quad (3.2)$$

que a susceptibilidade magnética, a campo nulo, possua comportamento divergente de acordo com

$$\chi \sim t^{-\gamma} \quad (3.3)$$

e que ao longo da isoterma crítica, a magnetização m e o campo externo H estejam relacionados do seguinte modo:

$$m \sim H^{1/\delta}, t = 0 \quad (3.4)$$

Observa-se experimentalmente que o calor específico C exibe o seguinte comportamento:

$$C \sim |t|^{-\alpha} \quad (3.5)$$

O comprimento de correlação de um sistema magnético diverge com:

$$\xi \sim |t|^{-\nu} \quad (3.6)$$

Sistemas físicos diferentes, mas que possuem os mesmos expoentes críticos pertencem à mesma classe de universalidade, por exemplo o modelo aqui estudado, chamado de Baxter-Wu, pertence à mesma classe de universalidade do modelo de Potts 4-estados [11]. Outro ponto importante para os expoentes críticos reside no fato de que esses expoentes estão relacionados entre si obedecendo a relações de superescala:

$$\alpha + 2\beta + \gamma = 2 \quad \text{Relação de Rushbrooke} \quad (3.7)$$

$$\alpha + \beta(\delta + 1) = 2 \quad \text{Relação de Griffiths} \quad (3.8)$$

$$\gamma = \beta(\delta - 1) \quad \text{Relação de Widom} \quad (3.9)$$

$$d\nu = 2 - \alpha \quad \text{Relação de Josephson} \quad (3.10)$$

3.2 Teoria de Escala de Tamanho Finito

A Teoria de Escala de Tamanho Finito (*Finite Size Scaling Theory*) é um método que nos permite calcular grandezas termodinâmicas no limite termodinâmico a partir do estudo de sistemas com tamanho finito.

Vimos que o comprimento de correlação escala com a temperatura de acordo com a expressão (3.6):

$$\xi \sim |t|^{-\nu}$$

e que a susceptibilidade se comporta conforme a equação (3.3):

$$\chi \sim t^{-\gamma}$$

Podemos escrever uma relação entre o comprimento de correlação e a susceptibilidade eliminado t nas expressões acima:

$$\chi \sim \xi^{\gamma/\nu} \quad (3.11)$$

Analogamente, para o calor específico e para a magnetização:

$$c \sim \xi^{\alpha/\nu} \quad (3.12)$$

$$m \sim \xi^{-\beta/\nu} \quad (3.13)$$

Nas simulações trabalhamos na verdade com sistemas finitos, e o comprimento de correlação ξ é limitado pelo tamanho L do sistema. Para um

determinado L , associamos uma temperatura pseudocrítica T_c^L , onde

$$\xi(T_c^L) \sim L \quad (3.14)$$

Assim, relacionando a equação acima com as equações (3.11)-(3.13) resulta:

$$\chi \sim L^{\gamma/\nu} \quad (3.15)$$

$$c \sim L^{\alpha/\nu} \quad (3.16)$$

$$m \sim L^{-\beta/\nu} \quad (3.17)$$

Podemos definir uma função em que haja termos referentes a ξ e χ e que contenha a dependência em L :

$$\chi = \xi^{\gamma/\nu} \chi_0(L/\xi) \quad (3.18)$$

o termo χ_0 é uma função adimensional com uma única variável que possui as seguintes propriedades

$$\chi_0 = \text{constante} \quad \text{quando } x \gg 1 \quad (3.19)$$

e

$$\chi_0 \sim x^{\gamma/\nu} \quad \text{quando } x \rightarrow 0 \quad (3.20)$$

onde

$$x = L/\xi. \quad (3.21)$$

Vamos reorganizar a equação (3.18) de modo que se tenha de forma explícita uma dependência em L . Definimos uma outra variável, também adimensional

$$\tilde{\chi}(x) = x^{-\gamma/\nu} \chi_0(x^\nu) \quad (3.22)$$

isolando o termo $\chi_0(x^\nu)$ temos:

$$\chi_0(x^\nu) = \tilde{\chi}(x)x^{\gamma/\nu} \quad (3.23)$$

Substituindo a equação acima na expressão para a susceptibilidade resulta:

$$\chi = \xi^{\gamma/\nu} \tilde{\chi}(x)x^{\gamma/\nu} \quad (3.24)$$

mas, $x = L/\xi$, ou seja, $\xi^{\gamma/\nu} \cdot x^{\gamma/\nu} = L^{\gamma/\nu}$

Portanto temos uma expressão que representa a dependência da susceptibilidade magnética com o tamanho L da rede:

$$\chi = L^{\gamma/\nu} \tilde{\chi}(x) \quad (3.25)$$

usando a equação (3.6) temos finalmente:

$$\chi_L(t) = L^{\gamma/\nu} \tilde{\chi}(L^{1/\nu}t) \quad (3.26)$$

A equação acima representa o comportamento da susceptibilidade magnética em sistemas com tamanho finito, onde

$$x = L^{1/\nu}t \quad (3.27)$$

No entanto há o termo $\tilde{\chi}(x)$ que não é totalmente descrito. $\tilde{\chi}(x)$ é conhecida como função de escala da susceptibilidade magnética. A função de escala nos diz que

$$\tilde{\chi}(x) \rightarrow x^{-\gamma}(x^\nu)^{\gamma/\nu} = \text{constante} \quad \text{quando } x \rightarrow 0 \quad (3.28)$$

ou seja, com $L/\xi \rightarrow 0$. Portanto $\tilde{\chi}$ é finito nas proximidades do ponto crítico. Outro fato importante é que toda a dependência em L de χ é exibida explicitamente na equação (3.24) pois a função de escala não contém qualquer dependência em L , isto resulta que $\tilde{\chi}(x)$ terá sempre o mesmo valor independente do tamanho do sistema.

De modo análogo, podemos estender a equação que representa a susceptibilidade magnética em sistemas de tamanho finito para as quantidades magnetização e calor específico, obtendo respectivamente:

$$m_L(t) = L^{-\beta/\nu} \tilde{m}(tL^{1/\nu}) \quad (3.29)$$

$$c_L(t) = L^{\alpha/\nu} \tilde{c}(tL^{1/\nu}) \quad (3.30)$$

Comparando as equações (3.6) e (3.14), vemos que a medida que $L \rightarrow \infty$ a temperatura pseudocrítica da rede finita obedece à seguinte lei de escala:

$$T_c^L = T_c + aL^{-1/\nu} \quad (3.31)$$

Assim, conhecendo o valor do expoente crítico ν , podemos determinar a temperatura crítica do sistema infinito através de um gráfico de T_c^L como função de $L^{-1/\nu}$. A intersecção desse gráfico com o eixo das temperaturas fornece T_c . Geralmente o expoente crítico ν não é conhecido, portanto precisamos de uma maneira de avaliá-lo. Nas simulações podemos calcular grandezas como o calor específico ou a susceptibilidade. Através de um gráfico, em escala logarítmica, dos picos dessas quantidades pode-se avaliar os expoentes críticos.

Outra grandeza importante é o cumulante de quarta ordem [2, 10, 17] que é dado por:

$$Q_4 = \langle x^4 \rangle - 3 \langle x^2 \rangle^2 - 4 \langle x \rangle \langle x^2 \rangle + 12 \langle x \rangle^2 \langle x^2 \rangle - 6 \langle x^4 \rangle \quad (3.32)$$

muito embora em casos em que há simetria do parâmetro de ordem Q_4 é reduzido a:

$$U_4 = 1 - \frac{\langle x^4 \rangle}{3 \langle x^2 \rangle^2} \quad (3.33)$$

Quando $L \gg \xi$ ($L \rightarrow \infty$) temos que $U_4 \rightarrow 0$ para $T > T_c$ e $U_4 \rightarrow 2/3$ para $T < T_c$.

O que torna o cumulante de quarta ordem interessante para o estudo de fenômenos críticos em sistemas de tamanho finito é o fato de que sua dependência com a temperatura e com o tamanho do sistema é restrita à variável de escala $\tilde{U}(x)$.

$$U_L(T) = \tilde{U}(x) \quad (3.34)$$

Podemos calcular o expoente crítico ν tomando a derivada de U_L em relação

a T :

$$\frac{\partial U_L}{\partial T} = L^{1/\nu} \frac{\partial \tilde{U}}{\partial x} \quad (3.35)$$

Um método eficaz para se determinar a localização da temperatura crítica é o método da **Intersecção do Cumulante de Binder**[2, 12], que foi utilizado em nosso trabalho objetivando encontrar o ponto pentacrítico que será descrito no próximo capítulo. O método consiste em tomar vários gráficos de U_L contra T para diversos tamanhos de redes (L variando) onde a intersecção dos cumulantes em um ponto em comum forneceria uma estimativa (ou o valor exato) da localização do ponto multicrítico.

Capítulo 4

O Modelo de Baxter-Wu

4.1 O Modelo de Ising

O modelo de Ising foi proposto em 1920 por Wilhelm Lenz a seu aluno de doutorado Ernest Ising [13], e teve por objetivo descrever o ferromagnetismo de momentos localizados. O modelo inicial consiste em um ferromagneto simples onde cada um dos dipolos ou “spins” s_i está localizado no sítio i da rede e cada spin pode assumir os valores $+1$ ou -1 , onde $+1$ significa “spin para cima” e -1 significa “spin para baixo”. Em uma rede com N sítios, o sistema pode ter 2^N estados. A energia de um determinado estado é dada pela seguinte equação:

$$H_I = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j \quad (4.1)$$

onde J é a energia de interação entre os pares de primeiros vizinhos $\langle i, j \rangle$ e a soma também é feita sobre os pares de primeiros vizinhos. Para $J > 0$ temos o favorecimento do alinhamento paralelo dos spins (fase ferromagnética) e para $J < 0$ favorece-se o alinhamento antiparalelo dos spins (fase antiferromagnética).

Este modelo em uma rede quadrada possui solução exata e fornece uma temperatura crítica para a transição entre as fases ferromagnética e paramagnética com $kT_c = 2/\ln(\sqrt{2} + 1) = 2.269185\dots$

Em 1960 Blume e Capel propuseram uma extensão do modelo de Ising para estudar transições de fase de primeira ordem em casos de spin-1, cujas variáveis de spin assumem os valores $-1, 0$ ou $+1$. Suas variáveis são do tipo de Ising e seu Hamiltoniano é dado por:

$$H_{BC} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j + D \sum s_i^2 \quad (4.2)$$

onde D é o campo cristalino e a segunda soma é feita sobre todos os sítios da rede.

Temos, com temperatura nula, para $D/J > 2$ uma fase ordenada com as configurações $s_i = \pm 1$. Para $D > 2J$, favorece-se o estado com magnetização nula. Exatamente em $D/J = 2$ temos um ponto triplo com a coexistência das três fases ($s_i = \pm 1, 0$).

4.2 O Modelo de Baxter-Wu

O modelo de Baxter-Wu foi proposto inicialmente por Wood e Griffiths [14] em 1972. Em vez de considerar interações duplas entre os spins (interações apenas entre os primeiros vizinhos: $-Js_i s_j$) assim como no modelo de Ising, considera-se termos de acoplamentos triplos ($-Js_i s_j s_k$). O modelo inicial consistiu em um sistema magnético definido em uma rede triangular onde, para o caso Spin-1/2, as variáveis de spin assumem os valores ± 1 e estão localizados sobre os vértices da rede [12], cuja energia de interação é dada por:

$$H_{BW} = -J \sum_{\langle i,j,k \rangle} s_i s_j s_k \quad (4.3)$$

onde J é o termo de acoplamento e a soma é feita sobre todos os primeiros vizinhos formados pelos triângulos da rede.

Um dos motivos que levou à construção do modelo BW foi a elaboração de um modelo magnético onde não houvesse simetria de inversão dos spins e que exibisse uma transição do tipo ordem-desordem. A solução exata da temperatura crítica de transição do modelo BW para o caso de spin-1/2 foi

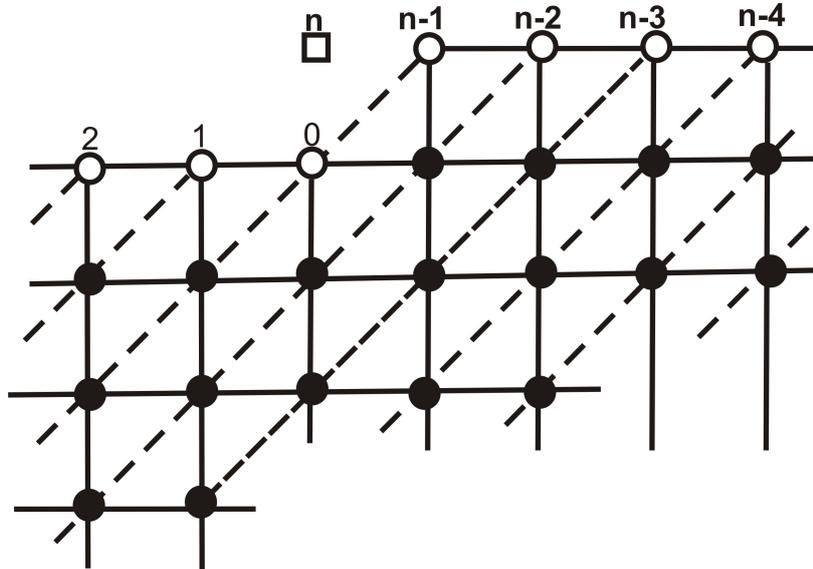


Figura 4.1: Rede triangular inicial proposta por Wood e Griffiths [22]

obtida por Wood e Griffiths em 1972 e apresentou resultados interessantes: o valor da temperatura crítica para a transição de fase contínua apresentou o mesmo valor de T_c do modelo de Ising na rede quadrada, porém sem a mesma classe de universalidade. Baxter e Wu encontraram, para os expoentes críticos α , β e ν os seguintes valores: $\alpha = \nu = 3/2$ e $\beta = 1/2$, que são os mesmos valores dos expoentes críticos α , β e ν do modelo de Potts 4-estados [11]. Portanto o modelo BW pertence a mesma classe de universalidade do Potts 4-estados.

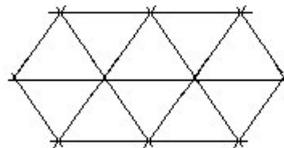


Figura 4.2: Rede triangular do modelo de Baxter-Wu.

O estado fundamental do modelo de Baxter-Wu é quatro vezes degenerado: um deles é o estado ferromagnético, onde todos os sítios da rede são preenchidos com spins positivos $s = +1$. As outras três configurações são tais que dois terços dos spins são negativos sendo que em cada triângulo deve

haver a presença de um vértice positivo (estado ferrimagnético).

Neste modelo, uma escolha apropriada para o parâmetro de ordem é a magnetização por subredes, onde

$$m = \sqrt{\frac{m_A^2 + m_B^2 + m_C^2}{3}}, \quad (4.4)$$

e m_A^2 , m_B^2 e m_C^2 são as magnetizações das subredes. Quando $T = 0$, a magnetização total assume o valor $1/3$. Outra possibilidade é a escolha da média dos valores absolutos das magnetizações.

4.2.1 Modelo de Baxter-Wu spin-1

No caso do Modelo de Baxter-Wu Spin-1 (BW Spin-1), as variáveis de spin podem assumir os valores -1 , 1 ou 0 e, da mesma forma que o BW original, estão situadas sobre os vértices da rede cristalina triangular. A Hamiltoniana do modelo é escrita da seguinte forma:

$$H = -J \sum_{\langle i,j,k \rangle} s_i s_j s_k + D \sum_i s_i^2 \quad (4.5)$$

onde a segunda soma é feita sobre todos os N sítios da rede. O BW Spin-1 assume a forma parecida com o conhecido modelo de Blume-Capel [15], onde temos na Hamiltoniana a inserção do termo de interação cristalina D como uma extensão do modelo de Ising Spin-1.

A rede triangular do modelo BW é formada por três subredes onde a subrede 1 é representada por \blacksquare , a subrede 2 é representada por \blacktriangle , e a terceira subrede é representada por \bullet e a rede formada por spins zero é representada por 0 .

No BW Spin-1, com $T = 0$ temos, para $D < 2J$ uma fase ordenada com as configurações ($s_i = \pm 1$), para $D > 2J$ há somente uma fase com magnetização nula e exatamente em $D/J = 2$ temos um ponto quártuplo com a coexistência das cinco fases ($s_i = \pm 1, 0$).

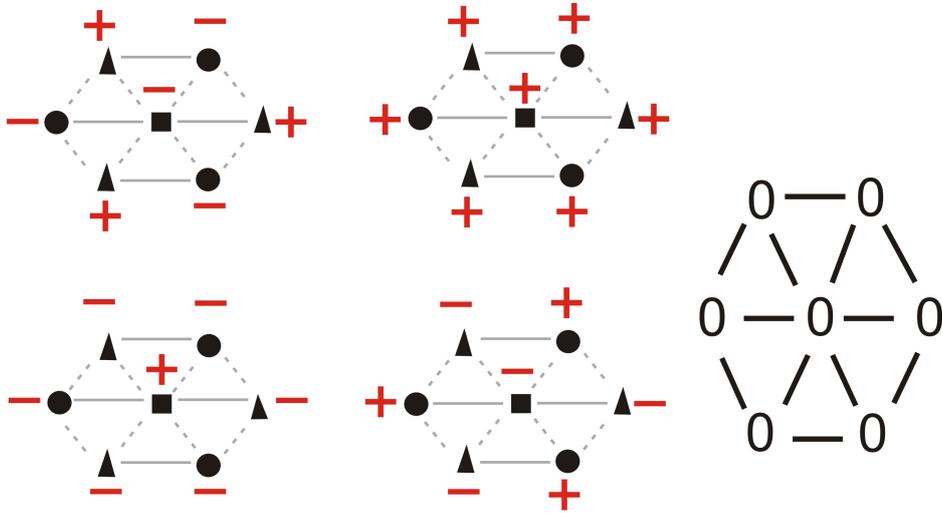


Figura 4.3: Rede triangular do modelo de Baxter-Wu formada por três subredes e a rede com spin $s_i = 0$.

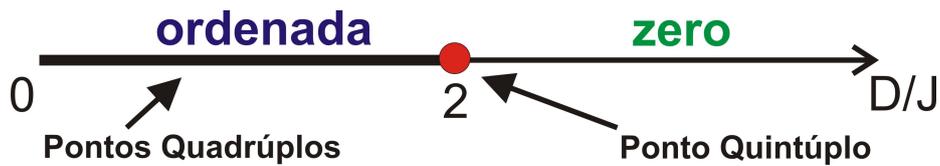


Figura 4.4: Transição de fase com $T = 0$

Para outros valores da razão D/J há divergência entre os resultados obtidos. Em 1981 Kinzel *et al*, encontraram um ponto de segunda ordem que se unia com o ponto $D/J = 2$ e $T = 0$ através de uma linha de primeira ordem [14].

No entanto em 2004 Costa *et al* [16] encontraram um ponto de segunda ordem que seguia uma linha também de segunda ordem e se encontrava com uma linha de primeira ordem até o ponto $D/J = 2$ e $T = 0$. Na linha de primeira ordem há quatro fases idênticas e, no ponto onde ocorre o encontro entre as linhas de segunda e primeira ordem há a transição entre as fases ferromagnética e paramagnética. O referido ponto é um ponto pentacrítico.

O problema apresentado no BW Spin-1, e que motivou este trabalho, é o fato do referido modelo apresentar uma multicriticalidade, onde temos a coexistência de cinco fases e um possível ponto pentacrítico, o qual não possui

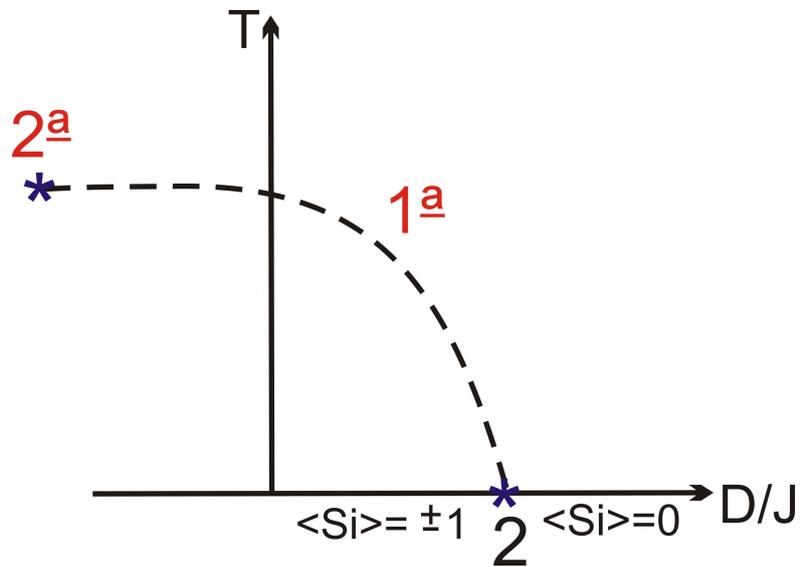
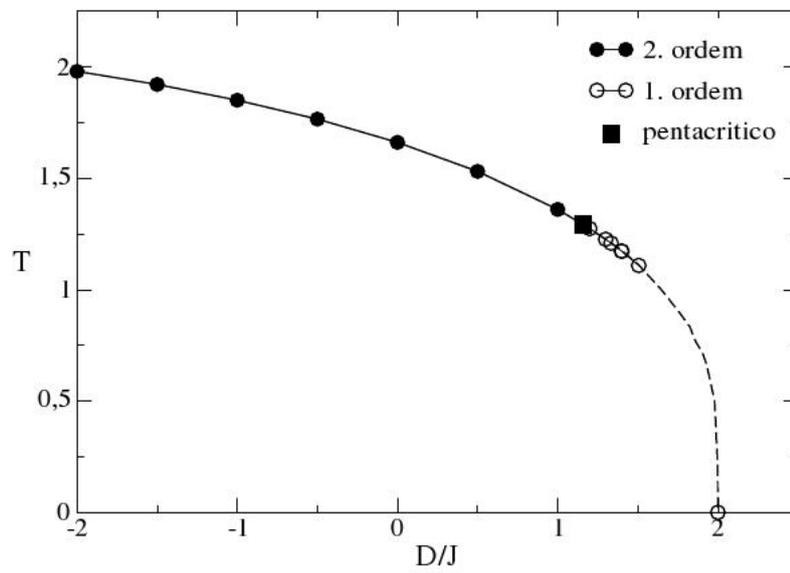


Figura 4.5: Transição de fase em uma rede BW a $T \neq 0$, de acordo com a referência [14]

uma localização muito bem definida. Assim o objetivo central neste trabalho é a localização mais precisa do ponto pentacrítico. Para isto realizamos simulações de Monte Carlo, utilizando o algoritmo de Metropolis e *Finite Size Scaling Theory* (Teoria de Escala de Tamanho Finito).

Figura 4.6: Transição de fase em uma rede BW a $T \neq 0$ [12]

Capítulo 5

Resultados e Discussões

Introdução

Realizamos simulações de Monte Carlo para analisar o comportamento do valor médio do parâmetro de ordem como função da temperatura e do cumulante reduzido do parâmetro de ordem como função da temperatura a fim de fazer uma análise quantitativa e constatar se, dentre os tamanhos de rede e temperaturas simuladas ($L=12$ e $L=18$ e $T=1,000$ a $T=1,500$), há a ocorrência de transição de fases.

Posteriormente realizamos simulações caracterizando sistemas com o campo cristalino $D = 1,22$ e temperaturas variando de $T = 1,2050$ a $T = 1,3050$ usando $\Delta T = 0,005$ e também com $D = 1,60$ e $T = 0,950$ a $T = 1,095$ usando $\Delta T = 0,005$. Analisamos o comportamento do calor específico, o valor médio da energia, e do cumulante reduzido do parâmetro de ordem, para os tamanhos de rede ($L = 12, 15, 18, 36$), cujos resultados serão apresentados a seguir.

Finalmente fizemos simulações com a temperatura como função do campo cristalino $T(D)$ pela linha de primeira ordem a fim de encontrar o ponto onde ocorre a transição entre as linhas de primeira ordem e de segunda ordem, ou seja o ponto pentacrítico, de modo a analisarmos o comportamento do cumulante reduzido do parâmetro de ordem versus $T(D)$.

5.1 Caracterização da redes $L = 12$ e $L = 18$

5.1.1 Valor médio da magnetização versus campo cristalino

Com o objetivo de fazer uma análise quantitativa acerca de quais faixas de temperatura analisar fizemos simulações de MC com as temperaturas $T = 1,000$, $T = 1,100$, $T = 1,200$, $T = 1,300$, $T = 1,400$ e $T = 1,500$ com o campo cristalino variando de $D = 0,5$ a $D = 2,0$ com intervalos iguais a $0,1$ para os tamanhos de rede $L12$ e $L18$.

Para $L = 12$ o comportamento do valor médio da magnetização com o campo cristalino apresentou uma descontinuidade em seu comportamento, condizente com uma transição de fases de primeira ordem para $T = 1,000$. Com o aumento da temperatura há a suavização da descontinuidade de modo que para $T = 1,400$ e $T = 1,500$ a curva do gráfico apresenta-se contínua.

Portanto podemos inferir, observando a figura 5.1, que entre as temperaturas simuladas há uma mudança no caráter da transição de fases.

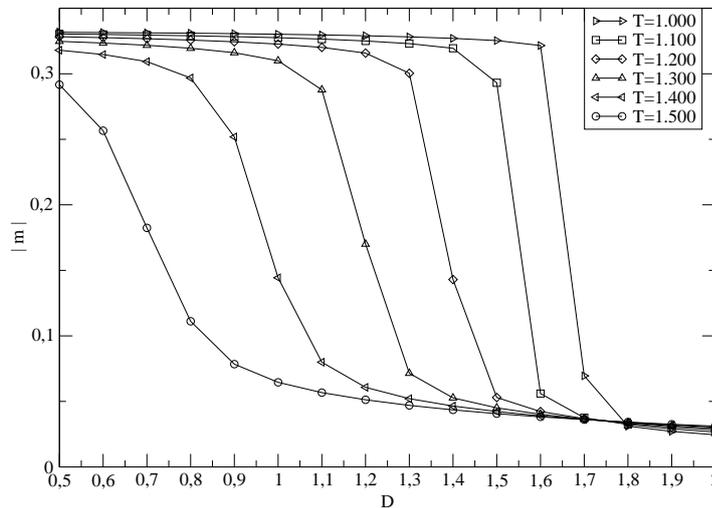


Figura 5.1: Valor médio do parâmetro de ordem versus campo cristalino para $L = 12$ e $T = 1,000$ a $T = 1,500$.

Com o tamanho de rede $L = 18$, o comportamento do valor médio da magnetização com o campo cristalino apresentou as mesmas características que $L = 12$, de modo que entre as temperaturas simuladas, também podemos perceber uma mudança na característica das transição de fases, conforme mostra a figura 5.2.

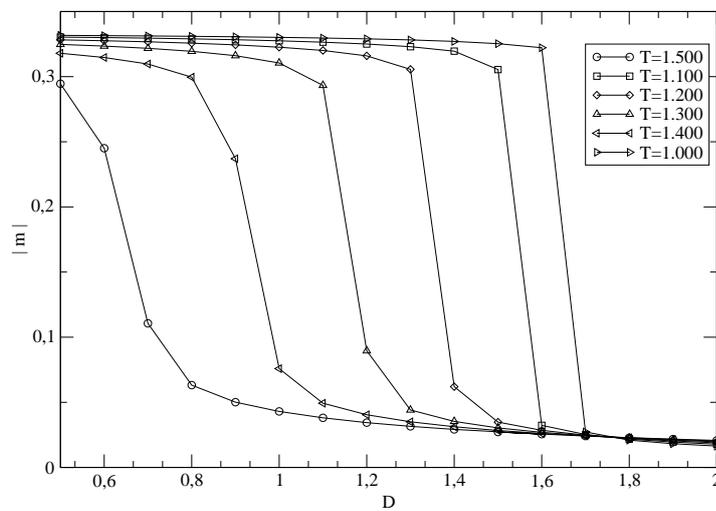


Figura 5.2: Valor médio do parâmetro de ordem versus campo cristalino para $L = 18$ e $T = 1,000$ a $T = 1,500$.

5.1.2 Cumulante reduzido do parâmetro de ordem versus campo cristalino

O comportamento do cumulante reduzido do parâmetro de ordem mostrou-se satisfatório no que refere-se a transição de fases entre as temperaturas simuladas. A figura 5.3 apresenta os diversos gráficos do cumulante reduzido do parâmetro de ordem contra o campo cristalino para diversos valores de temperaturas.

O gráfico apresenta discontinuidades para as temperaturas entre $T = 1,000$ e $T = 1,400$, no entanto, a curva para $T = 1,500$ apresenta-se de modo praticamente contínua.

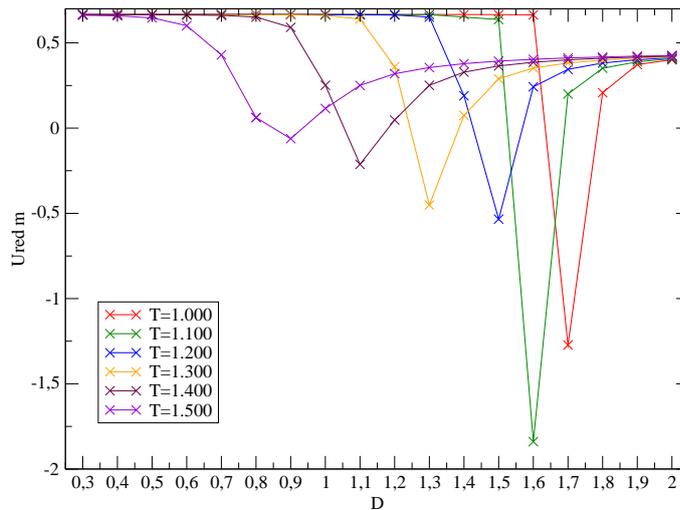


Figura 5.3: Cumulante reduzido do parâmetro de ordem versus campo cristalino para $L = 12$ e $T = 1,000$ a $T = 1,500$.

5.1.2 Cumulante reduzido do parâmetro de ordem versus campo cristalino 41

De modo semelhante a rede de tamanho 12, os gráficos do cumulante reduzido do parâmetro de ordem contra D para vários valores de temperatura também apresentaram descontinuidades para $T = 1,000$ e $T = 1,400$, e para $T = 1,500$ a curva do gráfico apresenta-se de modo contínua.

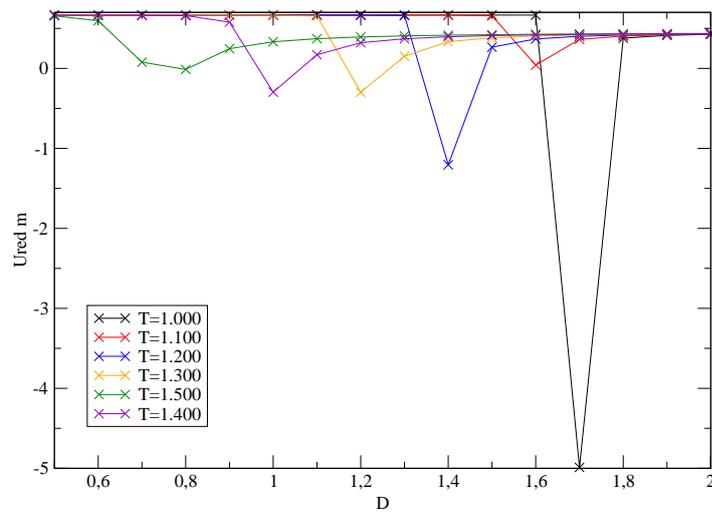


Figura 5.4: Cumulante reduzido do parâmetro de ordem versus campo cristalino para $L = 18$ e $T = 1,000$ a $T = 1,500$.

5.1.3 Caracterização de sistemas com $D = 1,22$

Foram realizadas simulações para os tamanhos de rede $L = 12, 15, 18, 36$, para temperaturas variando de $T = 1,2050$ a $T = 1,3050$ usando um intervalo $\Delta T = 0,005$ e com o campo cristalino $D = 1,22$.

Analizamos os resultados referentes ao comportamento do calor específico, ao valor médio da energia, ao valor médio do parâmetro de ordem e ao cumulante de quarta ordem do parâmetro de ordem, cujos resultados serão apresentados a seguir.

Calor Específico

No caso do calor específico o seu comportamento corresponde ao esperado no sentido que com o aumento das redes o “pico” apresentado é cada vez mais pronunciado. O valor médio de T_c pode ser obtido analisando os valores da temperatura em torno dos “picos” como pode ser observado na figura 5.5.

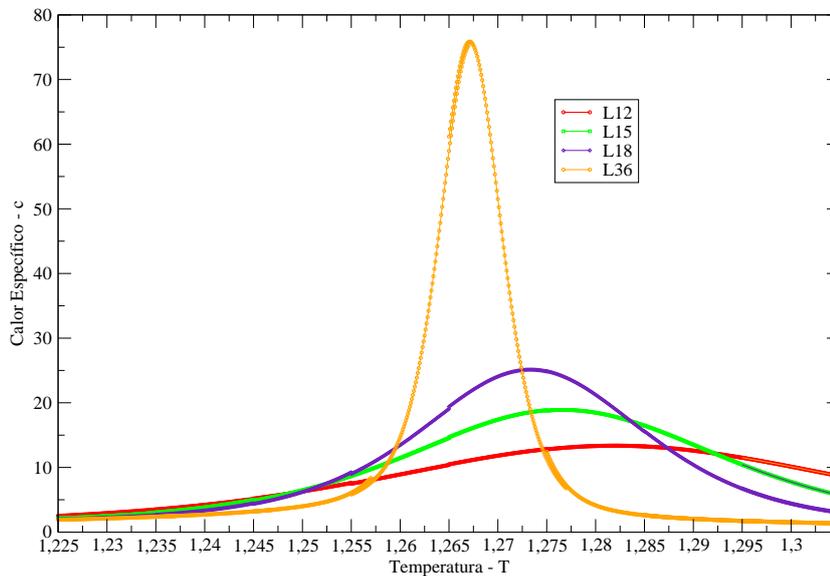


Figura 5.5: Comportamento do calor específico para os tamanhos de rede $L = 12, 15, 18, 36$ para $D = 1,22$ e T variando de $T = 1,2050$ a $T = 1,3050$.

Valor médio da energia

O valor médio da energia apresentou-se de forma interessante onde, para todos os tamanhos de rede todos os valores iniciam-se em um mesmo ponto e posteriormente há o aumento do valor médio da energia para todas as redes. Também verifica-se o aumento na inclinação das curvas com o aumento dos tamanhos das redes, o que é justificado pois o calor específico está relacionado com a derivada da energia livre.

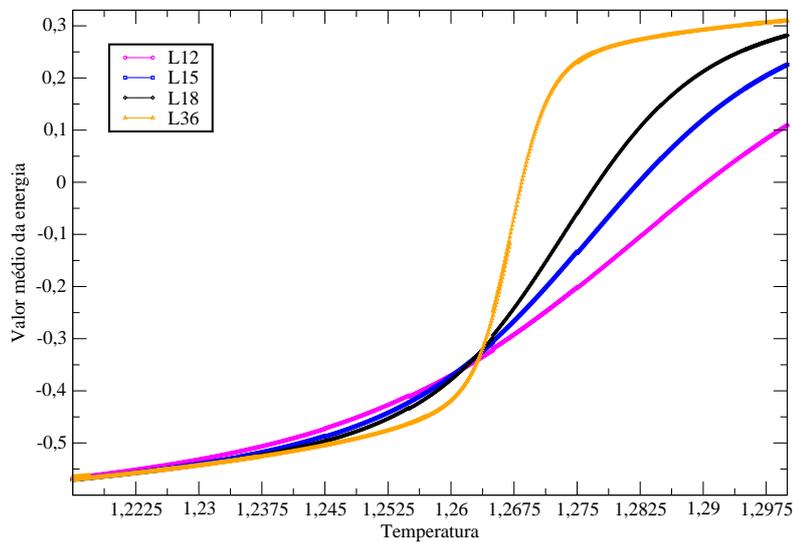


Figura 5.6: Valor médio da energia versus a temperatura para os tamanhos de rede $L = 12, 15, 18, 36$ para $D = 1,22$ e T variando de $T = 1,2050$ a $T = 1,3050$.

Valor médio do parâmetro de ordem

O valor médio do parâmetro de ordem contra a temperatura mostrou-se característico de sistemas magnéticos, de modo que, para todos os tamanhos de rede, iniciaram-se próximos a 0,31. Espera-se que com o aumento da temperatura os gráficos convirjam para zero.

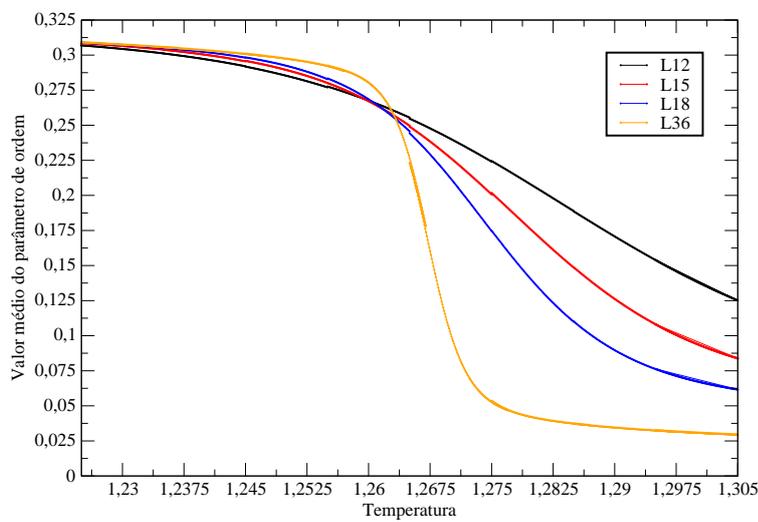


Figura 5.7: Valor médio do parâmetro de ordem versus temperatura para os tamanhos de rede $L = 12, 15, 18, 36$ para $D = 1,22$ e T variando de $T = 1,2050$ a $T = 1,3050$.

Cumulante Reduzido do Parâmetro de Ordem

O cumulante reduzido do parâmetro de ordem também se mostrou satisfatório para a obtenção de T_c com as simulações com os tamanhos de rede $L = 12, 15, 18, 36$.

A técnica utilizada para encontrar a temperatura de transição é a intersecção do cumulante de Binder mencionada no final do capítulo 3, onde a intersecção dos gráficos dos cumulantes para os diversos tamanhos de redes resulta em um ponto em comum, o qual fornece a temperatura de transição. Neste caso, a temperatura de transição encontrada está em torno de $T_c = 1,264(1)$.

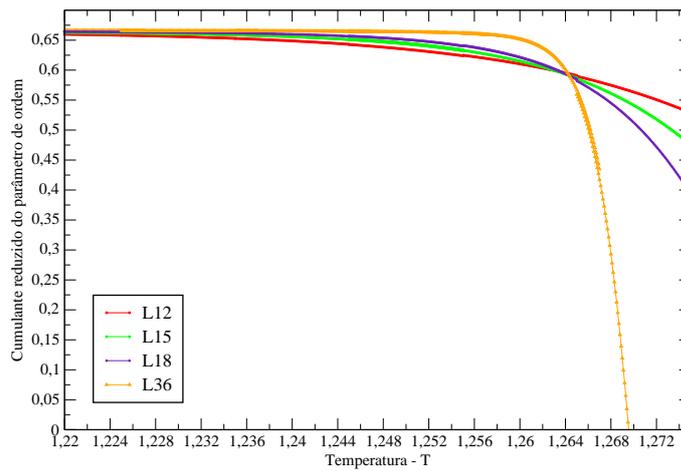


Figura 5.8: Cumulante reduzido do parâmetro de ordem para os tamanhos de rede $L = 12, 15, 18, 36$ para $D = 1,22$ e T variando de $T = 1,2050$ a $T = 1,3050$ com $T_c = 1,264(1)$.

A figura 5.9 apresenta um gráfico ampliado na região do cruzamentos do cumulantes reduzidos do parâmetro de ordem a fim de obter estimativa de T_c . A partir da referida figura podemos avaliar o valor de T_c como sendo $T_c = 1,2637(6)$.

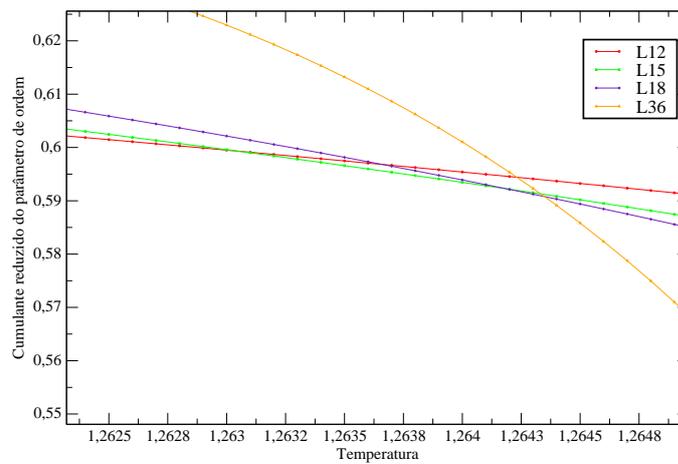


Figura 5.9: Aproximação do cruzamento dos cumulantes reduzidos do parâmetro de ordem para os tamanhos de rede $L = 12, 15, 18, 36$ com $T_c = 1,2637(6)$

5.1.4 Caracterização do modelo com $D = 1,60$

Realizamos simulações para os tamanhos de rede $L = 12, 15, 18, 36$, para temperaturas variando de $T = 0,950$ a $T = 1,095$ usando um intervalo $\Delta T = 0,005$ e com o campo cristalino $D = 1,60$. Analisamos os resultados obtidos para o calor específico, valor médio da energia bem como o valor médio do parâmetro de ordem, para o cumulante de quarta ordem do parâmetro de ordem, cujos resultados serão apresentados a seguir.

Calor Específico

Os resultados esperados para o calor específico mostraram-se satisfatórios no sentido em que os “picos” se mostraram, com o aumento dos tamanhos das redes, sempre mais pronunciados, de modo que, para cada L , podemos estimar um valor para a temperatura crítica.

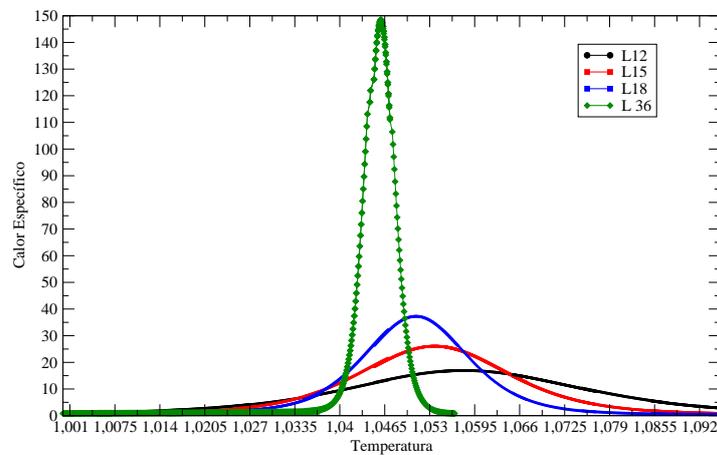


Figura 5.10: Comportamento do calor específico para os tamanhos de rede $L = 12, 15, 18, 36$ para $D = 1,60$ e T variando de $T = 0,950$ a $T = 1,095$.

Valor médio da energia

O valor médio da energia como função da temperatura apresentou-se semelhante ao caso anteriormente analisado. Para todos os tamanhos de rede os gráficos iniciaram-se em uma mesmo valor (próximo a $-0,3$) até uma variação abrupta em torno da região crítica.

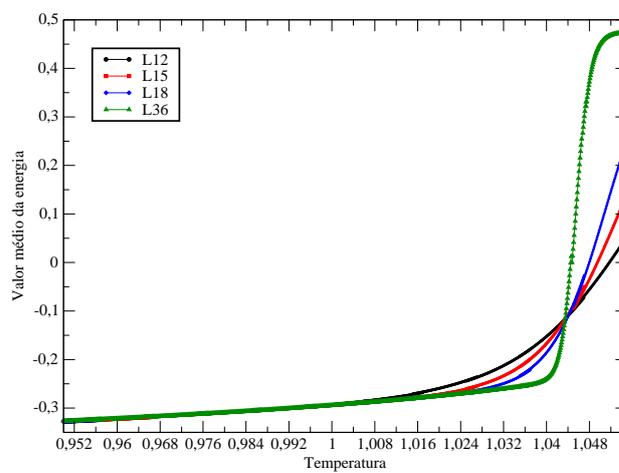


Figura 5.11: Valor médio da energia para os tamanhos de rede $L = 12, 15, 18, 36$ para $D = 1,60$ e T variando de $T = 0,950$ a $T = 1,0950$.

Valor médio do parâmetro de ordem

A figura 5.12 apresenta o valor médio do parâmetro de ordem, onde para todos os tamanhos de rede, os valores iniciaram-se próximos a 0,32, e com o aumento da temperatura espera-se também que tais valores se aproximem de zero.

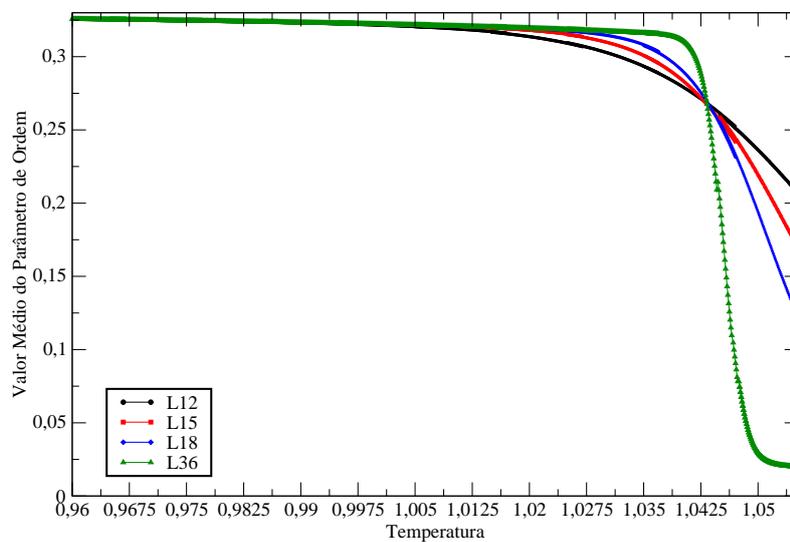


Figura 5.12: Valor médio do parâmetro de ordem para os tamanhos de rede $L = 12, 15, 18, 36$ para $D = 1,60$ e T variando de $T = 0,950$ a $T = 1,0950$.

Cumulante reduzido do parâmetro de ordem

O cumulante reduzido do parâmetro de ordem também se mostrou satisfatório para a obtenção de T_c com as simulações com os tamanhos de rede $L=12,15,18,36$. Utilizando a técnica da intersecção do cumulante de Binder encontramos a temperatura de transição em torno de $T_c = 1,044(1)$.

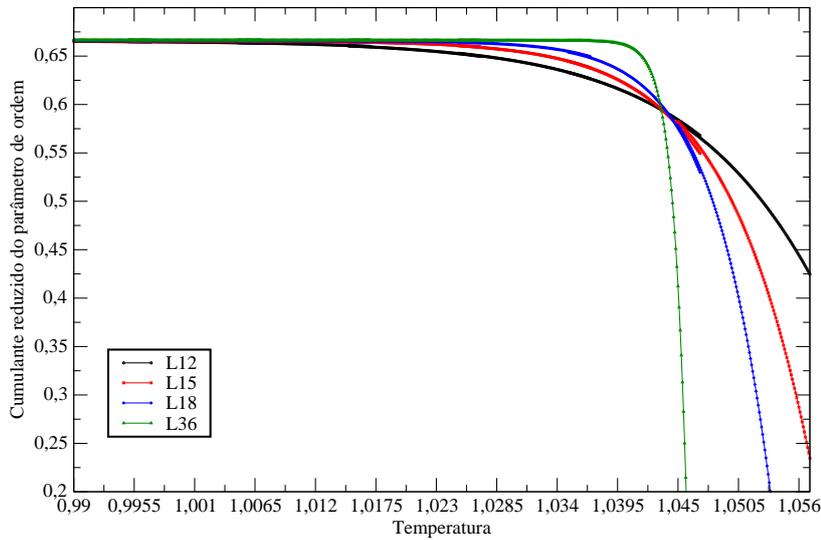


Figura 5.13: Cumulante reduzido do parâmetro de ordem para os tamanhos de rede $L = 12, 15, 18, 36$ para $D = 1.60$ e T variando de $T = 0,950$ a $T = 1,095$ com $T_c = 1,044(1)$.

Observando a figura 5:13 pode-se estimar o valor médio de T_c como aproximadamente: $T_c = 1,044(1)$.

5.1.5 Cumulante reduzido do parâmetro de ordem versus temperatura como função do campo cristalino

A partir dos dados obtidos por [12] realizamos simulações de MC ao longo da linha de primeira ordem para calcular os cumulantes reduzidos do parâmetro de ordem contra a temperatura como função do campo cristalino para os seguintes tamanhos de rede: $L = 12, 18, 36$. Ou seja, foram realizadas simulas aos pares de valores da temperatura e do campo cristalino. Aplicamos

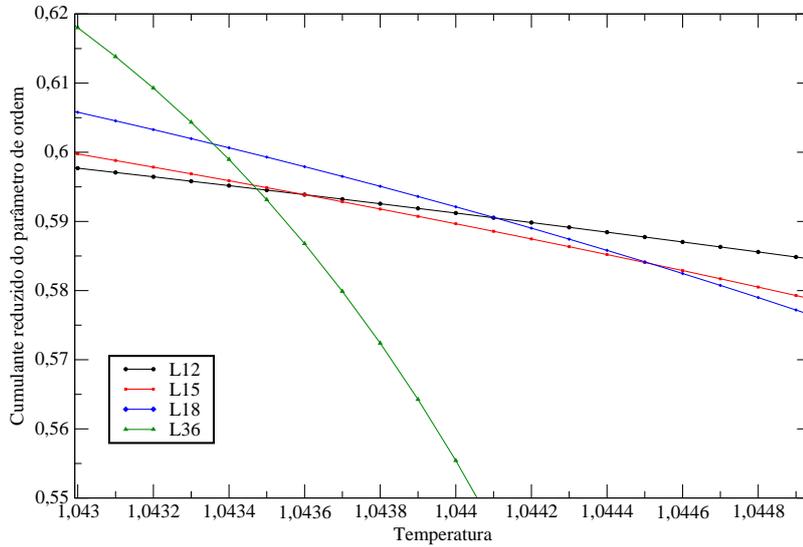


Figura 5.14: Cumulante reduzido do parâmetro de ordem para os tamanhos de rede $L = 12, 15, 18, 36$ para $D = 1.22$ e T variando de $T = 1,2050$ a $T = 1,3050$ com $T_c = 1,044(1)$.

a técnica do histograma nas simulações com um $\Delta T = 0,0001$ e T variando conforme os valores da tabela 5.1.

Os resultados obtidos com as simulações para os cumulantes do parâmetro de ordem não se mostraram satisfatórios para a localização do ponto pentacrítico de modo que o comportamento observado nos gráficos não estão de acordo com o comportamento de cumulantes. Possíveis razões para isso é o fato de estarmos trabalhando com redes pequenas sendo muito relevantes os efeitos de tamanho finito. Assim, se forem feitas simulações com redes maiores ($L = 96, 102, 108, \dots$) esperamos que o comportamento dos cumulantes sejam satisfatórios.

Outra possibilidade a ser considerada é que os pares de temperaturas e campos cristalinos simulados não estejam exatamente sobre a linha de primeira ordem.

Tabela 5.1: *Parâmetros utilizados na simulação de MC para o cálculo do cumulante de quarta ordem versus $T(D)$. Os valores foram retirados da referência [12]*

Temperaturas	Campo Cristalino
1,2259(1)	1,30
1,2744(1)	1,20
1,2958(1)	1,15
1,3143(1)	1,10
1,3385(1)	1,05
1,3602(1)	1,00

Capítulo 6

Conclusão e Perspectivas

Em nosso trabalho estudamos o modelo de Baxter-Wu Spin-1 usando simulações de Monte Carlo com a implementação do algoritmo de Metropolis e a técnica do histograma. Analisando os resultados com a teoria de escala de tamanho finito, objetivamos encontrar o ponto pentacrítico que é esperado para este modelo. As principais grandezas analisadas foram o cumulante de quarta ordem da energia e o cumulante reduzido do parâmetro de ordem para obter a multicriticalidade do modelo.

Os resultados obtidos nas simulações para o calor específico foram satisfatórios pois houve o pronunciamento dos picos dos gráficos em torno de uma temperatura específica com o aumento dos tamanhos das redes. Os cumulantes da energia e do parâmetro de ordem também foram satisfatórios e aplicando a técnica da intersecção do cumulante de Binder, para o parâmetro de ordem, obtivemos também as temperaturas de transição.

Os resultados para a susceptibilidade magnética e para os cumulantes não reduzidos tanto do cumulante de quarta ordem da energia quanto o do parâmetro de ordem não se mostraram satisfatórios para a caracterização dos sistemas estudados.

O comportamento do cumulante de quarta ordem contra a temperatura como função do campo cristalino não mostrou-se satisfatório para a obtenção do ponto pentacrítico.

Como trabalhos futuros podemos abordar o modelo utilizando a técnica do histograma largo via algoritmo Wang-Landau, cujo procedimento possibi-

lita obter as grandezas de interesse em todas as temperaturas e campos, o que facilitaria muito a caracterização do modelo completo. Outro caminho para a caracterização do modelo e obtenção do ponto pentacrítico é a dinâmica de tempos curtos ou a técnica de mistura de campos.

Bibliografia

- [1] M.E. Newman; G. E. Barkema *Monte Carlo Methods in Statistical Physics*. Oxford: Claredon Press. New York (2001).
- [2] K. Binder and D. W. Heermann, *Monte Carlo Simulation in Statistical Physics* (Springer-Verlag, Heidelberg, 1997).
- [3] N. Metropolis, A. Rosenbluth, M. Rosenbluth, A. H. Teller, E. Teller. *J. Chem. Physics* **21**, 1087, (1953).
- [4] J.W. Gibbs *Elementary Principles of Statistical Mechanics* - 1902: Dover Publications, New York, 1960.
- [5] P.H.L. Martins, Tese de Doutorado, Instituto de Física, UFMG (2004)
- [6] J.P. Valleau and D.N. Card, *J. Chem. Phys.* **57**, 5457 (1972).
- [7] R. Dickman and W.C. Schieve, *J. Physique* **45**, 1727 (1984).
- [8] A.M. Ferrenberg and R.H. Swendsen, *Phys. Rev. Lett.* **61**, 2635 (1988).
- [9] S.R.A. Salinas, *Introdução à Física Estatística*. EDUSP, São Paulo, 1997.
- [10] Shan-Ho Tsai, S.R. Salinas, *Braz. J. Phys.* 28, 58 (1998).
- [11] R.B. Potts. *Some Generalized Order-Disorder Transformations* Proc. Camb. Phil. Soc., 48(106), 1952.
- [12] M.L.M. Costa, Tese de Doutorado, Instituto de Física, UFMG (2005).
- [13] E. Ising, *Z. Phys.* **31**, 253 (1925).

-
- [14] W. Kinzel, E. Domany, A. Aharony, *J Phys. A: Math. Gen.* **14**, 471-422 (1981).
- [15] M. Blume, *Phys.Rev.* **141**, 517 (1966); H.W. Capel, *Physica* **32**, 966 (1966).
- [16] M.L.M. Costa, J. C. Xavier, J. A. Plascak, *Phys. Rev. B* **69**, 104103-1 (2004).
- [17] K. Binder and D.P. Landau // *Phys. Rev. B* **30** (1984) 1477.
- [18] M.E. Fisher in *Critical Phenomena*, edited by M.S. Green (Academic, New York, 1971).
- [19] H.E. Stanley, *Phase Transitions and Critical Phenomena*. Oxford Press, New York, p175, 1971.
- [20] K. Huang *Statistical Mechanics*. John Wiley and Sons Inc., 2nd ed., 1987.
- [21] M.J. de Oliveira *Termodinâmica*, (Editora Livraria da Física, SP) 2005.
- [22] D.W. Wood, H. P. Griffiths, *J Phys. C: Solid State Phys.*, Vol. 5, (1972).
- [23] R.J. Baxter, F. Y. Wu, *Aust. J. Phys.* **27**, 357-67 (1974).
- [24] R.J. Baxter, F. Y. Wu, *Phys. Rev. Lett.* **31**, 1294 (1973).
-

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](#)