

**TRANSIÇÃO DE FASE TOPOLÓGICA NO
MODELO DE HEISENBERG
ANISOTRÓPICO EM DUAS DIMENSÕES**

Tatiana Pena Figueiredo

Setembro de 2017

TRANSIÇÃO DE FASE TOPOLÓGICA NO MODELO DE HEISENBERG ANISOTRÓPICO EM DUAS DIMENSÕES

Tatiana Pena Figueiredo

Orientador: Prof. Dr. Bismarck Vaz da Costa

Dissertação apresentada à
UNIVERSIDADE FEDERAL DE MINAS GERAIS,
como requisito parcial para a obtenção do título de
DOUTOR EM FÍSICA.

Setembro de 2017

À todos que estiveram comigo
e contribuíram direta ou indiretamente
para que eu pudesse realizar esse trabalho.

AGRADECIMENTOS

Ao longo dos anos de trabalho que resultaram nesta tese, recebi muito apoio e incentivo, que sem os quais, este resultado não se teria tornado uma realidade. Na oportunidade, aproveito para expressar os meus sinceros agradecimentos.

Início agradecendo à Deus, por me guiar e me dar tranquilidade neste caminho. Aos meus pais, por me incentivar a seguir em frente e não desanimar diante das dificuldades, o meu infinito agradecimento. Ao meu irmão e cunhada pela acolhida. Ao meu esposo, Bruno, pelo amor e incentivo e à minha filha amada, Marina, pela compreensão nos momentos em que tive que me ausentar.

Muito especialmente, desejo agradecer ao meu orientador, Prof. Dr. Bismarck Vaz da Costa, pelo aprendizado, disponibilidade e atenção dispensada, durante todo este período. Ao professor Dr. Júlio César Siqueira Rocha pela grande colaboração e aos demais colegas do Laboratório de Simulação pela ajuda, em especial aos professores Dr. Lucas Alvares da Silva Mól e Dr. Antônio Cadille.

Agradeço à todos os funcionários do departamento de Física e às agências CNPq e CAPES pelo apoio financeiro.

RESUMO

A importância de excitações topológicas em física, principalmente na descrição de transições de fases, tem uma longa história começando com o fenômeno da supercondutividade no início do século passado. No entanto, somente recentemente as ideias que forjaram este novo conceito foram descritas de maneira mais rigorosa por Kosterlitz e Thouless, mais de 40 anos atrás. Transições de fases como condutor-supercondutor, fluido-superfluido, transições rugosas e várias outras são caracterizadas como sendo devidas ao aparecimento de excitações topológicas no sistema. Outro conceito de grande importância é aquele de universalidade das transições de fase. Próximo a uma transição de fase as correlações do sistema se tornam infinitas de modo que os detalhes do modelo se tornam irrelevantes. Nesta situação, sistemas originariamente tão distintos como supercondutores e ferromagnetos, podem ser descritos por uma mesma teoria. Os expoentes críticos, que caracterizam a transição, dependem somente da dimensão do sistema, do alcance do potencial e de suas simetrias. Neste trabalho nós nos dedicamos ao estudo da transição de fase do modelo Heisenberg Anisotrópico em duas dimensões. Este modelo tem uma transição de fase não usual, com ordem de quase longo alcance, caracterizada por uma mudança no comportamento da função de correlação spin-spin $C(r)$. À baixa temperatura, $T < T_{bkt}$, $C(r)$ se comporta como uma lei de potência como função da distância entre spins, r . Acima de T_{BKT} ela é exponencial. A energia livre tem todas as derivadas contínuas, por esta razão a transição é conhecida como uma “transição de ordem infinita”. Acredita-se que a transição ocorre devido a um “desligamento” de pares vórtice-antivórtice no sistema. No nosso estudo fizemos extensivas simulações numéricas usando a técnica conhecida como “Replica Exchange Wang-Landau”. Este método nos permite calcular a densidade de estados $g(E)$ do modelo. De posse de $g(E)$ calculamos as funções termodinâmicas relevantes do sistema (energia, magnetização, susceptibilidades e correlações.). Usando técnicas de “Finite Size Scaling”

determinamos a temperatura de transição T_{BKT} e o comportamento da função de correlação em um grande intervalo de temperatura. Os cálculos foram feitos para várias diluições de sítios não magnéticos, p , com $p = 0,0; 0,20; 0,30$ e $0,35$, o que permitiu que descrevêssemos com grande precisão o comportamento crítico do modelo em particular o comprimento de correlação.

ABSTRACT

The importance of topological excitations in physics, mainly in the description of phase transitions, has a long history beginning with the superconductivity phenomenon in the first years of the last century. However, the ideas behind this new concept has been more accurately described by Kosterlitz and Thouless, about 40 years ago. Conductor-superconductor, fluid-superfluid, rough transitions and many others are characterized as being due the appearance of topological excitations in the system. Another concept of great importance is that the universality in phase transitions. Close to a phase transition the correlations of the system become infinity, so that, the details of the model become irrelevant. In this situation, systems originally so different as superconductors and ferromagnets, can be described by the same theory. The critical exponents, that characterize the transition, depend only on the system dimension, the range of the potential and of their symmetries. This work is dedicated to study of the anisotropic Heisenberg model in two dimensions. This model has a non-usual phase transition, with quasi-long range order, characterized by a change in the behavior of the spin-spin correlation function $C(r)$. In low temperature, $T < T_{BKT}$, $C(r)$ decays as a power law with distance, r . For temperatures greater than T_{BKT} the correlation function falls off exponentially. The free energy has all the continuous derivatives, for this reason the transition is known as “infinity order transition”. The BKT theory assume that the transition is driven by a vortice-antivortice unbiding mechanism in the system. In our study we did extensive numerical simulations with the tecnique known as “ Replica Exchange Wang-Landau”. This method allow us to estimate the density of states $g(E)$ of the model. With $g(E)$ we can calculated the relevant thermodynamic functions of the system (energy, magnetization, suceptibility and correlations for instance). Using “Finite Size Scaling” tecniques we have determinade the transition temperature T_{BKT} and the behavior of the correlation function for a large range of temperatures. The calculations

were done for various dilutions of non-magnetic sites, p , with $p = 0, 0, 0, 20; 0, 30$ e $0, 35$, that allowed us to describe with great precision the critical behavior of the model in particular the correlation length.

CONTEÚDO

Resumo	iii
Abstract	v
1 Introdução	1
2 Noções sobre Transições de Fase	8
2.1 Simetria, Parâmetro de Ordem e Transições de fases	8
2.2 Expoentes Críticos	12
2.3 Teoria de Escala para Sistemas Finitos	16
2.4 A Transição de Fase Topológica de BKT	19
3 Métodos de Simulação	27
3.1 Sistemas em Equilíbrio	27
3.2 O Método Monte Carlo	28
3.2.1 Algoritmo de Metrópolis	30
3.2.2 Algoritmo de Wang-Landau: técnicas de histogramas	31
3.2.3 Método Replica-Exchange Wang-Landau	34
4 Resultados	37
4.1 O Modelo de Heisenberg Anisotrópico em duas dimensões	37
4.2 Modelo Puro	42

4.3	Modelo Diluído	48
4.3.1	Percolação	49
4.3.2	Estudo do modelo HA para vários valores de diluição	50
5	Conclusões e Perspectivas	63
A	Artigo publicado	65
	Referências Bibliográficas	76

Introdução

Alguns dos fenômenos mais interessantes na natureza são as transições de fases. Elas podem ocorrer nos mais diferentes contextos. Um exemplo típico é a água, que aquecida sob pressão atmosférica, a $100^{\circ}C$, torna-se vapor. Se resfriada, a $0^{\circ}C$, torna-se sólida. Porém, essa é uma classificação bastante grosseira. Em condições de temperatura extremamente altas ou baixas, por exemplo, estados mais exóticos podem aparecer. À altíssima temperatura observa-se a formação de plasma, que existe em condições extremas. À baixa temperatura novas fases e fenômenos inesperados podem acontecer. Um exemplo é a resistividade e a viscosidade que, presente em todos os materiais, repentinamente, desaparece. A descoberta da supercondutividade por Kamerlingh Onnes (Prêmio Nobel 1913) e o Hélio II superfluido por Kapitsa (Prêmio Nobel 1978) mostraram a existência de fases superfluidas e supercondutoras da matéria em temperaturas próximas ao zero absoluto. O que há de comum nessas fases é a formação do condensado de Bose-Einstein[1]. O condensado é formado quando, abaixo da temperatura de condensação Bose-Einstein, um número macroscópico de partículas ocupa o autoestado quântico de energia mais baixa. No caso dos supercondutores, o condensado é formado por pares de Cooper, como mostrado na teoria da supercondutividade BCS (Prêmio Nobel 1972 para John Bardeen, Leon Cooper e John Schrieffer). Um supercondutor do tipo I, ao ser colocado na presença de um campo magnético, e então resfriado abaixo de sua temperatura crítica, T_c , expulsa todo o campo magnético de seu interior. Isso é chamado de *efeito Meissner*[2]. O campo magnético penetra apenas em uma fina região de comprimento $\lambda_L \approx 50 - 500nm$ perto da superfície. Progressos no desenvolvimento do que se chama de supercondutor do tipo II, mostram que pares de Cooper têm dimensões suficientemente pequenas para permitir que o

campo magnético atravesse o material através de um conjunto de canais localizados [3]. Os tubos de fluxos magnéticos possuem um diâmetro de $\approx \lambda_L$ e são chamados de *vórtices de Abrikosov*. Aleixei Abrikosov, Vitaly Ginzburg e Anthony Leggett ganharam em 2003 o Prêmio Nobel pelos seus trabalhos em supercondutividade e superfluidez.

A física de sistemas com baixas dimensões, como os filmes finos e fios, é bem peculiar. Em superfícies ou em camadas extremamente finas o material pode ser considerado bidimensional por ter sua espessura muito menor que sua largura e comprimento. O mesmo ocorre com os fios finos que podem ser considerados unidimensionais. Os filmes de supercondutores ou superfluidos estão na mesma classe de universalidade que magnetos planares [4], isso quer dizer, que, na temperatura de transição de fase, estes sistemas podem ser descritos por uma mesma teoria. O modelo mais simples que descreve esses sistemas é o modelo XY bidimensional, também conhecido como Rotor Planar (RP) [5]. O modelo RP possui uma transição topológica em T_{BKT} [6]. Estreitamente relacionado é o modelo de Heisenberg bidimensional anisotrópico (HA) [7, 8]. Neste trabalho fizemos um estudo sistemático desse último modelo, no que tange ao conhecimento de seu comportamento crítico. Para caracterizar suas propriedades termodinâmicas usamos simulação numérica, conjugado a uma análise de tamanho finito (*Finite Size Scaling - FSS*) [10]. Essa teoria destina-se a obter o comportamento de um sistema infinito (limite termodinâmico) considerando uma sequência de sistemas finitos de volume crescente. Naturalmente, o limite termodinâmico nunca é alcançado, impondo limites às medidas. Os comprimentos relevantes em um estudo por simulação computacional, são as dimensões lineares do sistema, L , e o comprimento de correlação, ξ . O comprimento de correlação mede como as flutuações de uma quantidade física estão correlacionadas no sistema. Próximo a uma transição de fase, as flutuações das quantidades termodinâmicas do sistema são muito grandes, isso faz com que o comprimento de correlação divirja. Em um sistema finito, isto não pode acontecer, uma vez que ele não pode exceder o tamanho do sistema. Assim, próximo à temperatura de transição, ξ tem um máximo, mostrando o comportamento coletivo do sistema.

O grau de ordem de um sistema é caracterizado por uma quantidade chamada de parâmetro de ordem [10, 11]. O parâmetro de ordem é definido de modo que possa refletir o grau de

ordem da fase sob consideração. Por exemplo, a densidade, quando passamos da fase sólida para líquido; ou a magnetização, em uma transição ferromagnética. A transição de fase se dá quando, ao controlar algum parâmetro externo (no caso a temperatura), esta passar por um valor crítico, T_c , e o parâmetro de ordem mudar de valor. Em uma transição ferromagnética, por exemplo, a magnetização muda de um valor finito para zero, ou seja, o sistema passa de uma fase ordenada para uma fase desordenada.

Uma definição mais precisa é obtida ao analisar o comportamento da energia livre no diagrama de fases. As transições acontecem nas possíveis não analiticidades dessa função, que são pontos, retas, planos, etc. presentes no diagrama de fases[12]. As transições de fase podem ser caracterizadas segundo um critério mais antigo, proposto por Ehrenfest [13], como sendo de 1º, 2º, etc, ordem. Neste caso, o que determina a ordem da transição é em qual derivada da energia livre ocorre uma descontinuidade. Uma classificação mais moderna, devida a Fisher [14], as classifica como descontínuas ou contínuas. As descontínuas são aquelas em que existe calor latente na transição.

Nos sistemas uni e bi-dimensionais as flutuações térmicas desordenam o sistema, mesmo a baixa temperatura. O teorema conhecido como Mermin-Wagner [15], mostra que nenhuma quebra espontânea de simetria é permitida em modelos cujo parâmetro de ordem é contínuo em dimensão $d \leq 2$. No modelo de Ising 2D, onde a simetria é Z_2 , existe uma transição ordem-desordem [16], o que não é possível existir no modelo de Heisenberg bidimensional, (O_3). Entretanto, em 1972 J. Michael Kosterlitz e David J. Thouless identificaram um tipo completamente novo de transição de fase, na qual efeitos topológicos são essenciais [17, 18]. Essa transição de fase ficou conhecida como transição KT, ou BKT, juntando a inicial de V. Berezinskii, que desenvolveu ideias semelhantes [19].

A topologia é um ramo da matemática que estuda as propriedades de um espaço que se preserva sob deformações contínuas, como esticar, amassar ou dobrar [21]. Imagine um óculos feito de massa de modelar. Podemos deformá-lo até que ele se transforme em um pretzel! Os dois buracos presentes nos óculos também estão presentes no pretzel. O número de buracos, independente do seu tamanho ou forma, é uma propriedade topológica que não varia sob

deformações contínuas. Isso pode ser ilustrado através da figura 1.1

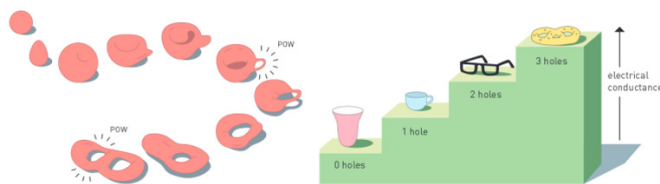


Figura 1.1: Topologia. Classificação topológica de um material através do número de buracos. Figura retirada de [20].

Na topologia quântica, a interpretação de certos fenômenos de quantização são associados a números quânticos topológicos [22].

A transição de fase topológica é caracterizada pela presença de configurações singulares na rede que, como no exemplo óculos-pretzel, não podem ser eliminadas por operações simples. Essa configuração é ilustrada no lado esquerdo da figura 1.2, que mostra uma configuração típica de vórtice em um modelo de spins. Cada vórtice é caracterizado por um número inteiro chamado de vorticidade. A vorticidade de uma dada configuração de spins será definida adiante. No lado direito da mesma figura, temos um par vórtice-antivórtice, de vorticidade $+1$ e -1 , respectivamente.

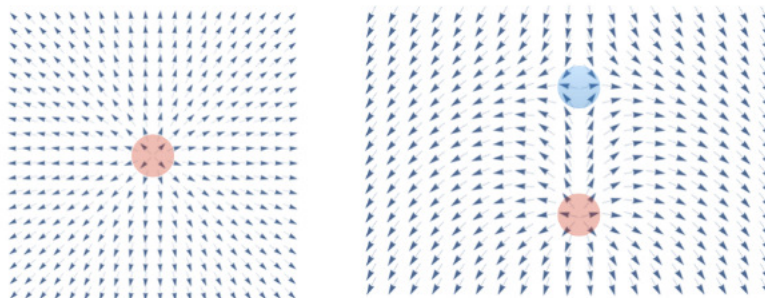


Figura 1.2: No lado esquerdo a configuração de um simples vórtice e no direito um par vórtice-antivórtice. Figura retirada de [21].

De acordo com a teoria KT, em baixas temperaturas, os pares são formados, definindo no sistema uma espécie de ordem topológica. Ao atingir a temperatura de transição, T_{BKT} , os pares

se desligam, introduzindo entropia no sistema e dando origem a uma estrutura desordenada. Essa transição é hoje aceita como a explicação correta para o aparecimento da superfluidez e supercondutividade em filmes finos e superfícies. Uma interpretação similar pode ser usada em outras transições, como as que ocorrem nas junções Josephson, [23, 24].

Outro fenômeno que David Thouless explicou teoricamente, usando topologia, foi o efeito Hall quântico [27]. O efeito Hall quântico foi descoberto por Klaus von Klitzing, que ganhou o prêmio Nobel em 1985. Ele mostrou, experimentalmente, que uma camada bidimensional de elétrons na interface entre dois semicondutores, submetida a altos campos magnéticos e a baixas temperaturas, apresenta uma condutividade quantizada, diferente do comportamento linear esperado. Isso determina uma nova fase da matéria, na qual conceitos topológicos são de grande importância. No efeito Hall quântico, os elétrons possuem seu comportamento governado pelas leis da mecânica quântica, eles se movem em órbitas com energias quantizadas, equivalentes às do oscilador harmônico, conhecidas como níveis de Landau. Os níveis ocupados são separados dos níveis vazios por um *gap* de energia, assim como em um isolante. Porém, os efeitos de borda fazem as órbitas se abrirem, os elétrons são refletidos e movimentam-se para frente, produzindo uma corrente caracterizada pela condutividade Hall, isto é, quantizada, e apresenta-se de forma muito precisa, como múltiplos inteiros do quadrado da carga do elétron dividida pela constante de Planck, [25]. A quantização da condutância Hall pode ser elegantemente explicada por argumentos geométricos ligados à invariantes topológicos conhecidos como número de Chern, [26]. Estruturas de bandas com *gap* podem ser agrupadas topologicamente de forma que o Hamiltoniano de uma pode ser deformado no de outra, da mesma classe, sem fechar o *gap* de energia. Essas classes são distinguidas pelo número de Chern. Assim, o Hamiltoniano não pode ser transformado em outro de uma classe distinta, a menos que ocorra uma transição de fase em que o *gap* de energia desapareça. A grande importância desse resultado é abrir a possibilidade de obter a condutância Hall mesmo na ausência de campo magnético, o que foi mais tarde confirmado por Haldane [27]. Em 1988, foi feita a previsão teórica que os estados de borda encontrados no efeito Hall quântico também poderiam ser encontrados nas bordas de isolantes bidimensionais que apresentassem interação *spin*-órbita forte. Essa fase da matéria, descrita

por Haldane, é agora chamada de isolante de Chern, e vinte e cinco anos mais tarde, em 2013, o efeito Hall quântico de *spin* foi observado experimentalmente em filmes finos de $(Bi, Sb)_2Te_3$ a campo magnético zero [28].

A partir de 1983, Duncan Haldane estudou cadeias de spins (ou de elétrons) se movendo em fios finos [29, 30]. Haldane revelou a diferença entre cadeias de spins inteiros e semi-inteiros, a chamada “conjectura de Haldane”, na qual os spins semi-inteiros não possuem “*gap*” no espectro de excitação, enquanto que os spins inteiros possuem, ou seja, o primeiro estado excitado é separado do estado fundamental por uma diferença de energia. A razão dessa diferença justifica-se por meio de conceitos topológicos. E esse efeito inesperado foi depois confirmado [31].

Os isolantes topológicos, supercondutores topológicos e metais topológicos são agora exemplos de áreas que, nas últimas décadas, definiram a linha de frente na pesquisa na física da matéria condensada, pois espera-se que esses materiais topológicos serão usados para aplicações em eletrônica e em informação quântica. A grande importância dessa área de pesquisa é indiscutível, já que, o entendimento de alguns mistérios da matéria que antes eram inexplicados e a perspectiva de desenvolvimento de materiais inovadores deram à David Thouless, Duncan Haldane e Michael Kosterlitz o prêmio Nobel de 2016 pelo conjunto de publicações em transição de fase topológica e fases topológicas da matéria. Assim, apesar da transição BKT ter sido descrita pela primeira vez a 40 anos atrás, ela ainda é matéria de discussão e admiração.

Nesse trabalho, usamos o modelo de Heisenberg anisotrópico (HA) para estudar a transição *BKT*. O hamiltoniano para esse modelo com uma anisotropia planar A é dado por [32]:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} [\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - AS_i^z S_j^z] \quad (1.1)$$

Nosso modelo é definido em uma rede quadrada, com condições de contorno periódicas, onde cada sítio da rede recebe um vetor de spin de módulo $S_i = 1$. Em coordenadas esféricas o vetor de spin é escrito como: $\vec{S}_i \equiv \sin\Theta_i \cos\Phi_i \hat{x} + \sin\Theta_i \sin\Phi_i \hat{y} + \cos\Theta_i \hat{k}$. Onde Θ e Φ são os ângulos esféricos.

Muitos trabalhos tratam a transição no modelo HA como estando na mesma classe de universalidade do modelo XY. Estes modelos possuem o mesmo Hamiltoniano, porém a variável

de spin, no modelo XY, possui apenas dois graus de liberdade enquanto que no modelo de HA, a mesma, possui três, ou seja, permite flutuações fora do plano. Devido a isto, o modelo XY não possui dinâmica, diferentemente do modelo HA. Este grau de liberdade a mais, no modelo HA, aumenta a entropia do sistema, porém, a característica de transição BKT é conservada. Alguns trabalhos mostraram que a temperatura de transição está próxima de $0,700J$, [32, 33, 34, 35, 36, 37].

A transição BKT é caracterizada por uma mudança no comportamento da função de correlação spin-spin em uma temperatura finita, T_{BKT} ; para $T > T_{BKT}$ a função de correlação exibe um decaimento exponencial e para $T < T_{BKT}$, possui um decaimento como uma lei de potência, com um ordenamento de quase-longo alcance. Esta transição de fase não pode ser classificada como de primeira ordem e nem contínua ou crítica, pois não existe ordem de longo alcance para nenhuma temperatura finita. Segundo a teoria BKT, acredita-se que a transição acontece devido ao mecanismo de desligamento dos pares vórtices e anti-vórtices na rede como já mencionado.

Neste trabalho fizemos simulações intensivas, usando o método de Replica Exchange Wang-Landau, para obter várias quantidades termodinâmicas. As simulações foram feitas utilizando redes de vários tamanhos. Estudamos tanto o modelo puro quanto o modelo com inclusão de sítios não magnéticos. Os sítios não magnéticos são distribuídos aleatoriamente, até o limite de percolação, após o qual a transição desaparece. O fato de interesse nesse modelo diluído é a presença de vórtices e a contribuição deles para a transição. Na presença de diluição, os vórtices são atraídos e ancorados pelos sítios não magnéticos, isto é, em um modelo magnético diluído, quando um sítio está vazio, o vórtice pode permanecer preso por um longo período de tempo [38]. Por outro lado, a energia desses vórtices diminui na presença da vacância. Assim, com o aumento da diluição, o número de vórtices aumenta, e conseqüentemente a desordem do sistema. O efeito disso é a diminuição da temperatura de transição com o aumento da diluição, o que foi confirmado em nossos resultados. Além da temperatura de transição, foi investigado também o comportamento de escala dos expoentes críticos na região de temperatura $T < T_{BKT}$.

Noções sobre Transições de Fase

2.1 Simetria, Parâmetro de Ordem e Transições de fases

As propriedades dinâmicas de um sistema de partículas ou de spins são determinadas por um hamiltoniano H , que é invariante sob todas as transformações de um grupo G , [39]. Formalmente, se g é um elemento do grupo G a invariância pela transformação g é dada por:

$$g^{-1}Hg = H \tag{2.1}$$

O hamiltoniano de Heisenberg, por exemplo, é invariante sobre translações no tempo, reversão temporal e a rotação de todos os spins com relação a um eixo arbitrário. Na fase de altas temperaturas, as funções de correlação não nulas e as médias termodinâmicas dos operadores também não são afetadas por operações em G .

As fases ordenadas podem ser distinguidas das fases desordenadas pelo aparecimento de médias $\langle \phi_a \rangle$, dos operadores ϕ_a , que não são invariantes sobre algumas transformações do grupo G . A modificação de alguma condição do sistema como, a pressão, a temperatura, ou a aplicação de um campo externo, faz com que médias termodinâmicas não apresentem mais esta invariância para um subgrupo de G . Esses valores esperados que perdem a invariância na fase ordenada são os *parâmetros de ordem*. No magneto de Heisenberg, por exemplo, o parâmetro de ordem é a magnetização, $\langle m \rangle$, que é invariante sob rotações em torno de um eixo paralelo a ela mesma, porém não é invariante sob rotações em torno de eixos perpendiculares a ela. Assim, na fase ordenada, as médias termodinâmicas e as funções de correlação são invariantes somente para um subgrupo de G , enquanto que o hamiltoniano é invariante para todo o G . O

ordenamento, portanto, quebra a simetria do hamiltoniano.

A consequência da quebra de simetria na fase ordenada é a existência de dois ou mais mínimos na função da energia livre do sistema, que representam as fases que podem coexistir no equilíbrio. Cada fase é caracterizada por um valor particular do parâmetro de ordem. As transformações do parâmetro de ordem pelos elementos de G , representam as transformações entre diferentes fases equivalentes. O estado fundamental é, portanto, degenerado. No entanto, o sistema assume apenas um desses estados, quebrando a simetria original. Dizemos então que houve, no sistema, uma quebra espontânea de simetria.

O grupo de simetria pode ser classificado quanto ao número de elementos. Se o número de elementos do grupo for enumerável, ele é chamado de grupo discreto. O grupo discreto mais simples é o Z_2 , constituído de apenas dois elementos. O hamiltoniano do modelo de Ising é invariante sobre o grupo Z_2 . Se o número de elementos do grupo for incontável, tal como o grupo de rotações, a simetria é contínua. O grupo contínuo mais simples é o O_2 , que representa o grupo de rotações no plano bidimensional. O modelo Heisenberg apresenta invariância no grupo O_3 , que são as rotações no espaço tridimensional.

As transições de fase em um sistema modelo podem ser observadas apenas no *limite termodinâmico*. Desse modo, se faz necessário definirmos esse limite. A energia livre de um sistema, F , é uma variável extensiva. Se definirmos uma variável, f , por exemplo, em que:

$$f = \frac{F}{N} \tag{2.2}$$

onde N é o número de partículas do sistema, F será extensiva se f não depender de N , quando $N \rightarrow \infty$. A condição $N \rightarrow \infty$ com f constante é chamada de limite termodinâmico [12]. Em sistemas contínuos, podemos estabelecer o limite termodinâmico através do volume, ou seja, $V \rightarrow \infty$, porém lembrando que o limite deve ser tomado mantendo-se a densidade (de massa ou de partículas) constante.

Derivadas da quantidade f são funções de três variáveis: campo magnético (H), magnetização (M) e temperatura (T). Esses parâmetros termodinâmicos, H , M e T , podem ser escritos em uma relação funcional chamada de equação de estado, e possui a seguinte forma [10]:

$$f'(H, M, T) = 0. \quad (2.3)$$

Os estados de equilíbrio do sistema são determinados pelos valores de H , M , e T que satisfazem (2.3). A energia livre, f , é uma função analítica dos parâmetros termodinâmicos, em quase todo o espaço. As possíveis não-analiticidades de f são superfícies no diagrama de fases. Essas superfícies são as regiões onde ocorrem as transições de fase.

As quantidades termodinâmicas de um sistema são determinadas, a partir da energia livre, por diferenciação. Algumas dessas quantidades são, por exemplo, a energia total, a magnetização, o calor específico e a susceptibilidade magnética. Na transição de fase existe uma mudança brusca ou descontínua, nas propriedades termodinâmicas do sistema, e isso ocorre quando há uma singularidade em uma dessas derivadas.

As transições de fase são classificadas, por Ehrenfest, pela menor derivada descontínua da energia livre [13]. Transições de ordem n consistem, nessa classificação, na descontinuidade da n -ésima derivada da energia livre. Um exemplo de transições de fase de primeira ordem são as transições sólido/líquido/gás, porque envolvem descontinuidades na função de densidade, que é o inverso da primeira derivada da energia livre em função da pressão. Transições de fase de segunda ordem são contínuas na primeira derivada, mas apresentam descontinuidade numa segunda derivada da energia livre. Essas incluem a transição de fase ferromagnética. Nesses materiais, a susceptibilidade magnética, que é uma quantidade definida pela segunda derivada da energia livre em função do campo magnético, apresenta uma descontinuidade. Ainda seria possível, segundo a essa classificação, transições de ordens maiores. Entretanto, a classificação de Ehrenfest tornou-se inadequada, por não levar em conta o caso em que uma derivada da energia livre diverge.

Uma classificação mais geral foi proposta por Fisher [14]. Se há calor latente, a transição é descontínua, sendo contínua em caso contrário.

A literatura das transições de fase possui alguns modelos que procuram representar sistemas físicos reais. Esses modelos, são geralmente, de sistemas nos quais é possível calcular a função de partição exatamente. A solução exata desses modelos possui uma importância enorme

na mecânica estatística, pois, a partir deles, é possível testar métodos aproximados. Merece destaque o Modelo de Ising bidimensional. Este é um um modelo clássico, que serve como primeira aproximação para a descrição de vários tipos de fenômenos e tem solução exata, obtida inicialmente por Onsager [40].

Nesse modelo, cada variável de spin pode receber apenas dois valores discretos: $+1$ ou -1 . A magnetização m é, por definição, o valor médio da soma dos spins do sistema e pode ser calculada através da derivada da energia livre de Gibbs com relação ao campo magnético H . Para $H = 0$ não existe um ordenamento preferencial para os spins, assim em, $H = 0, T = 0$, temos um estado completamente ordenado, com todos os spins alinhados na mesma direção ($+1$ ou -1). Nesse caso, a magnetização espontânea tem módulo máximo e o sistema apresenta *ordem de longo alcance*.

A medida em que a temperatura aumenta ($H = 0$), alguns spins são “*flipados*” (de $+1$ para -1 ou vice-versa), de modo que a magnetização diminui até que em $T = T_c$, onde T_c é a temperatura crítica, a magnetização se anula. Esse comportamento está representado na figura 2.1 (a), que mostra a projeção da superfície HMT , no plano $M - T$, (ou $H = 0$). Para $T \gtrsim T_c$ existem pequenas “ilhas”de momentos magnéticos alinhados, essas ilhas ficam menores com o aumento da temperatura, assim, apesar da magnetização ser nula nessa região, observa-se algum grau de ordem no sistema, esse ordenamento é frequentemente chamado de *ordem de curto alcance*. A temperaturas muito acima da temperatura crítica, os spins estão orientados aleatoriamente, e o sistema é completamente desordenado.

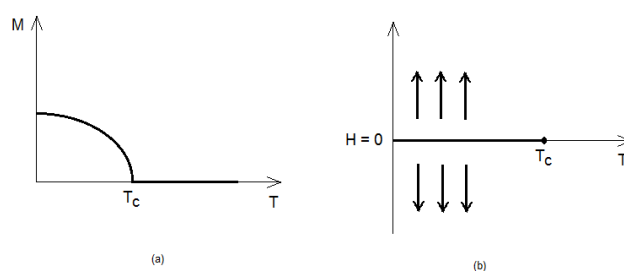


Figura 2.1: Projeção da superfície HMT no plano $M - T$ em (a) e no plano $H - T$ em (b).

A magnetização tem uma descontinuidade em $H = 0$ para $T < T_c$, figura 2.1 (b). Caracterizando uma transição de primeira ordem. Para $T > T_c$, esta mesma função é contínua. Entretanto, a segunda derivada, que está relacionada com a susceptibilidade magnética χ , é infinita em $T = T_c$, dessa forma temos uma transição de fase contínua com uma temperatura crítica T_c . No modelo de Ising, existe uma linha de transição de primeira ordem ao longo de $H = 0$, que começa na origem e termina em $T = T_c$, onde existe uma transição contínua.

Uma teoria fenomenológica importante que descreve as transições de fases é a teoria de Landau [10, 12, 39, 41]. Essa teoria é baseada em uma expansão em série de potências da energia livre em função do parâmetro de ordem na transição, onde apenas termos compatíveis com a simetria do sistema são incluídos. Dessa maneira, uma vez que é conhecida a função da energia livre, pode-se obter as propriedades termodinâmicas do sistema. Assume-se que o parâmetro de ordem é pequeno perto da transição, então, apenas os termos de menor ordem são importantes. Para um sistema ferromagnético simples, a campo zero, a expansão, em termos da magnetização, é:

$$F(T, m) = F_0 + a_2(T)m^2 + a_4(T)m^4 + \dots \quad (2.4)$$

Os coeficientes a_2 , a_4 , etc, dependem da temperatura. Na expansão temos apenas os termos pares por causa da invariância na inversão da magnetização. Na figura 2.2, a energia livre é mostrada graficamente em função do parâmetro de ordem m . Para $T > T_c$, a energia livre possui um mínimo em $m = 0$ que corresponde à fase paramagnética. Para $T < T_c$, a energia livre possui dois mínimos que correspondem à coexistência de dois estados ferromagnéticos. A figura 2.2 descreve uma situação mostrada na figura 2.1(b).

2.2 Expoentes Críticos

Denomina-se fenômeno crítico o comportamento do sistema nas proximidades de uma transição de fase crítica. Iremos descrever o comportamento de uma quantidade termodinâmica, $f(t)$, nas proximidades do ponto crítico, onde:

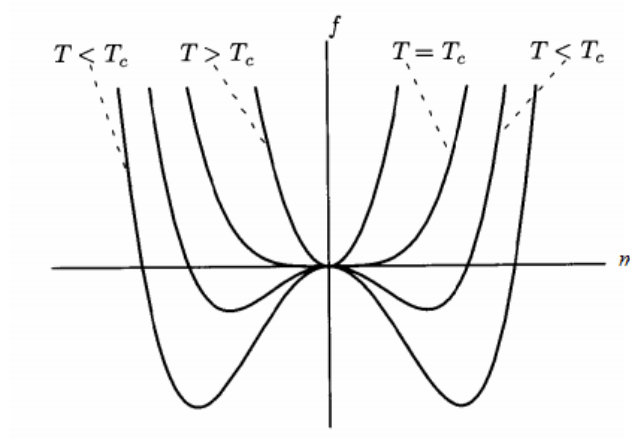


Figura 2.2: A energia livre em função do parametro de ordem na aproximação de campo médio [39].

$$t \equiv \frac{T - T_c}{T_c} \quad (2.5)$$

é a temperatura reduzida, uma variável adimensional que mede a distância de uma dada temperatura à temperatura crítica. Admite-se que $f(t)$ se comporta como uma lei de potência em ($t \rightarrow 0$), [10, 12]. O valor do expoente λ associado à quantidade física $f(t)$ pode ser obtido a partir do limite:

$$\lambda = \lim_{t \rightarrow 0^+} \frac{\ln|f(t)|}{\ln|t|}. \quad (2.6)$$

O comportamento esperado da grandeza $f(t)$ nas proximidades do ponto crítico é:

$$f(t) = At^\lambda(1 + Bt^\theta + \dots), \quad (2.7)$$

isto é, as quantidades críticas devem ser funções homogêneas. O comportamento predominante na singularidade de $f(t)$ perto do ponto crítico, quando $t \rightarrow 0^+$, é função de λ como:

$$f(t) \sim t^\lambda. \quad (2.8)$$

Se aproximarmos do ponto crítico com $t \rightarrow 0^-$, o expoente λ' é definido da mesma forma somente trocando t por $-t$. Para a maioria dos casos, $\lambda' = \lambda$.

Na tabela 2.1 estão listados os expoentes que caracterizam as quantidades termodinâmicas mais utilizadas.

Grandeza	Expoente Crítico	Lei de Potência	Condições
Calor Específico	α	$c \sim t^{-\alpha}$	$T > T_c, H = 0$
Magnetização	β	$m \sim (-t)^\beta$	$T < T_c, H = 0$
	δ	$m \sim H^{1/\delta}$	$T = T_c$
Susceptibilidade	γ	$\chi \sim t^{-\gamma}$	$T > T_c, H = 0$
Comprimento de Correlação	ν	$\xi \sim t^{-\nu}$	$T > T_c, H = 0$
Função de Correlação	η	$\Gamma(r) \sim r^{-(d-2+\eta)}$	$T = T_c, H = 0$

Tabela 2.1: Definição de alguns expoentes críticos para um sistema magnético de dimensão espacial d [10].

O expoente crítico da função de correlação está apresentado na última linha. Essa função mede a correlação espacial entre dois spins, S_i no sítio r_i e S_j no sítio r_j com uma distância $r = r_i - r_j$ entre eles. A função de correlação é definida como:

$$\Gamma(r) \equiv \langle \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \rangle, \quad (2.9)$$

onde $\langle \dots \rangle$ denotam médias termodinâmicas. Se o sistema possui simetria translacional, a função de correlação depende somente do módulo da distância entre os spins, r , e nestes casos, espera-se que $\Gamma(r)$ se comporte assintoticamente como expresso na fórmula de Ornstein-Zernike [10]:

$$\Gamma(r) \equiv Ar^{-p}e^{-r/\xi}, \quad (2.10)$$

com p sendo um número real, ξ o comprimento de correlação e A uma constante. Em transições contínuas, longe da temperatura crítica, o comprimento de correlação é finito e a função de correlação tem um comportamento predominantemente exponencial. No ponto crítico o comprimento de correlação se torna infinito, e a função de correlação decai como lei de potência.

Nas transições de BKT, como iremos ver mais adiante, o comprimento de correlação é finito para qualquer temperatura menor que a crítica.

Os sistemas que possuem transições de fase críticas, caracterizadas pelos mesmos valores de expoentes críticos, pertencem à mesma classe de universalidade. Apesar de a temperatura crítica depender sensivelmente dos detalhes do sistema, os expoentes críticos dependem apenas da dimensão espacial (d), da simetria e da dimensão do parâmetro de ordem (n), e do alcance das interações do sistema [42]. Dessa forma, sistemas complexos podem ser estudados, na transição de fase, considerando-se modelos muito mais simples. A classe de universalidade recebe o nome do sistema mais simples para o qual um conjunto de expoentes críticos é observado. Os expoentes críticos podem ser relacionados através de um conjunto de desigualdades que são obtidas a partir de argumentos termodinâmicos,[10]. Como exemplo, duas são as desigualdades de Rushbrooke,

$$\alpha + 2\beta + \gamma \geq 2, \quad (2.11)$$

e a de Griffiths,

$$\alpha + \beta(1 + \delta) \geq 2. \quad (2.12)$$

Através da *hipótese de escala* (*Finite Size Scaling* - *FSS*) podemos estabelecer relações entre os expoentes críticos. A hipótese de escala assume que a energia livre de Gibbs e a função de correlação são funções homogêneas generalizadas [10], logo podem ser escritas da seguinte maneira:

$$G(t, H) = l^{-d} G_s(l^y t, l^x H), \quad (2.13)$$

$$\Gamma(r, t, H) = l^{2(x-d)} \Gamma_s(l^{-1} r, l^y t, l^x H), \quad (2.14)$$

para qualquer valor de l . A hipótese de escala não especifica os valores de x e y , porém, todos

os expoentes críticos podem ser expressos em termos desses dois números, através das relações:

$$\beta = \frac{d-x}{y}, \delta = \frac{x}{1-x}, \gamma = \frac{2x-1}{y}, \alpha = 2 - \frac{1}{y}, \nu = \frac{1}{y}, -d(-2 + \eta) = 2(x-d). \quad (2.15)$$

A partir delas pode ser mostrado que:

$$\alpha + 2\beta + \gamma = 2, \quad (2.16)$$

$$\alpha + \beta(1 + \delta) = 2, \quad (2.17)$$

$$d\nu = 2 - \alpha, \quad (2.18)$$

$$\gamma = (2 - \eta)\nu. \quad (2.19)$$

Existem várias outras igualdades que podem ser obtidas através das relações que temos entre os expoentes críticos e os parâmetros de escala x e y . Assim, se dois expoentes críticos são especificados, todos os outros podem ser determinados.

2.3 Teoria de Escala para Sistemas Finitos

A função da energia livre de um sistema apresenta regiões com singularidades. Essas são as regiões de transições de fase. Porém, essas singularidades só estão presentes no limite termodinâmico. Se o sistema é finito, as singularidades dão lugar a máximos arredondados, que estão deslocados em relação ao ponto crítico.

O estudo das transições de fase, feito através de simulações computacionais, é realizado a partir de resultados obtidos com sistemas de tamanho finito. A teoria de escala de tamanho finito ou *Finite Size Scaling (FSS)*, destina-se a descrever a relação entre o comportamento de um sistema finito e o seu correspondente no limite termodinâmico. Logo, para a interpretação dos resultados computacionais, o conhecimento dessa teoria é de fundamental importância [43].

Segundo a teoria de escala proposta por Fisher, na região próxima ao ponto crítico, o comprimento característico do sistema é o comprimento de correlação, logo, é plausível supor

que os efeitos de tamanho finito sejam controlados por esse comprimento. Isto é, se o sistema é finito, e $\xi > L$, podemos esperar que as quantidades termodinâmicas tenham uma grande dependência em L . Por outro lado, se L for muito maior que ξ nenhum efeito significativo de tamanho finito deve ser observado.

Na região crítica espera-se que o comprimento de correlação se comporte como [45]:

$$\xi \sim |t|^{-\nu}, \quad (2.20)$$

onde t é a temperatura reduzida $t \equiv \frac{T-T_c}{T_c}$. Assim, $|t| \sim \xi^{-1/\nu}$. Neste caso, a dimensão linear, L , do sistema é o comprimento relevante, de modo que podemos escrever $|t| \sim L^{-1/\nu}$ e ξ fica limitado por L .

A partir de $|t| \sim L^{-1/\nu}$, temos que:

$$\left| \frac{T - T_c}{T_c} \right| \propto L^{-1/\nu}, \quad (2.21)$$

em $T = T_c(L)$:

$$T_c(L) - T_c(\infty) = aL^{-1/\nu}. \quad (2.22)$$

Isto é, a temperatura crítica em um sistema de tamanho finito, está deslocada em relação a temperatura crítica no limite termodinâmico, de uma quantidade proporcional à $L^{-1/\nu}$. Logo:

$$T_c(L) = T_\infty + aL^{-1/\nu}. \quad (2.23)$$

Entretanto, para o caso das transições BKT, uma forma especial de análise do FSS, feitas a partir das equações do grupo de renormalização, próxima a temperatura crítica, a função de escala possui uma dependência logarítmica [17, 18]:

$$T_c(L) = T_\infty + a'(\ln L)^{-2}. \quad (2.24)$$

Para tratar do FSS para uma determinada quantidade de interesse, começamos por escrevê-la em termos de ξ . Consideremos, por exemplo, a susceptibilidade, que no limite termodinâmico

tem o comportamento $\chi \sim t^{-\gamma}$ (2.1). Eliminando t nas equações de χ e de ξ temos:

$$\chi \sim t^{-\gamma} \sim \xi^{\gamma/\nu}, (L \gg \xi, t \rightarrow 0), \quad (2.25)$$

na vizinhança da transição de fase. Para $L \ll \xi$, podemos escrever:

$$\chi \sim L^{\gamma/\nu}, (L \ll \xi, t \rightarrow 0). \quad (2.26)$$

Isto quer dizer que, em um sistema finito de tamanho L , o comprimento de correlação é truncado quando o seu valor é próximo do tamanho do sistema, conseqüentemente a susceptibilidade também irá sofrer modificações. Essas modificações são resumidas no seguinte *ansatz* [45]:

$$\chi = \xi^{\gamma/\nu} \chi_0(L/\xi), \quad (2.27)$$

onde χ_0 é uma função adimensional e constante se $L \gg \xi$, e proporcional a $(L/\xi)^{\gamma/\nu}$ se $L \ll \xi$. O comportamento da susceptibilidade ao aproximar de T_c é definido por χ_0 . Esta é a função que medimos ao realizar as simulações de Monte Carlo. Podemos escrever a equação 2.27 de uma forma mais conveniente, em termos de L , definindo a função $\chi'(L/\xi) = (L/\xi)^{-\gamma} \chi_0((L/\xi)^\nu)$, assim, usando a equação (2.20), ela se torna:

$$\chi = L^{\gamma/\nu} \chi'(L^{1/\nu}t). \quad (2.28)$$

Essa equação nos diz como a susceptibilidade deve variar com o tamanho L do sistema próximo a T_c . Esse método é extensivo para outras quantidades. Para o modelo de Ising, por exemplo, podemos encontrar funções de escala para o calor específico e para a magnetização através de argumentos similares. Os resultados são:

$$c = L^{\alpha/\nu} c'(L^{1/\nu}t), \quad (2.29)$$

$$m = L^{\beta/\nu} m'(L^{1/\nu}t). \quad (2.30)$$

As funções χ' , c' e m' são chamadas de função de escala. A posição dos picos do calor específico e da susceptibilidade estão deslocados em relação à temperatura crítica no limite termodinâmico, de uma quantidade proporcional à $L^{-1/\nu}$, ou a $(\ln L)^{-2}$, devido à 2.23 e 2.24, e as alturas dos referidos picos variam através de uma lei de potência com o tamanho da rede L . Este comportamento está resumido na figura 2.3 onde usamos a susceptibilidade como exemplo.

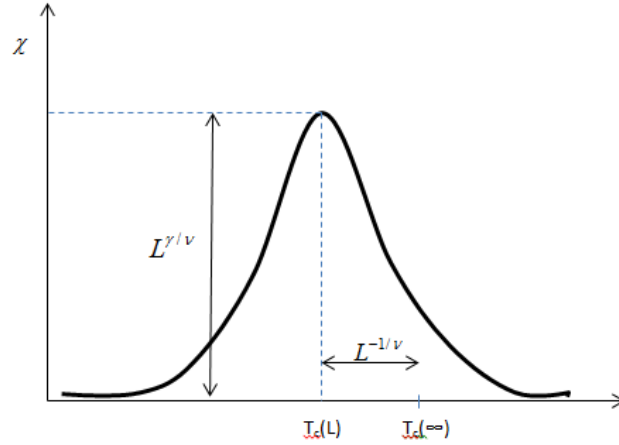


Figura 2.3: Esquema do efeito de tamanho finito na susceptibilidade nas proximidades do ponto crítico.

Outra quantidade importante é o cumulante de Binder de quarta ordem, U_4 , definida como [43]:

$$U_4 = 1 - \frac{\langle M^4 \rangle}{3 \langle M^2 \rangle^2}. \quad (2.31)$$

Para L suficientemente grande, $U_4 \rightarrow 0$ para $T > T_c$ e $U_4 \rightarrow 2/3$ para $T < T_c$. Assim, U_4 tende a um ponto fixo U^* em $T = T_c$. Desta forma, em um gráfico de U_4 em função de T para vários tamanhos de rede, as curvas se interceptam no ponto fixo U^* , e a localização deste ponto é outra forma de se obter a temperatura crítica.

2.4 A Transição de Fase Topológica de BKT

Modelos magnéticos bidimensionais com variáveis de spin contínuas representam uma classe muito interessante em física, pois podem apresentar uma transição de fase com um comporta-

mento bastante peculiar. Nessa seção descrevemos o modelo de Heisenberg anisotrópico (HA), que será usado ao longo desse trabalho. O modelo HA com uma anisotropia planar $A \neq 0$ é definido pelo seguinte Hamiltoniano:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} [\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - AS_i^z S_j^z], \quad (2.32)$$

onde $\langle i, j \rangle$, denota que a soma é feita sobre os primeiros vizinhos e a variável de spin pode ser parametrizada como: $\vec{S}_i \equiv \text{sen}\Theta_i \cos\Phi_i \hat{i} + \text{sen}\Theta_i \text{sen}\Phi_i \hat{j} + \text{cos}\Theta_i \hat{k}$. O vetor de spin, \vec{S} , possui módulo unitário, e $J > 0$ é a constante de acoplamento entre os primeiros vizinhos. Com essa parametrização reescrevemos o hamiltoniano (2.27) como:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \text{sen}\Theta_i \text{sen}\Theta_j \cos(\Phi_i - \Phi_j) + (1 - A) \text{cos}\Theta_i \text{cos}\Theta_j. \quad (2.33)$$

Se fizermos $A = 1$ espera-se que o ângulo polar irá flutuar em torno de $\Theta \approx \pi/2$ para temperaturas moderadas. Mais adiante discutiremos que, usando esta aproximação obtemos um modelo que deve ser da mesma classe de universalidade do “Rotor Rígido”, ou algumas vezes chamado de modelo XY , definido pelo hamiltoniano:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \cos(\Phi_i - \Phi_j). \quad (2.34)$$

Ambos os hamiltonianos são igualmente idênticos [4]. Contudo, possuem a diferença que, para este último, os spins possuem dois graus de liberdade, enquanto que no modelo de Heisenberg anisotrópico, os spins possuem três, isto é, permite flutuações fora do plano. Se tomarmos o limite contínuo, e permitirmos o ângulo polar flutuar em torno de $\theta \approx \pi/2$ podemos esperar que ambos os modelos sejam equivalentes. Podemos esperar também que devido a fonte de entropia adicional introduzida pelo grau de liberdade fora do plano, no modelo de Heisenberg anisotrópico, a temperatura de transição T_{BKT} será menor que no modelo XY .

Para compreender a física por detrás da transição de fase vamos discutir o modelo XY em algum detalhe. Iniciaremos fazendo uma análise da função de correlação spin-spin. A função

de correlação, expandida para altas temperaturas, torna-se:

$$\langle \vec{S}_0 \cdot \vec{S}_r \rangle = \langle \cos(\phi(r) - \phi(0)) \rangle = \frac{\int_0^{2\pi} \frac{d\phi_i}{2\pi} \prod_i \cos(\phi(r) - \phi(0)) \prod_{\langle i,j \rangle} (1 + \beta J \cos(\phi_i - \phi_j))}{\int_0^{2\pi} \frac{d\phi_i}{2\pi} \prod_i \prod_{\langle i,j \rangle} (1 + \beta J \cos(\phi_i - \phi_j))}, \quad (2.35)$$

onde $r = |i - j|$. Os spins que tem uma simples interação contribuem com um termo nulo: $\int_0^{2\pi} d\phi_1 \cos(\phi_1 - \phi_2) = 0$. Os spins que interagem com dois sítios contribuem com um termo de cosseno: $\int_0^{2\pi} d\phi_2 \cos(\phi_1 - \phi_2) \cos(\phi_2 - \phi_3) / \int_0^{2\pi} d\phi_2 = \frac{1}{2} \cos(\phi_1 - \phi_3)$. Logo, o primeiro termo diferente de zero será da ordem de $(J/k_b T)^r$, da seguinte forma:

$$\langle \vec{S}_0 \cdot \vec{S}_r \rangle \approx (J/k_b T)^r = e^{-r \ln(k_b T/J)}. \quad (2.36)$$

A função de correlação possui uma dependência exponencial com a distância entre os spins para T suficientemente alto. Para baixas temperaturas, podemos considerar que a diferença angular entre os sítios vizinhos é pequena, $|\phi_i - \phi_j| \ll 1$, assim o Hamiltoniano da equação 2.29, pode ser expandido como [4]:

$$H \approx -J \sum_{\langle i,j \rangle} \left(1 - \frac{(\phi_i - \phi_j)^2}{2}\right). \quad (2.37)$$

A soma sobre os primeiros vizinhos corresponde ao operador Laplaciano discreto, que pode ser expresso em termos de derivadas parciais através de $\phi_i - \phi_j = \partial_x \phi$, para dois sítios i e j que diferem de um espaçamento de rede, a , na direção x . Isso leva a um hamiltoniano contínuo como segue:

$$H = E_0 + \frac{J}{2} \int d^2 r (\vec{\nabla} \phi(\vec{r}))^2. \quad (2.38)$$

O termo constante corresponde à energia do estado fundamental, quando todos os N spins da rede estão alinhados, esse termo tem o valor de $E_0 = 2JN$. Substituindo o hamiltoniano da

equação 2.37 na função de correlação e considerando apenas o termo quadrático temos:

$$\langle \vec{S}_0 \cdot \vec{S}_r \rangle = \langle \cos(\phi(0) - \phi(r)) \rangle = \text{Re} \langle e^{i(\phi(0) - \phi(r))} \rangle \approx \langle e^{(\phi(0) - \phi(r))^2/2} \rangle. \quad (2.39)$$

que envolve somente integrais Gaussianas, que podem ser resolvidas imediatamente, fornecendo:

$$\langle \vec{S}_0 \cdot \vec{S}_r \rangle \sim \exp[-(k_B T/2\pi J) \ln r] \sim |r|^{-k_B T/2\pi J}, \beta \gg 1 \quad (2.40)$$

A dependência em r é como lei de potência com o expoente $k_B T/2\pi J$. Este comportamento não ocorre apenas em uma temperatura crítica, mas para qualquer valor de temperatura baixa. O que ocorre é que a periodicidade da variável ϕ foi desprezada neste cálculo, e é esta periodicidade que leva a permitir a formação de vórtices.

A partir desse resultado conclui-se que o modelo planar nunca magnetiza. Isso acontece porque como $r \rightarrow \infty$ o valor esperado do produto de dois spins aproxima-se do produto do valor esperado de dois spins:

$$\langle \vec{S}_0 \cdot \vec{S}_r \rangle \approx \langle \vec{S}_0 \rangle \langle \vec{S}_r \rangle. \quad (2.41)$$

E a equação 2.40 se anula quando $r \rightarrow \infty$, então:

$$\langle \vec{S}_0 \rangle = 0. \quad (2.42)$$

Isso mostra que essa análise está de acordo com o teorema de Mermin e Wagner (1966). Nesse teorema afirma-se que sistemas bidimensionais com spins contínuos não apresentam quebra espontânea de simetria, ou seja, o sistema não passa de uma ordem de longo alcance para um sistema desordenado.

Contudo, observamos que a função de correlação muda o seu comportamento de lei de potência para exponencial. O comportamento como lei de potência é um comportamento característico de uma transição de fase. Dizemos que, neste caso, o modelo tem uma linha crítica, como representado na figura 2.4.

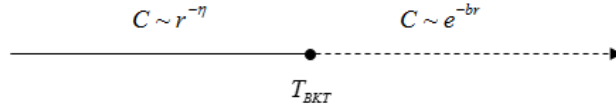


Figura 2.4: Desenho esquemático do comportamento da função de correlação em função da temperatura.

Korteliz e Thouless mostraram que, para uma determinada temperatura finita, existe uma transição de fase não usual em que configurações de vórtices exercem uma função essencial. A partir de $H = E_0 + \frac{J}{2} \int d^2r (\vec{\nabla}\phi(\vec{r}))^2$, estamos interessados em procurar soluções que satisfazem:

$$\frac{\delta H}{\delta \phi} = 0 \rightarrow \nabla^2 \phi(\vec{r}) = 0. \quad (2.43)$$

Existem duas soluções para esta equação. A primeira consiste no estado fundamental, $\phi(\vec{r}) = \text{constante}$. O segundo tipo de solução consiste de vórtices, e é obtida impondo a de condição de contorno na integral de $\phi(\vec{r})$. Para todo caminho fechado em torno do centro de um vórtice:

$$\oint \vec{\nabla}\phi(\vec{r}) \cdot d\vec{l} = 2\pi n, \quad (2.44)$$

para todos os caminhos fechados que não envolvem um vórtice:

$$\oint \vec{\nabla}\phi(\vec{r}) \cdot d\vec{l} = 0. \quad (2.45)$$

Na primeira solução a integral fechada deve ser igual a um inteiro multiplicado de 2π . O número n é chamado de vorticidade, e indica simplesmente quantas voltas completas são feitas para circular um vórtice. A partir disso, podemos entender que existem também os anti-vórtices, em que os spins apresentam a rotação no sentido oposto, neste caso a vorticidade será um inteiro negativo. Um vórtice (ou um anti-vórtice) é uma excitação topológica na qual os spins se arranjam como mostrado na figura, 2.5.

Podemos estimar a energia de um vórtice da seguinte maneira. Devido a simetria esférica do vórtice segue da equação 2.44 que $|\vec{\nabla}\phi(\vec{r})| = n/r$. Substituindo esse resultado no Hamiltoniano

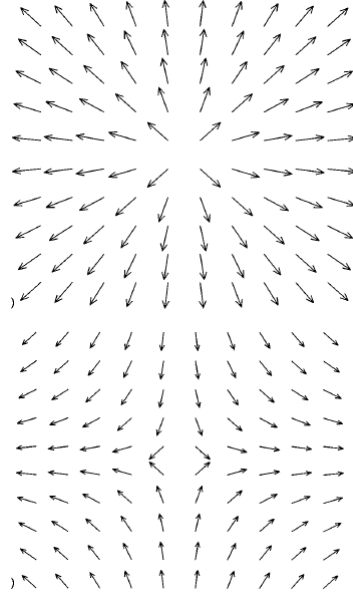


Figura 2.5: Visualização esquemática de um vórtice em cima, e um anti-vórtice em baixo.

da equação 2.38 teremos:

$$E_{vor} - E_0 = \frac{J}{2} \int d^2r \left(\frac{n}{r}\right)^2 = \pi n^2 J \ln \frac{L}{a} \quad (2.46)$$

onde L é o tamanho do sistema e a é o espaçamento de rede. Para sistemas grandes, a energia necessária para a criação de um único vórtice é muito grande.

Podemos entender a essência desse novo tipo de transição de fase topológica através de um simples argumento termodinâmico. Apesar da energia de um único vórtice divergir como $\ln L$, o mesmo não é verdade para um par vórtice-antivórtice, desde que eles possuam vorticidade total igual a zero. A energia necessária para criar um par é $E_{par} = J2\pi \ln(R/a)$ onde R é a separação entre os vórtices. Um par vórtice-antivórtice pode ser criado em uma fase de baixas temperaturas. A perspicácia da teoria de Kosterlitz e Thouless consiste em afirmar, que em uma certa temperatura T_{BKT} , os pares irão se desligar. Essa transição, devido ao mecanismo de desligamento dos pares, leva o sistema a uma fase de alta temperatura com decaimento exponencial nas correlações. Um argumento heurístico pode ser dado da seguinte maneira. Considere a energia livre do sistema, $F = E - TS$. A entropia pode ser estimada assumindo

que existem L^2/a^2 possíveis posições para um vórtice com área a^2 , assim, $S = k_B \ln(L^2/a^2)$. A energia livre de um vórtice é dada por:

$$F = E - TS = J\pi \ln \frac{L}{a} - Tk_B \ln \frac{L^2}{a^2} \quad (2.47)$$

onde k_b é a constante de Boltzmann. A energia livre será mínima, $F = 0$, se $E = TS$, logo, $T_{KT} = \pi J/2k_B$. Neste caso, a energia será balanceada pela entropia, então podemos esperar a transição para uma fase de vórtices “livres”. Na realidade o que ocorre é que um par de vórtices, que estão juntos para uma temperatura abaixo de T_{BKT} , desligam em T_{BKT} .

A teoria de Beresinskii-Kortelitz-Thouless descreve então uma transição de fase, que é caracterizada por uma mudança no comportamento da função de correlação spin-spin em uma temperatura finita, T_{BKT} ; para $T > T_{BKT}$ a função de correlação exibe um decaimento exponencial $C(r) \propto e^{r/\xi(T)}$, e para $T < T_{BKT}$, possui um decaimento como uma lei de potência, $C(r) \propto r^{-\eta(T)}$, com um ordenamento de quase-longo alcance. A magnetização, nesse modelo, é nula para qualquer temperatura diferente de zero, o que era completamente novo e inesperado.

O efeito da ativação térmica nos pares de vórtices é descrito através de uma função dependente da temperatura chamada de Módulo de Helicidade ou Stiffness, Υ . Esta função fornece uma medida da resistência do sistema, a uma torção das componentes planares dos spins. Para um giro Δ , a função é definida como:

$$\Upsilon = \frac{2}{N} \lim_{\Delta \rightarrow 0} \left(\frac{F(\Delta) - F(0)}{\Delta^2} \right) \quad (2.48)$$

onde N é o número de sítios da rede e $F(\Delta) - F(0)$ é o incremento na energia livre devido a uma rotação dos spins. Desta forma, aplicando a regra de L'Hôpital duas vezes à definição de Υ obtemos:

$$\Upsilon = \frac{1}{N} \left. \frac{\partial^2 F(\Delta)}{\partial \Delta^2} \right|_{\Delta=0} \quad (2.49)$$

Lembrando que a energia livre é dada por: $F = -k_B T \ln Z$, e a função de partição é definida como: $Z = \sum e^{-H/k_B T}$. O módulo de helicidade pode ser escrito em termos do Hamiltoniano

como:

$$N\Upsilon = \left\langle \frac{\partial^2 H}{\partial \Delta^2} \right\rangle - \beta \left[\left\langle \left(\frac{\partial H}{\partial \Delta} \right)^2 \right\rangle - \left\langle \frac{\partial H}{\partial \Delta} \right\rangle^2 \right], \quad (2.50)$$

onde $\beta = (k_B T)^{-1}$.

De acordo com o grupo de renormalização de Kosterlitz-Thouless [4], o módulo de helicidade salta de um valor finito, $(2/\pi)k_B T_c$, para zero na temperatura crítica, no limite termodinâmico. Esse salto é universal para todos os sistemas que possuem uma transição BKT. Desta forma, a partir da interseção de $\Upsilon(T)$ e a reta, $\Upsilon = (2/\pi)T$, pode ser estimado um limite superior para T_{BKT} .

Métodos de Simulação

3.1 Sistemas em Equilíbrio

Os sistemas em equilíbrio termodinâmico são caracterizados por parâmetros macroscópicos que não variam com o tempo. Nesta seção definiremos formalmente o estado de equilíbrio de um sistema. Suponha que o nosso sistema esteja no estado i , depois de um certo intervalo de tempo, este sistema pode ser encontrado em qualquer outro estado possível, j . A função, $W(i \rightarrow j)$, fornece a taxa de transição do estado i para o estado j . O tratamento estatístico se inicia, ao definirmos um conjunto de pesos, $p_i(t)$, que nos dá a probabilidade de encontrar o nosso sistema no estado i no tempo t . A equação master indica como a probabilidade $p_i(t)$ varia no tempo,[45]:

$$\frac{dp_i}{dt} = \sum_j [p_j(t)W(j \rightarrow i) - p_i(t)W(i \rightarrow j)], \quad (3.1)$$

esta equação indica que, a probabilidade de encontrar o sistema em uma dada configuração i , aumenta devido a transições de diferentes estados $j \rightarrow i$ e diminui quando as transições ocorrem no sentido inverso. As probabilidades devem obedecer a condição $\sum_j p_j(t) = 1$, pois o sistema deve sempre estar em algum estado.

As propriedades macroscópicas do sistema são obtidas calculando o seu valor médio, sobre todos os estados microscópicos acessíveis. Se estamos interessados na quantidade $\langle A \rangle$, que possui o valor A_j no estado j , definimos o valor esperado de A no tempo t como:

$$\langle A \rangle = \sum_j A_j p_j(t). \quad (3.2)$$

O sistema estará em equilíbrio se a taxa de variação no tempo de $p_i(t)$, na equação (3.1), for nula, $\frac{dp_i}{dt} = 0$. A consequência é que se $p_i(t)$ é constante no tempo, as propriedades termodinâmicas também são. Usaremos a técnica de Monte Carlo para simular estes estados de equilíbrio.

Em um sistema em equilíbrio térmico, com um reservatório a temperatura T (ensemble canônico), a probabilidade P_j de encontrar um sistema no estado j é dada por [50]:

$$P_j = \frac{e^{-\beta E_j}}{\sum_j e^{-\beta E_j}} \quad (3.3)$$

onde $\beta = (k_B T)^{-1}$, k_B é a constante de Boltzmann, T é a temperatura e E_j é a energia no estado j . O termo do denominador é definido como a função de partição, Z . A distribuição de probabilidades (3.3) é conhecida como distribuição de Boltzmann. Para calcular o valor esperado de um determinado observável A , de um sistema em equilíbrio, usa-se então:

$$\langle A \rangle = \frac{\sum_j A_j e^{-\beta E_j}}{\sum_j e^{-\beta E_j}}, \quad (3.4)$$

A soma envolve um número muito grande de termos, sendo, em geral, impossível de se obter analiticamente. Somente em alguns poucos casos, como, por exemplo, no modelo de Ising em $1D$ e $2D$ que soluções exatas são possíveis. Nos casos mais gerais aproximações analíticas e/ou métodos numéricos são necessários para extrair informações relevantes do modelo. Neste trabalho estamos interessados no uso de métodos numéricos.

3.2 O Método Monte Carlo

O método de Monte Carlo consiste em aproximar a soma sobre todos os estados acessíveis, por uma soma sobre um subconjunto destes estados escolhidos aleatoriamente [51]. O valor esperado de uma quantidade termodinâmica A , neste subconjunto é:

$$A_M = \frac{\sum_{j=1}^M A_j e^{-\beta E_j}}{\sum_{j=1}^M e^{-\beta E_j}} \quad (3.5)$$

Quanto maior o número de configurações M , mais próximo do valor exato, isto é, $M \rightarrow \infty$, $A_M = \langle A \rangle$. Entretanto, esse processo nos dá uma estimativa muito ruim da quantidade termodinâmica em questão, porque a maioria dos estados são fisicamente improváveis e contribuem muito pouco para a média, enquanto que, apenas um número pequeno de estados dão contribuições significativas. Um avanço no método consiste em escolher as configurações mais prováveis - “Importance sampling Monte Carlo”, para obtermos uma boa estimativa de $\langle A \rangle$. Portanto, é necessário distinguir quais são estes estados, escolhendo-os segundo uma distribuição de Boltzmann. O valor esperado é a média aritmética simples do seu valor sobre todas as configurações escolhidas, uma vez que já consideramos, de forma adequada, a contribuição de cada estado e a sua devida importância para os estados mais prováveis a uma dada temperatura.

Para fazer a escolha dos estados do sistema, percorremos as possíveis configurações seguindo uma cadeia de Markov. O processo consiste em fazer um caminho aleatório ao longo das configurações, em que a mudança de uma configuração i para uma outra j é governada por uma probabilidade de transição $W(i \rightarrow j)$, que não varia no tempo e que depende apenas dos estados i e j , e não de outros estados pelos quais o sistema tenha passado anteriormente. Assim, ao invés de fazer a escolha de configurações sucessivas independentes, criamos uma cadeia de Markov de configurações com uma probabilidade de transição tal que, quando $M \rightarrow \infty$ a função de distribuição de probabilidades p_i das configurações na cadeia, tende à distribuição de probabilidades de Boltzmann, P_i . A condição para chegarmos à distribuição de Boltzmann, quando o sistema alcançar o equilíbrio, é imposta pelo balanço detalhado [45]:

$$P_i W(i \rightarrow j) = P_j W(j \rightarrow i). \quad (3.6)$$

O balanço detalhado nos diz que, na média, o sistema irá efetuar uma transição do estado i para o estado j , com a mesma frequência que irá fazê-lo do estado j para o estado i . Assim, a partir da equação do balanço detalhado, temos que a razão entre as probabilidades de transição depende somente da diferença de energia entre as configurações:

$$\frac{W(i \rightarrow j)}{W(j \rightarrow i)} = \frac{p_j}{p_i} = e^{-\beta \Delta E_{ij}}, \quad (3.7)$$

onde $\Delta E_{ij} = E_j - E_i$.

Desde que a equação (3.7) não especifica $W(j \rightarrow i)$ de forma única, existe uma certa liberdade na sua escolha. A maneira de fazer a escolha dos estados do sistema foi feita nesse trabalho através de dois algoritmos, o algoritmo de Metrópolis e o algoritmo de Wang-Landau. Nas próximas seções trataremos detalhadamente dos dois tipos de algoritmos.

3.2.1 Algoritmo de Metrópolis

A escolha da probabilidade de transição que define o algoritmo de Metrópolis é,[52]:

$$W(i \rightarrow j) = \begin{cases} e^{-\beta \Delta E_{ij}}, & \text{se } E_j > E_i \\ 1, & \text{se } E_j < E_i \end{cases} \quad (3.8)$$

Esta probabilidade de transição satisfaz a condição do balanço detalhado. Nessa escolha, para qualquer i , $W(j \rightarrow i)$ será sempre positivo. Então a ergodicidade é garantida, pois existirá sempre uma probabilidade diferente de zero para alcançar qualquer configuração possível. Se as condições de balanço detalhado e de ergodicidade são satisfeitas, então a distribuição dos estados no equilíbrio do processo de Markov será a distribuição de Boltzmann.

O algoritmo baseado nesta escolha, pode ser descrito da seguinte forma:

1. Escolha uma configuração inicial, i , e calcule a energia correspondente a esta configuração, E_i ;
2. Escolha um sítio da rede (de forma aleatória ou sequencial) e proponha uma nova direção (aleatória) para o seu spin;
3. Calcule a energia do novo estado, E_j , a diferença $\Delta E = E_j - E_i$ e faça o teste:
 - se $\Delta E \leq 0$ aceite a troca de j por i ;
 - se $\Delta E > 0$ aceite a troca com probabilidade $e^{-\beta \Delta E}$
4. Retorne ao passo 2 e repita o procedimento.

5. Pare quando o critério de equilíbrio for atingido.

A configuração inicial, i , em geral, não está em equilíbrio com o banho térmico. Então, é proposta uma nova configuração, por meio da escolha aleatória de uma nova direção para um dos spins da rede. Calcula-se as energias correspondentes às duas configurações e é feita a comparação entre elas, $\Delta E = E_j - E_i$. Se a energia do novo estado for menor, aceita-se a nova configuração, caso contrário, a nova configuração só é aceita com probabilidade $p = e^{-\beta\Delta E}$. Isto é feito gerando um número aleatório r escolhido entre 0 e 1. Se $r < p$, a alteração proposta para o spin é aceita; se $r > p$ a nova configuração é descartada. O processo é repetido até que o sistema entre em equilíbrio. Quando todos os sítios da rede são visitados dizemos que foi dado um passo de Monte Carlo, esta é a medida de tempo de simulação. Uma vez que o sistema está em equilíbrio, podemos iniciar o cálculo das médias. A partir deste momento qualquer configuração gerada pelo processo acima será uma configuração de equilíbrio à temperatura T .

3.2.2 Algoritmo de Wang-Landau: técnicas de histogramas

O algoritmo de Wang-Landau (WL) foi introduzido no ano de 2001 como uma tecnologia poderosa e relativamente simples, usada para fazer o cálculo estimado da densidade de estados $g(E_i)$ de um sistema físico,[43, 53, 54]. Uma vez que diferentes microestados podem ter a mesma energia E_i , podemos agrupar todos estes microestados com a mesma energia e escrever a função de partição de uma forma alternativa como na expressão a seguir:

$$Z = \sum_j e^{-\beta E_j} = \sum_{E_i} g(E_i) e^{-\beta E_i} \quad (3.9)$$

sendo $g(E_i)$ o número de microestados do sistema com energia E_i . O somatório sobre todos os microestados j , acessíveis ao sistema, é substituído por um somatório sobre todos os valores de energias possíveis. A função de partição não foi alterada quando passamos para este novo formato. A probabilidade de obtermos um estado de energia E_i e temperatura T , é então dada por:

$$P_E = \frac{g(E_i)e^{-\beta E_i}}{Z}. \quad (3.10)$$

Uma vez estimada a densidade de estados, médias dependentes da energia podem ser calculadas como antes. A vantagem deste método é que, a função densidade de estados $g(E_i)$, é independente da temperatura. Assim, se $g(E_i)$ é conhecido, podemos obter a resposta do sistema para qualquer T .

A simulação começa inicializando $g(E)$. O mais simples é escolher $g(E_i) = 1$ para todo E . Este valor inicial é um “chute” para começarmos o caminho aleatório no espaço das energias. Um histograma $H(E_i)$ é usado como controle, a fim de sabermos o número de visitas que se faz a cada valor de energia. Inicialmente $H(E_i) = 0$. Os vetores de spin dos sítios da rede são escolhidos aleatoriamente e, para um determinado estado i , a energia E_i do sistema é calculada. Um novo valor para o vetor de spin de um dos sítios da rede é proposto, e a nova energia E_j é calculada. A probabilidade de transição do estado i para o estado j é dada, no algoritmo de WL, através de uma nova função de probabilidades dada por:

$$W(i \rightarrow j) = \begin{cases} \frac{g(E_i)}{g(E_j)}, & \text{se } g(E_j) > g(E_i) \\ 1, & \text{se } g(E_j) < g(E_i) \end{cases} \quad (3.11)$$

Para obtermos a função de densidade de estados, o algoritmo procede como segue:

1. Inicialmente adote $g(E) = 1$ e $H(E) = 0$;
2. Escolha uma configuração inicial, i , e calcule a energia correspondente a esta configuração, E_i ;
3. Escolha um sítio da rede (de forma aleatória ou sequencial) e proponha uma nova direção (aleatória) para o seu spin;
4. Calcule a energia do novo estado, E_j , faça o teste:
 - se $g(E_i) \geq g(E_j)$ aceite a troca de j por i ;
 - se $g(E_i) < g(E_j)$ aceite a troca com probabilidade $\frac{g(E_i)}{g(E_j)}$
5. Atualize os histogramas $g(E)$ e $H(E)$;

6. Retorne ao passo 3 e repita o procedimento.
7. Ao atingir o critério de flatness faça $H(E) = 0$ e troque $f' \rightarrow \sqrt{f}$
8. Retorne ao passo 2 até que $f' = f_{final}$.

O movimento de MC da energia E_i para a energia E_j deve ser aceito ou rejeitado pela probabilidade dada pela equação 3.11. Se $g(E_i) \geq g(E_j)$ a troca é aceita, caso contrário, a nova configuração só é aceita com probabilidade $p = \frac{g(E_i)}{g(E_j)}$, desta forma, um número aleatório, $0 < r < 1$, é gerado, e se $r < p$ é feita a troca. Em seguida, os histogramas $g(E)$ e $H(E)$ são modificados. As alterações nas funções $g(E_j)$ e $H(E_j)$ acontecem toda vez que a energia E_j for contemplada. Se a mudança de E_i para E_j não for aceita as funções $g(E_i)$ e $H(E_i)$ que são alteradas. Estas alterações acontecem da seguinte maneira:

$$g(E_i) = g(E_i) \times f \quad (3.12)$$

$$H(E_i) = H(E_i) + 1 \quad (3.13)$$

O caminho aleatório através do espaço das energias é realizado, para um valor fixo de f , até alcançarmos a convergência de $H(E)$ (critério de *flatness*). A convergência é alcançada se, em um intervalo de energia (E_{min}, E_{max}) , todos os valores de energia já foram visitados um número aproximadamente igual de vezes, de modo que, a função $H(E)$ tenha uma variância pequena em torno da sua média. A fim de estimar corretamente o $g(E)$, o fator f , que inicialmente vale $f_0 = e^1$, deve ser reduzido até um valor determinado ($f \approx 1, 0$). O fator f é reduzido como segue:

$$f_{i+1} = \sqrt{f_i}, \quad (3.14)$$

Após um valor fixo de passos de MC, o histograma $H(E)$ é monitorado. Para uma variância suficientemente pequena, fator f é reduzido e $H(E_i)$ recebe, novamente, o valor zero para todo E_i . O processo é todo refeito para o novo valor de f até que a variância da função $H(E_i)$ se torne pequena novamente e f ser novamente reduzido.

A densidade de estados $g(E_i)$ varia exponencialmente com E_i , sendo conveniente usar

$\ln[g(E_i)]$ ao invés de $g(E_i)$. Dessa forma, toda vez que a energia E_i for contemplada a função vai ser alterada da forma:

$$\ln[g(E_i)] = \ln[g(E_i)] + \ln[f], \quad (3.15)$$

e o fator f como $\ln[f_{i+1}] = \ln[f_i]/2$. Um valor inicial típico é $f_0 = e^1$ ou $\ln[f_0] = 1$. Nas nossas simulações este valor foi reduzido até 10^{-9} com um critério de flatness da ordem de 10^{-3} em torno da sua média. A probabilidade de transição é agora baseada no inverso da densidade de estados corrente, $1/g(E)$. O procedimento descrito acima, não satisfaz a condição de balanço detalhado antes do final da simulação, já que $g(E)$ está sujeito a mudanças enquanto o fator f for grande. Entretanto, como f é reduzido, e a estimativa de $g(E)$ se aproxima do valor exato, o sistema passa a representar uma solução para a condição de balanço detalhado no final da simulação. Uma vez que $g(E)$ foi estimado podemos calcular a média de qualquer quantidade termodinâmica para vários valores de temperatura usando:

$$\langle A \rangle = \frac{\sum_E A(E)g(E)e^{-\beta E}}{Z} \quad (3.16)$$

Utilizamos esse procedimento para calcularmos a média da energia do sistema, a magnetização, a média da densidade de vórtices e antivórtices, a função de correlação e o módulo de helicidade.

3.2.3 Método Replica-Exchange Wang-Landau

Nas simulações de WL realizadas para o nosso modelo, encontramos dificuldades em alcançar as regiões de baixas energias. Nessas regiões não obtivemos bons resultados no cálculo das quantidades termodinâmicas de interesse. Dessa maneira, optamos por fazer a paralelização na nossa simulação de WL juntamente com a técnica de replica-exchange [55]. No algoritmo de WL, como vimos, uma densidade de estados, $g(E)$, desconhecida é determinada, dentro de um intervalo de energia, (E_{min}, E_{max}) , fazendo um simples caminho aleatório no espaço de energias, e escolhendo configurações com probabilidade $1/g(E)$. No algoritmo de WL paralelo com replica-exchange, iniciamos dividindo o intervalo de energia em subintervalos menores, porém, com grande superposição entre os vizinhos. Em cada subintervalo de energia, vários caminhos

de WL são realizados. A grande vantagem desse método é que troca de configurações são permitidas entre as janelas vizinhas de energia que estão sobrepostas, durante o curso da simulação. O intervalo de energia total é subdividido em h janelas, com m caminhos aleatórios em cada uma. Os intervalos consecutivos devem se sobrepor para que as trocas de configurações sejam permitidas, veja a figura 3.1.

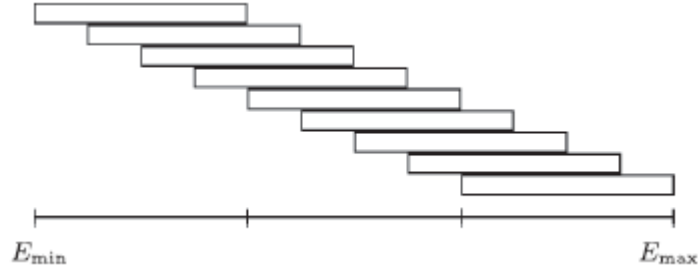


Figura 3.1: O intervalo de energia total dividido em janelas que se sobrepõem em 75%. Vários caminhos de WL são realizados em cada janela.

A superposição entre os intervalos vizinhos não pode ser muito grande e nem pequena demais, de forma que haja um balanceamento entre a rápida convergência para o $g(E)$ e uma razoável taxa de aceitação de troca de configurações. Usamos uma superposição de 75% nas nossas simulações. Dentro de cada janela de energia, são feitos m caminhos aleatórios de WL independentes. Depois de um certo número de passos de Monte Carlo é proposta a troca de configurações entre dois caminhos aleatórios, i e j , de forma que i , que pertence a uma janela, já foi escolhido como o parceiro de j , que pertence à janela vizinha, aleatoriamente. Sejam X e Y configurações que os caminhos aleatórios i e j tinham antes da troca e $E(X)$ e $E(Y)$ suas respectivas energias. Motivados pelo balanço detalhado, a probabilidade de aceitação para a mudança entre as configurações X e Y entre os caminhos i e j é:

$$P_{ac} = \min\left[1, \frac{g_i(E(X)) g_j(E(Y))}{g_i(E(Y)) g_j(E(X))}\right] \quad (3.17)$$

onde $g_i(E(X))$ é a densidade de estados instantânea para o caminho i na energia $E(X)$. Cada caminho aleatório é constituído do seu próprio $g(E)$ e $H(E)$ que são construídos de forma independente, obedecendo o critério de flatness em cada interação. Quando todos os caminhos

aleatórios de uma determinada janela alcançam, de forma independente, o critério de flatness, é feita a média da estimativa de cada um para o $g(E)$ e esse valor médio é redistribuído para todos, antes da próxima interação. A simulação termina quando todos os intervalos de energia alcançam o f_{final} . No final da simulação temos $h \times m$ pedaços de $g(E)$ com superposição dos intervalos de energia, que são usados para calcular um único $g(E)$ para todo o intervalo. No processo de construção do $g(E)$ final é escolhido um ponto entre quaisquer dois intervalos vizinhos que se sobrepõem. A escolha desse ponto é feita onde o inverso da temperatura microcanônica $\beta = \frac{d \log[g(E)]}{dE}$ melhor se coincidem. Assim, este ponto fica sendo o limite onde termina o $g(E)$ de um vizinho e onde começa o do outro. Após a construção do histograma $g(E)$, podemos obter qualquer quantidade termodinâmica que é função somente da energia, como, por exemplo, o calor específico. Se desejamos obter uma quantidade termodinâmica independente da energia, como a magnetização ou o módulo de helicidade, devemos construir outros histogramas, durante o curso da simulação, correspondente a cada quantidade. Se a quantidade desejada for $\langle A \rangle$, por exemplo, devemos criar um $A(E)$, que corresponde a soma dos valores da quantidade A para uma dada energia, E . No final do cálculo, fazemos a média desses valores para uma dada energia, $\langle A(E) \rangle$, isto é feito facilmente dividindo $A(E)$ pelo número de vezes que esta energia foi acessada. A quantidade $\langle A \rangle$ é calculada através da expressão:

$$\langle A \rangle = \frac{\sum_E \langle A(E) \rangle g(E) e^{-\beta E}}{Z}. \quad (3.18)$$

Resultados

4.1 O Modelo de Heisenberg Anisotrópico em duas dimensões

Definimos o modelo de Heisenberg Anisotrópico (HA) em uma rede quadrada de dimensão linear L , como na figura 4.1. Cada sítio da rede recebe um vetor de spin $O(3)$, de módulo $|\vec{S}_i| = 1$, e a sua projeção no plano xy está representada na figura como setas em vermelho. O vetor pode ser parametrizado pelos ângulos esféricos como: $\vec{S}_i \equiv \text{sen}\Theta_i \cos\Phi_i \hat{i} + \text{sen}\Theta_i \text{sen}\Phi_i \hat{j} + \cos\Theta_i \hat{k}$.

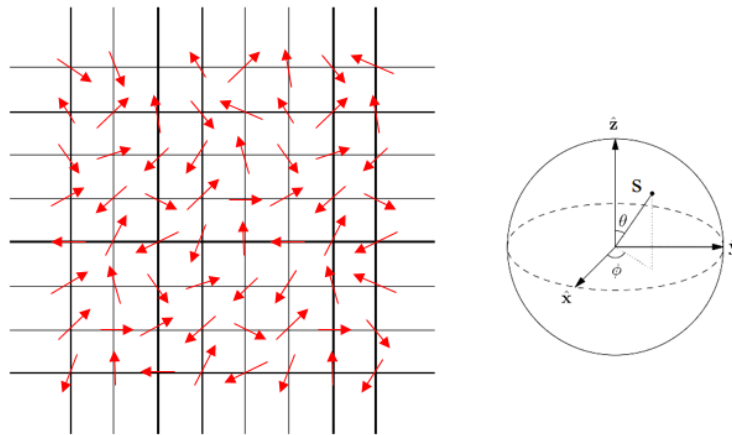


Figura 4.1: Representação de uma rede quadrada em que os spins receberam uma orientação aleatória e o vetor de spin representado através dos ângulos esféricos.

O hamiltoniano para esse modelo com uma anisotropia planar A , ao longo de z , é escrito

da forma:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} [\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - AS_i^z S_j^z] \quad (4.1)$$

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \text{sen}\Theta_i \text{sen}\Theta_j \cos(\Phi_i - \Phi_j) + (1 - A) \cos\Theta_i \cos\Theta_j.$$

Se fizermos $A = 1$ espera-se que o ângulo polar irá flutuar em torno de $\theta \approx \pi/2$ para temperaturas moderadas. Iremos mostrar analiticamente que, no limite contínuo, o hamiltoniano de (HA) possui apenas dependência azimutal, e que a função de partição para este modelo é a mesma do modelo XY a menos de uma constante. O modelo XY em duas dimensões, possui a transição *BKT*, [4],[7],[58], e é definido pelo hamiltoniano:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \cos(\Phi_i - \Phi_j). \quad (4.2)$$

No modelo *XY*, os spins possuem dois graus de liberdade, $\vec{S}_i = \cos(\phi)\hat{i} + \text{sen}(\phi)\hat{j}$, enquanto que no modelo de Heisenberg anisotrópico, os spins possuem três, permitindo flutuações fora do plano. Entretanto, apesar da entropia adicional do modelo *HA*, a seguir, mostraremos argumentos de que este modelo deve pertencer a mesma classe de universalidade do modelo *XY*.

Na equação 4.1, a anisotropia, A , obriga o ângulo polar flutuar em torno de $\Theta \approx \pi/2 + \theta$, com $\theta \ll 1$. Se considerarmos que os spins variam linearmente entre primeiros vizinhos, de (i, j) para $(i \pm 1, j)$ e $(i, j \pm 1)$, uma aproximação contínua pode ser obtida pela expansão dos ângulos esféricos. Consideremos que o sistema é definido em uma rede quadrada com espaçamento de rede a . Substituiremos as variáveis discretas (i, j) por variáveis contínuas (x, y) e ao final dos cálculos tomamos o limite $a \rightarrow 0$. Os ângulos polares podem ser expandidos, numa série de Taylor, como:

$$\Theta_{i\pm 1, j} = \Theta_{x\pm a, y} = \Theta(x, y) \pm a \frac{\partial \Theta}{\partial x} + \frac{a^2}{2} \frac{\partial^2 \Theta}{\partial x^2} + O(a^3), \quad (4.3)$$

$$\Theta_{i, j\pm 1} = \Theta_{x, y\pm a} = \Theta(x, y) \pm a \frac{\partial \Theta}{\partial y} + \frac{a^2}{2} \frac{\partial^2 \Theta}{\partial y^2} + O(a^3). \quad (4.4)$$

Expandindo os senos e os cossenos até ordem a^3 obtemos:

$$\text{sen}(\Theta_{i\pm 1,j}) = \text{sen}\Theta \pm a \frac{\partial\Theta}{\partial x} \cos\Theta - \frac{a^2}{2} \left(\frac{\partial\Theta}{\partial x}\right)^2 \text{sen}\Theta \pm \frac{a^2}{2} \frac{\partial^2\Theta}{\partial x^2} \cos\Theta + O(a^3), \quad (4.5)$$

$$\text{sen}(\Theta_{i,j\pm 1}) = \text{sen}\Theta \pm a \frac{\partial\Theta}{\partial y} \cos\Theta - \frac{a^2}{2} \left(\frac{\partial\Theta}{\partial y}\right)^2 \text{sen}\Theta \pm \frac{a^2}{2} \frac{\partial^2\Theta}{\partial y^2} \cos\Theta + O(a^3), \quad (4.6)$$

$$\cos(\Theta_{i\pm 1,j}) = \cos\Theta \mp a \frac{\partial\Theta}{\partial x} \text{sen}\Theta - \frac{a^2}{2} \left(\frac{\partial\Theta}{\partial x}\right)^2 \cos\Theta \mp \frac{a^2}{2} \frac{\partial^2\Theta}{\partial x^2} \text{sen}\Theta + O(a^3), \quad (4.7)$$

$$\cos(\Theta_{i,j\pm 1}) = \cos\Theta \mp a \frac{\partial\Theta}{\partial y} \text{sen}\Theta - \frac{a^2}{2} \left(\frac{\partial\Theta}{\partial y}\right)^2 \cos\Theta \mp \frac{a^2}{2} \frac{\partial^2\Theta}{\partial y^2} \text{sen}\Theta + O(a^3). \quad (4.8)$$

Fazendo de modo semelhante para $\Phi_{i,j}$, temos:

$$\cos(\Phi_{i,j} - \Phi_{i\pm 1,j}) = 1 - \frac{a^2}{2} \left(\frac{\partial\Phi}{\partial x} + O(a^3)\right)^2 \quad (4.9)$$

e

$$\cos(\Phi_{i,j} - \Phi_{i,j\pm 1}) = 1 - \frac{a^2}{2} \left(\frac{\partial\Phi}{\partial y} + O(a^3)\right)^2 \quad (4.10)$$

onde Θ e Φ são notações mais curtas para $\Theta(x, y)$ e $\Phi(x, y)$, respectivamente. Substituindo estas aproximações no Hamiltoniano de Heisenberg e tomando $A = 1$ e $\Theta = \pi/2$, obtemos:

$$H_{HA}^{cont} = -J \int d\mu \left\{ 1 - \frac{a^2}{2} \left[\left(\frac{\partial\Phi}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial\Phi}{\partial y}\right)^2 \right] \right\} [4 + O(a^3)]. \quad (4.11)$$

Eliminando as constantes que não são importantes e desprezando os termos de ordem mais alta, obtemos:

$$H_{HA}^{cont} = -2J \int d\mu \left[\left(\frac{\partial\Phi}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial\Phi}{\partial y}\right)^2 \right]. \quad (4.12)$$

onde $d\mu \equiv d\Phi_1 d\Phi_2 \dots d\Phi_n d\Theta_1 d\Theta_2 \dots d\Theta_n$. Este resultado mostra que, com esta aproximação, obtemos um Hamiltoniano com dependência apenas azimutal, que corresponde à versão contínua do hamiltoniano do modelo XY dado na equação 4.2. A função de partição para os modelos XY e Heisenberg anisotrópico são iguais a menos de uma constante multiplicativa:

$$Z_{HA} = \int d\mu e^{-J \sum_{\langle i,j \rangle} \cos(\phi_i - \phi_j)}. \quad (4.13)$$

As integrais em Θ , devido às flutuações fora do plano, podem ser feitas imediatamente, de modo que as médias das quantidades termodinâmicas não dependem de Θ . Isto mostra que para uma grande anisotropia fora do plano e no limite contínuo os modelos são equivalentes. Esperamos que a temperatura de transição *BKT* seja menor no modelo de *HA*, devido a entropia adicional.

Nós estamos interessados em estudar o modelo *HA* puro e diluído, isto é, quando um certo número de sítios é não magnético. Em nossas simulações foram utilizadas redes quadradas, bidimensionais de tamanhos $L = 20, 40, 60, 80, 100$ e 200 e condições de contorno periódicas. As simulações foram feitas usando o algoritmo de Wang-Landau. Para obtermos qualidade nos resultados para baixas temperaturas, usamos o método Replica Exchange Wang-Landau - REWL, que foi desenvolvido por Thomas Vogel e colaboradores [55]. O método consiste em dividir a região de energia possível em janelas menores, que se sobrepõem nas vizinhanças, e fazer simulações em paralelo para cada feixe individual. A vantagem é que trocas de configurações são permitidas nas interseções entre as janelas. A energia, o calor específico, a magnetização planar, o Cumulante de Binder de quarta ordem, a susceptibilidade magnética, o módulo de helicidade e as correlações são apresentadas como resultado das médias sobre várias simulações, com as respectivas barras de erros.

As quantidades termodinâmicas foram calculadas usando as expressões que seguem:

- Energia:

$$E = \frac{\langle H \rangle}{N} \quad (4.14)$$

onde N é o número de spins e H é dado pela equação 4.1.

- Calor específico:

$$c = \frac{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2}{k_B N T} \quad (4.15)$$

onde k_B é a constante de Boltzmann, que tomamos como $k_B = 1$, daqui em diante.

- Magnetização:

$$M_{xy} = \frac{\langle m \rangle}{N}, \quad (4.16)$$

onde

$$m = \sqrt{\left(\sum_{i=1}^N S_i^x\right)^2 + \left(\sum_{i=1}^N S_i^y\right)^2}. \quad (4.17)$$

- Cumulante de Binder de quarta ordem:

$$U_4 = 1 - \frac{\langle M^4 \rangle}{3 \langle M^2 \rangle^2}. \quad (4.18)$$

- Susceptibilidade Magnética:

$$\chi = \frac{\langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2}{k_B N T}. \quad (4.19)$$

Para uma transição BKT as quantidades definidas acima apresentam um comportamento parecido com a transição ordem-desordem para redes de tamanho pequeno [9]. Porém no limite termodinâmico, não existe magnetização espontânea, o calor específico é não-crítico e as curvas do Cumulante de Binder coincidem na região crítica.

Seguindo ainda o panorama das transições de fase *BKT*, sabemos que o comprimento de correlação, ξ , deve ser finito para $T > T_{BKT}$ e infinito para $T = T_{BKT}$. Em $T \leq T_{BKT}$, a correlação possui um comportamento de lei de potência, $\Gamma(r) \propto r^{-\eta}$, com $\eta = 1/4$ em $T = T_{BKT}$, em que $r \equiv |i - j|$. Como o sistema é finito, esperamos um comportamento híbrido nas duas regiões, não sendo completamente exponencial nem por lei de potência. Em virtude disso, usamos a expressão de Ornstein-Zernick [10], para ajustar nossos dados:

$$\Gamma(r) = A r^{-\eta} e^{-r/\xi}. \quad (4.20)$$

Em nossos gráficos as barras de erros são menores que os pontos quando não mencionadas explicitamente.

4.2 Modelo Puro

Na figura 4.2, é mostrada a energia como função da temperatura, para vários tamanhos de rede. Uma amplificação da região de inflexão também pode ser vista. Podemos observar que

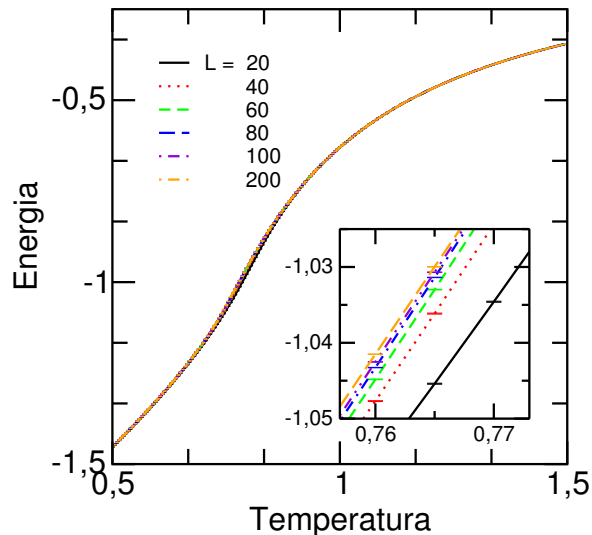


Figura 4.2: Energia em função da temperatura para vários tamanhos de rede.

para $L > 20$ as curvas possuem comportamento similar, este fato já antecipa o comportamento do calor específico, que é não crítico na transição BKT, já que esta quantidade é calculada pelas flutuações da energia. Na figura 4.3, o calor específico do sistema está representado como função da temperatura, o qual apresenta um pico em temperaturas acima de T_{BKT} . Estes picos, com exceção da menor rede ($L = 20$), se coincidem dentro das barras de erros, ou seja, não mostra nenhuma propriedade crítica do sistema. Isto reflete uma transição na classe de universalidade *BKT*. Em contraste, por exemplo, com o caso das transições de fase de primeira ordem e as transições de fase contínuas, em que o calor específico diverge na temperatura de transição no limite termodinâmico.

A magnetização planar, M , deve ser nula para qualquer temperatura finita numa transição *BKT*, porém, é possível verificarmos esse efeito, somente se o sistema for muito grande. Na figura 4.4 é apresentado o comportamento da magnetização planar em função da temperatura.

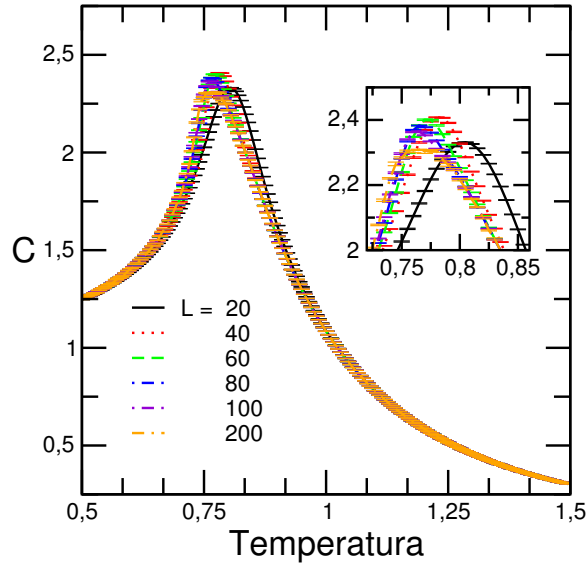


Figura 4.3: Calor específico em função da temperatura para vários tamanhos de rede.

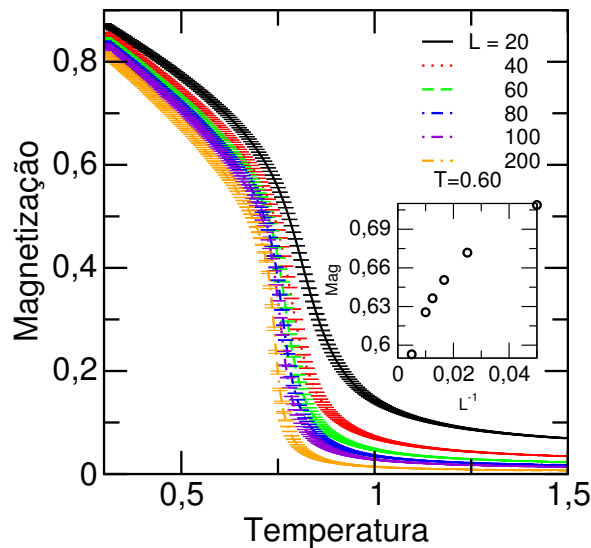


Figura 4.4: Magnetização em função da temperatura para vários tamanhos de rede. O *inset* mostra como se comporta a magnetização com o aumento do tamanho da rede.

Observamos que com o aumento do tamanho da rede a magnetização decai mais rapidamente. No *inset* é mostrado o comportamento típico para uma dada temperatura. Aqui, escolhemos $T = 0.60$, abaixo da temperatura esperada para a transição *BKT*. Espera-se que para $L \rightarrow \infty$, $M \rightarrow 0$. Em redes pequenas, a magnetização possui valores não nulos, este fato

pode levar a classificação errônea desta transição, pois pode ser facilmente confundida com uma contínua ou crítica. Em transições da classe de universalidade BKT , a magnetização não é um parâmetro de ordem.

O cumulante de Binder possui uma interseção na temperatura crítica em um modelo que apresenta transição ordem-desordem. No caso de uma transição BKT , toda região abaixo da temperatura T_{BKT} é crítica, logo é esperado que todas as curvas, para diferentes valores de L , irão coincidir para L suficientemente grande. Assim, a interseção entre diferentes curvas, nos dá um falso ponto crítico, e como consequência uma falsa temperatura crítica, apesar de ser próxima da T_{BKT} . Na figura 4.5, mostramos esse comportamento. Um zoom na região onde existe o colapso das curvas também é mostrado. A interseção ocorre apenas com a rede menor, todas as outras se interseptam dentro das barras de erros, como esperado.

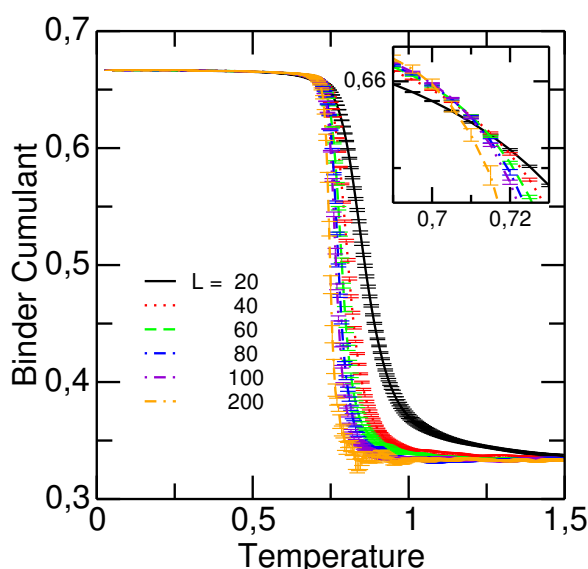


Figura 4.5: Cumulante de Binder em função da temperatura. Exceto para $L = 20$, todos os pontos coincidem dentro das barras de erros.

O calor específico, a magnetização e o cumulante de Binder não são quantidades confiáveis para determinar o valor de T_{BKT} , segundo Minnhagen uma das quantidades a ser analisada para tal, é o módulo de helicidade. Esta quantidade fornece a resposta do sistema a uma torção dos spins na fronteira da rede. Como já dito anteriormente, para um sistema infinito, esta

grandeza apresenta um salto de um valor finito, $(2/\pi)T_{BKT}$, para zero na temperatura crítica [4]. Assim, pode ser estimado, a partir da interseção de $\Upsilon(T)$ e a linha, $\Upsilon = (2/\pi)T$, um limite superior para T_{BKT} , como apresentado na figura 4.6. A interseção de Υ com a reta $(2/\pi)T$ para o maior tamanho de rede ocorre em $T = 0,702(1)$, logo essa é uma estimativa superior que temos para T_{BKT} .

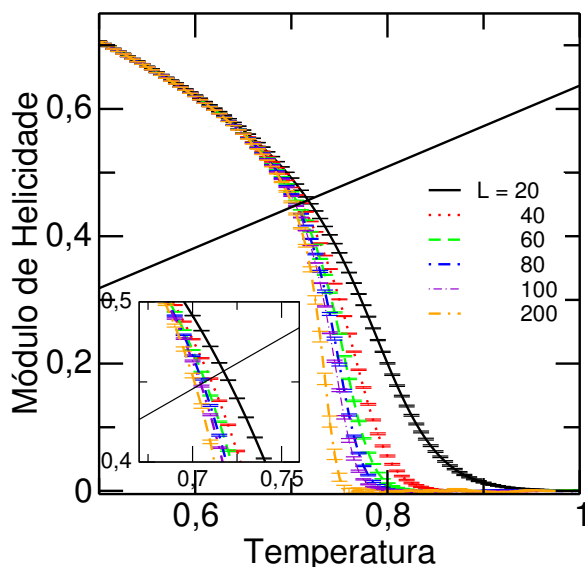


Figura 4.6: Módulo de Helicidade em função da temperatura para vários tamanhos de rede.

No limite termodinâmico, a susceptibilidade é infinita em T_{BKT} . Na equação 4.19 o termo $\langle m \rangle^2 \rightarrow 0$, quando $L \rightarrow \infty$, desaparecendo assim o pico que é característico apenas em transições de primeira ordem e contínuas. Para sistemas finitos, ela se comporta como $\chi \propto L^{2-\eta}$, em que η é o expoente do comprimento de correlação que vale $1/4$ na temperatura BKT . Na figura 4.7, temos $\chi L^{2-\eta}$ como função da temperatura para vários tamanhos de rede. As curvas de interceptam em T_{BKT}^x , como esperado para uma transição BKT .

A temperatura crítica foi estimada fazendo a análise do *Finite Size Scaling - FSS* para o calor específico, o cumulante de Binder, o módulo de Helicidade e a susceptibilidade. De fato, como mostrado no capítulo 2, esperamos que os valores de temperatura onde ocorrem os picos do calor específico e as interseções das curvas do cumulante de Binder, do módulo de Helicidade

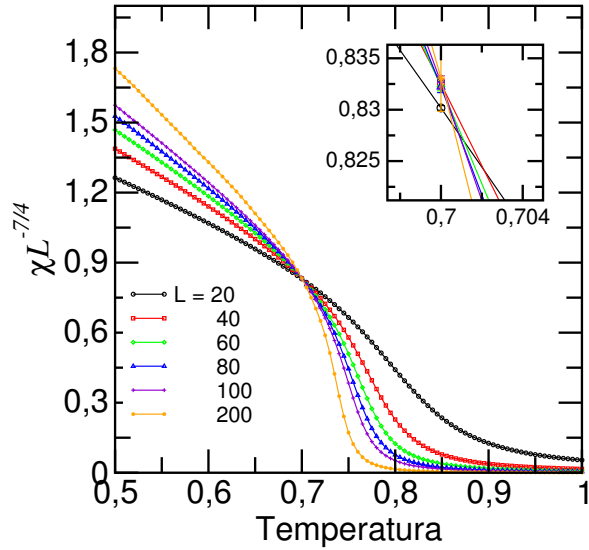


Figura 4.7: Susceptibilidade vezes $L^{-7/4}$ em função da temperatura.

e da susceptibilidade se comportem como $T_c(L) = T_\infty + a'(\ln L)^{-2}$. A temperatura, $T(L)$, foi plotada como função de $(\ln L)^{-2}$ (figura 4.8). As linhas foram obtidas através de uma regressão linear para cada conjunto de dados. A interseção em $L = 0$ nos dá a respectiva estimativa de cada função no limite termodinâmico.

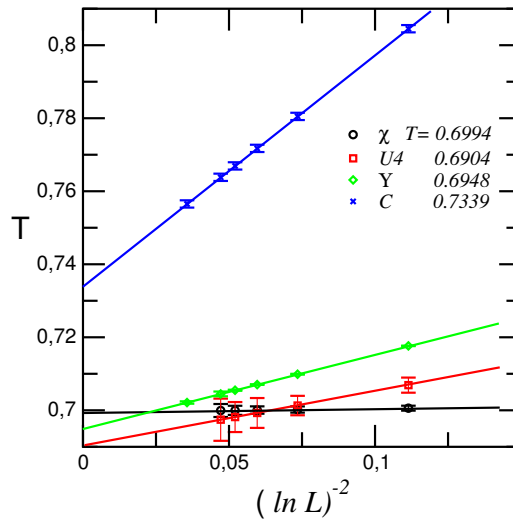


Figura 4.8: Temperatura crítica, $T(L)$, como função da função de escala $\ln(L)^{-2}$ para várias quantidades. A interseção em $L = 0$ nos dá a respectiva estimativa de cada função no limite termodinâmico.

Na figura 4.9, mostramos o comportamento do inverso do comprimento de correlação ξ^{-1} em função da temperatura para vários valores de L . Esta quantidade está presente na equação 4.20. Observa-se que ξ^{-1} vai para zero de forma mais consistente com o aumento da rede para $T \leq T_{BKT}$.

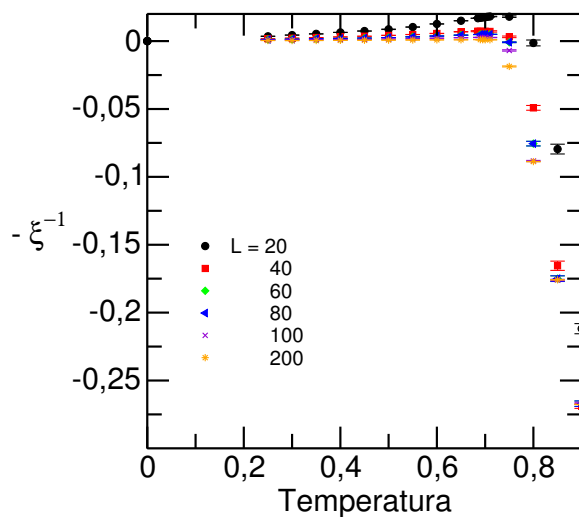


Figura 4.9: O inverso do comprimento de correlação em função da temperatura para vários tamanhos de rede.

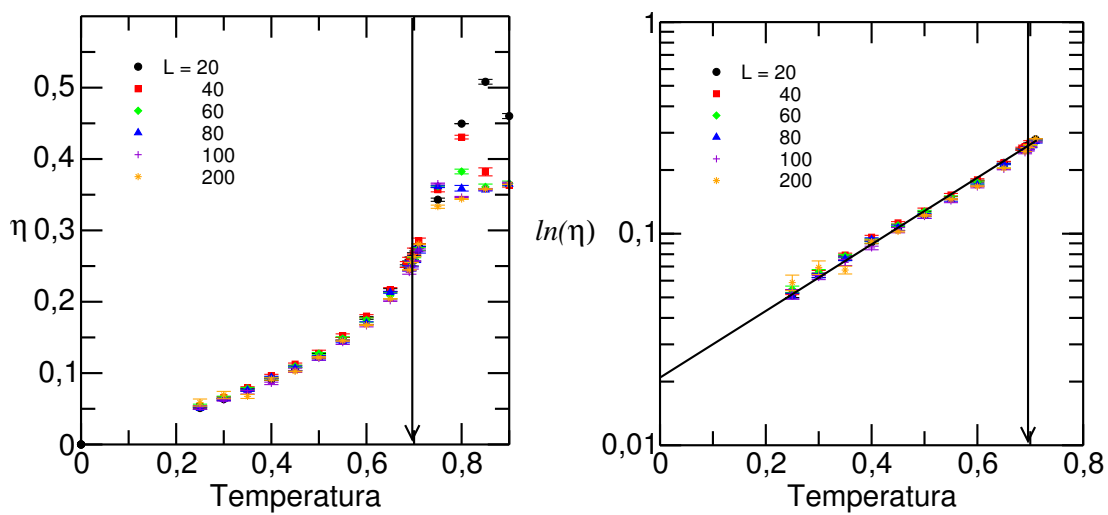


Figura 4.10: À esquerda, o expoente do comprimento de correlação, η , e à direita o logaritmo de η , em função da temperatura para vários tamanhos de rede.

Na figura 4.10, está representado o expoente η como função da temperatura. Os valores de η são coincidentes, dentro das barras de erros, para todos os tamanhos de redes. A temperatura BKT é estimada pela média dos valores de $T_{BKT}^\eta(L)$ em $\eta = 1/4$, assim obtemos $T_{BKT}^\eta = 0,6999(10)$. Os resultados são consistentes com um comportamento exponencial, $\eta \propto \exp^{\zeta T}$, com $\zeta = 3, 5$, nessa região de temperatura.

4.3 Modelo Diluído

Nesta seção, apresentaremos os resultados obtidos ao incluir aleatoriamente sítios não magnéticos na rede. O nosso interesse é saber o efeito que a diluição provoca na transição. Já é conhecido que os vórtices não se movimentam através da rede por longas distâncias [57]. Sabe-se também que os vórtices são atraídos e ancorados pelos sítios não magnéticos [38]. Isso significa que uma eventual dinâmica do sistema será severamente suprimida pela presença das vacâncias. Além disso, a energia dos vórtices diminui na presença dos sítios não magnéticos, logo, o aumento da diluição, faz aumentar o número de vórtices e, portanto, a desordem do sistema. O efeito esperado é a diminuição da temperatura de transição. Desta forma, se faz necessário verificar, se com a presença de vacâncias, a transição ainda se mantém na mesma classe de universalidade BKT. Verificamos o comportamento da temperatura de transição e dos expoentes críticos com o aumento da diluição.

Nas nossas simulações, os sítios não magnéticos foram aleatoriamente distribuídos na rede, para uma dada concentração p . Calculamos a média da energia, do calor específico, da magnetização, da susceptibilidade, do cumulante de Binder, do módulo de Helicidade e da função de correlação spin-spin para as concentrações $p = 0, 20; 0, 30; 0, 35$. As simulações tornam-se mais difíceis para altas diluições.

O hamiltoniano do modelo HA está representado na equação (4.1). Nesta expressão, os sítios estão 100% preenchidos com spins magnéticos. Para representarmos um hamiltoniano no qual a variável de spin pode ou não ser preenchida com um spin magnético, o reescrevemos da maneira como segue:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} [\varepsilon_i \varepsilon_j (\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - AS_i^z S_j^z)] \quad (4.21)$$

onde ε_k assume o valor 0 se o sítio é não magnético ou 1 para um sítio magnético. Na rede quadrada, os sítios não magnéticos são distribuídos aleatoriamente conforme uma determinada concentração, que denominamos como p .

4.3.1 Percolação

Para compreender o modelo diluído fazemos uma pequena digressão em percolação. Iniciamos com a definição de cluster. Definimos um cluster como um grupo de sítios da rede conectados a um primeiro vizinho, um sítio isolado forma um cluster unitário. Os sítios vizinhos são agrupados em “clusters”. Quando um cluster se estende de um lado a outro da rede, dizemos que esse cluster *percola* [59]. Se, no sistema, não existir nenhum cluster que percola, não irá haver transições de fase, pois todos os clusters terão tamanho finito. Inicialmente, fizemos um estudo para determinar em qual concentração p irá existir pelo menos um cluster que percola. A essa concentração é denominada de *limiar de percolação*, p_c . O resultado para a rede quadrada, com diluição por sítios já é conhecido a bastante tempo [60]. Os sítios magnéticos foram escolhidos aleatoriamente e foi feita a contagem do número de clusters que percolam para cada concentração p . Nós usamos 4×10^2 configurações, para redes de tamanho $L = 40, 50, 60, 80, 100$. O resultado está representado na figura 4.11.

O gráfico da figura 4.11 é importante pois define o limiar de percolação. Verifica-se que para uma densidade de sítios magnéticos maior que 0,59 pelo menos um cluster percola. Conseqüentemente o estudo de transições de fase no modelo HA deve ser feito para redes que apresentam concentrações de sítios magnéticos maiores que o limiar de percolação. Analisamos o tamanho médio dos clusters e o número médio de clusters em função da densidade de sítios magnéticos, figura 4.12 . Em ambos os casos, os sítios magnéticos foram escolhidos aleatoriamente para uma dada concentração, em seguida é feita a contagem do número de clusters e quantos sítios existem em cada um.

Na medida em que a densidade dos sítios magnéticos aumenta, os clusters isolados se unem

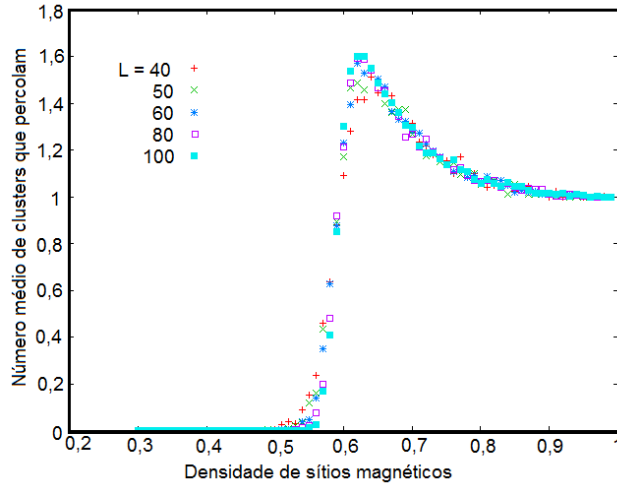


Figura 4.11: Número de clusters que percolam em função da densidade de sítios magnéticos.

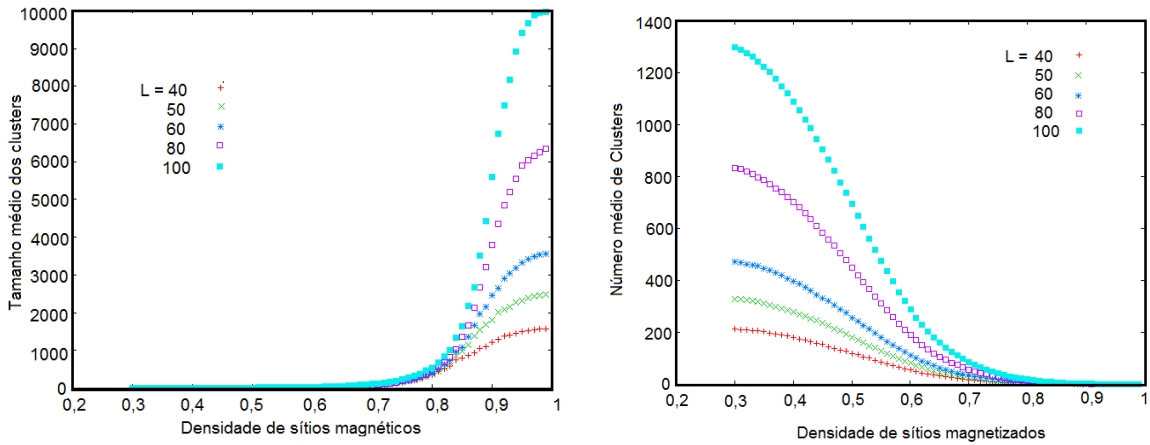


Figura 4.12: À esquerda, o tamanho médio dos clusters em função da densidade de sítios magnéticos; e à direita o número médio de clusters que percolam em função da densidade de sítios magnéticos.

e ficam maiores, logo o número de clusters diminui e o seu tamanho médio aumenta.

4.3.2 Estudo do modelo HA para vários valores de diluição

Nesta seção, fizemos uma análise semelhante a feita na seção anterior para o modelo HA com $p = 0,0$; porém agora, para três concentrações de sítios não magnéticos: $p = 0,20, 0,30$ e $0,35$. Na medida em que a diluição aumenta, as simulações se tornam mais difíceis. Para uma

dada configuração de sítios, calculamos a média $\langle A \rangle_i$, onde $\langle \rangle$ é a média termodinâmica sobre aquela distribuição. O aumento da diluição faz com que tenhamos um número maior de distribuições possíveis, desse modo temos que fazer várias médias sobre as distribuições de modo que a média final é:

$$\langle A \rangle = \frac{1}{N_c} \sum_i \langle A \rangle_i = \frac{1}{N_c} \sum_i \left\{ \frac{\sum_j A_j e^{-\beta E}}{Z_i} \right\} \quad (4.22)$$

onde N_c é o número de distribuições para uma dada concentração p . Este tipo de média é chamada de “annealed”[59].

A seguir, apresentamos os resultados para a média de cada quantidade, com as respectivas barras de erros.

Na figura 4.13, apresentamos a energia em função da temperatura, para os três valores de diluição. O cálculo da energia foi feito através da equação (4.14). Através do *inset* no gráfico da energia, observamos que as curvas se coincidem dentro das barras de erros, exceto para rede $L = 20$, o que antecipa o comportamento não crítico do calor específico, que é mostrado na figura 4.14. Os picos de C também são coincidentes dentro das barras de erros, exceto para a rede $L = 20$. Com esses resultados observamos o comportamento não crítico do calor específico, assim como no caso não diluído. Indicando que não existe transição ordem-desordem para esse modelo.

A seguir, figura 4.15, apresentamos os resultados para a magnetização, que calculamos através da equação (4.16). Observamos que a magnetização por spin decresce rapidamente com o aumento do tamanho da rede, comportamento evidenciado também no *inset*. Portanto a tendência para esse sistema é que $m \rightarrow 0$, se $L \rightarrow \infty$, como no modelo puro. Isto demonstra a nossa previsão de que, no modelo diluído, a transição é da classe de universalidade BKT , pois não existe parâmetro de ordem. Alguma magnetização é observada devido às redes serem de tamanho finito.

O valor de temperatura em que as curvas se interceptam, no gráfico da susceptibilidade vezes $L^{-7/4}$, é T_{BKT} . Essa é a primeira estimativa que fizemos para a temperatura de transição de fase para as três diluições. O resultado está representado na figura 4.16. Verificamos que o valor

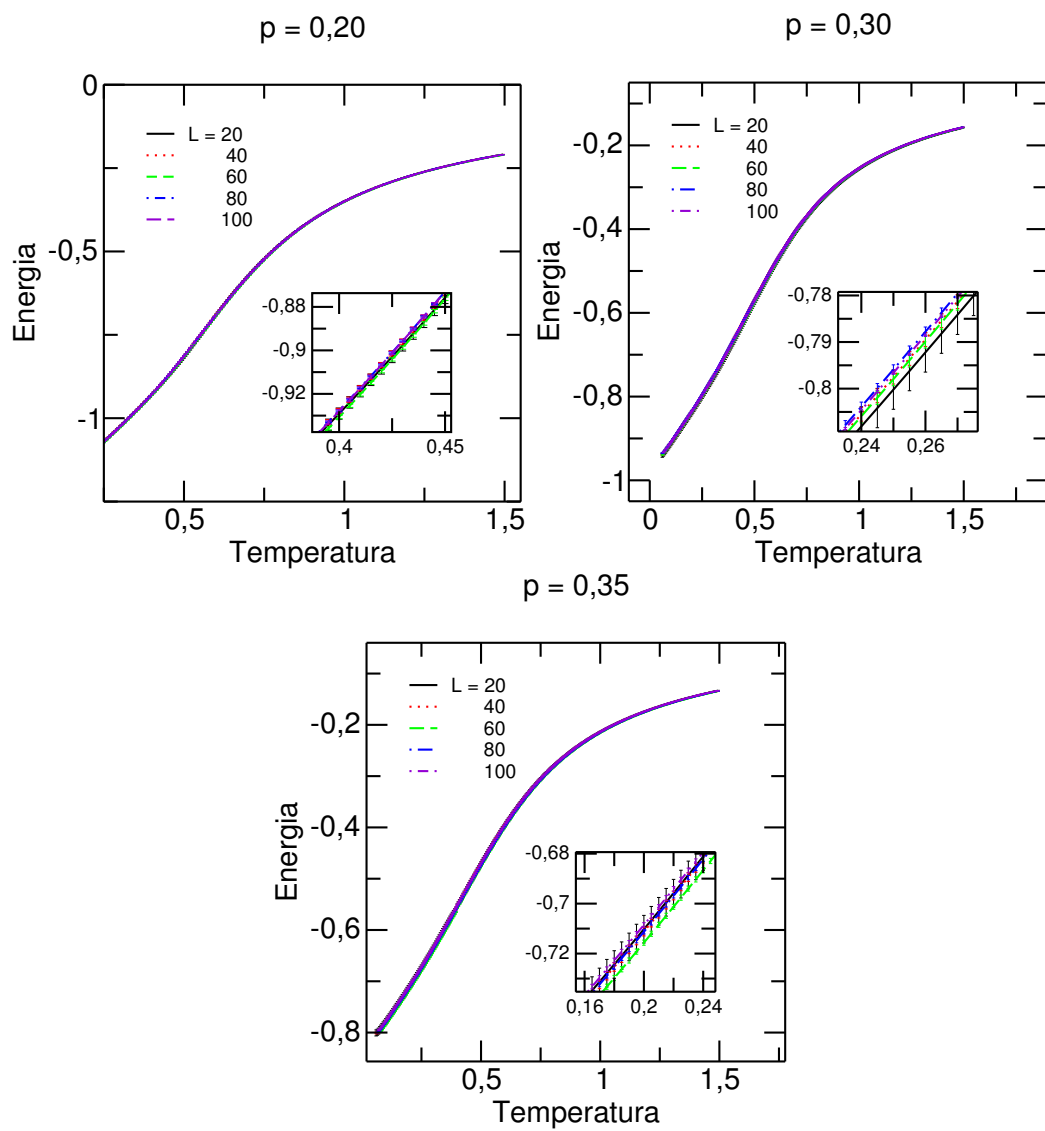


Figura 4.13: A energia em função da temperatura para os três valores de diluição.

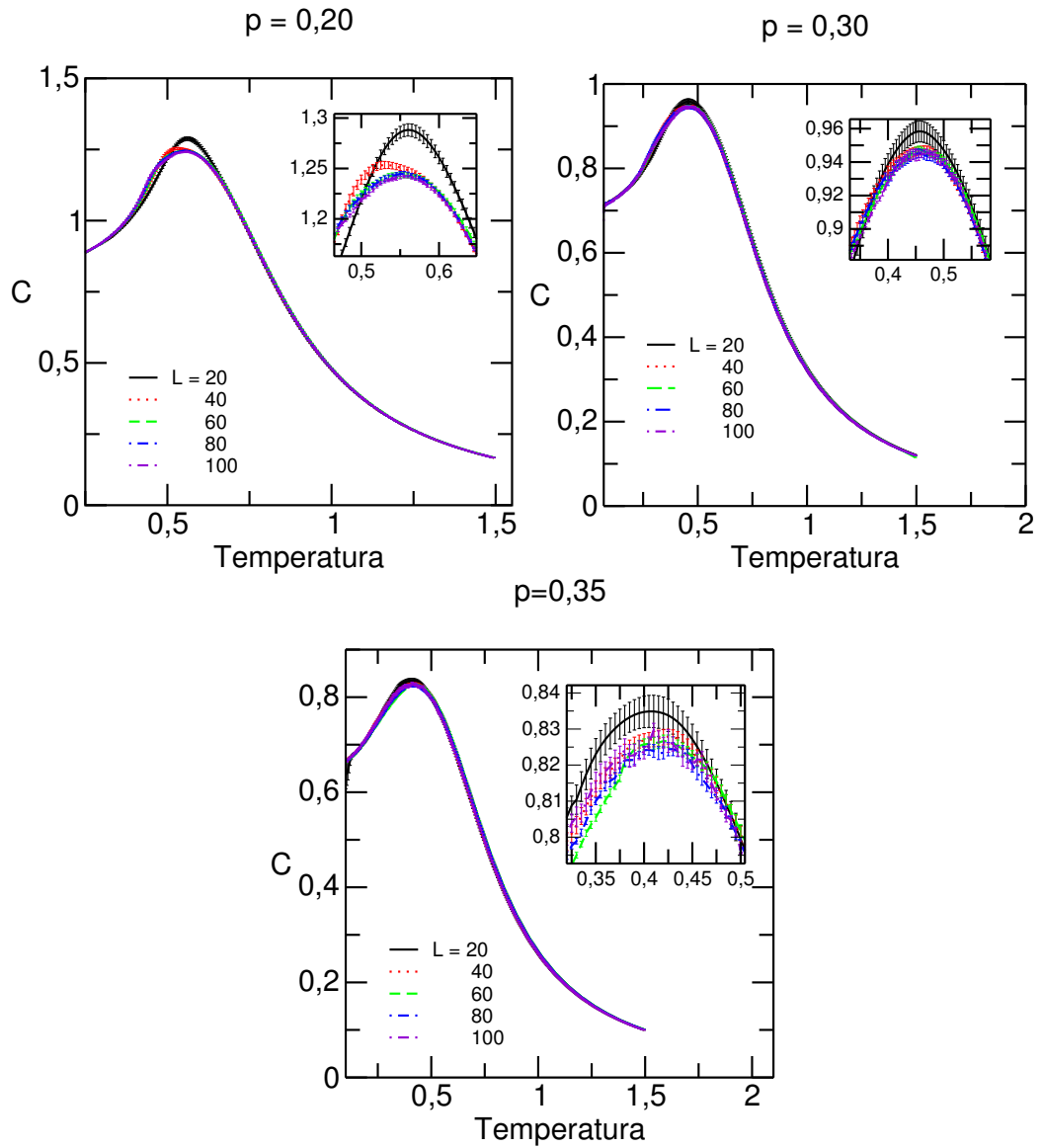


Figura 4.14: O calor específico em função da temperatura para os três valores de diluição.

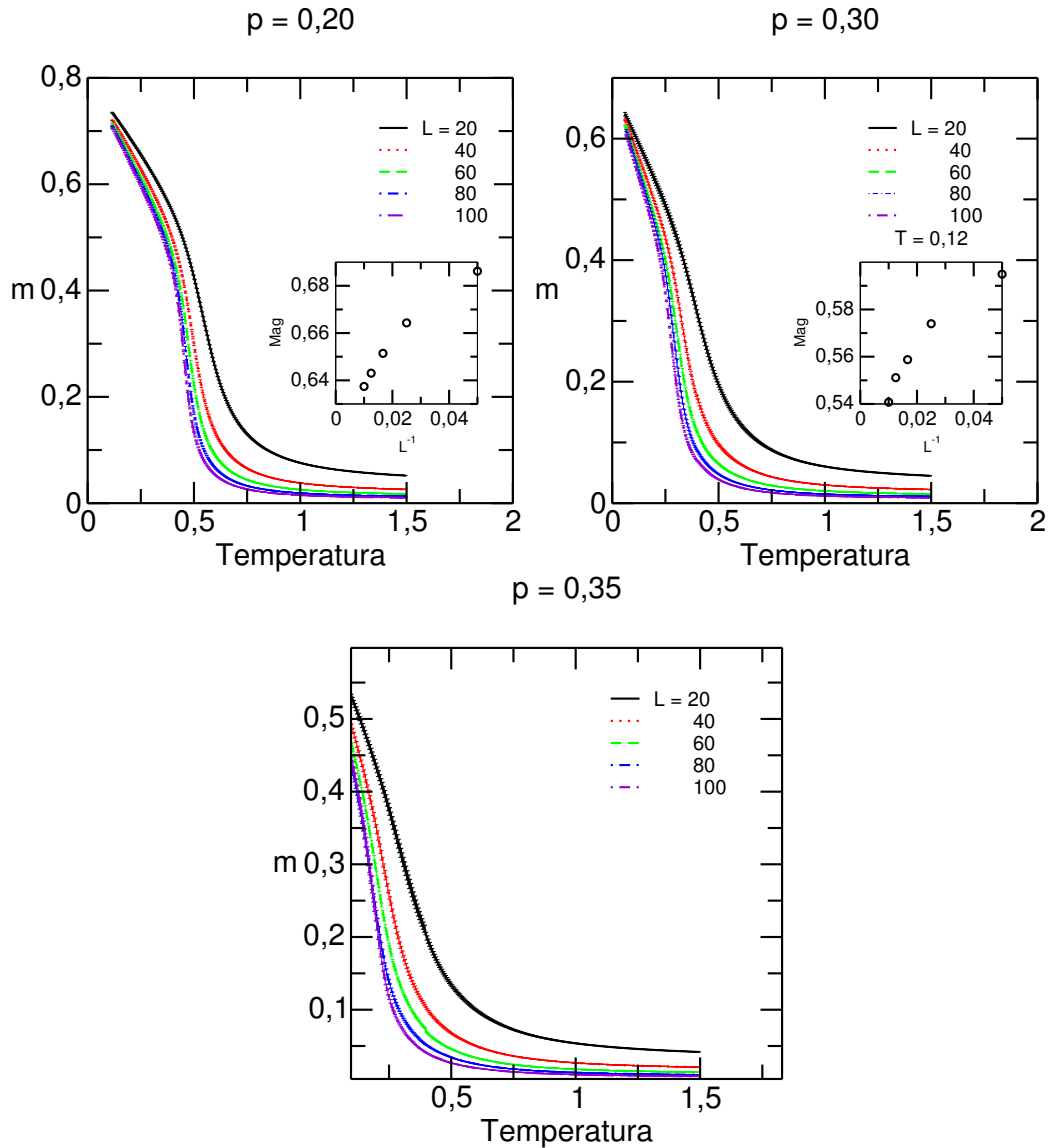


Figura 4.15: A magnetização em função da temperatura para os três valores de diluição.

de temperatura, onde as curvas se cruzam, diminui com o aumento da diluição, indicando que a presença de impurezas aumenta a desordem do sistema e diminui a temperatura de transição, este é um comportamento que esperávamos.

O Cumulante de Binder, calculado através da equação (4.18), está representado na figura 4.17, em função da temperatura. Esta quantidade é independente do tamanho do sistema na temperatura crítica, porém, a transição de fase *BKT*, é caracterizada por uma linha crítica em

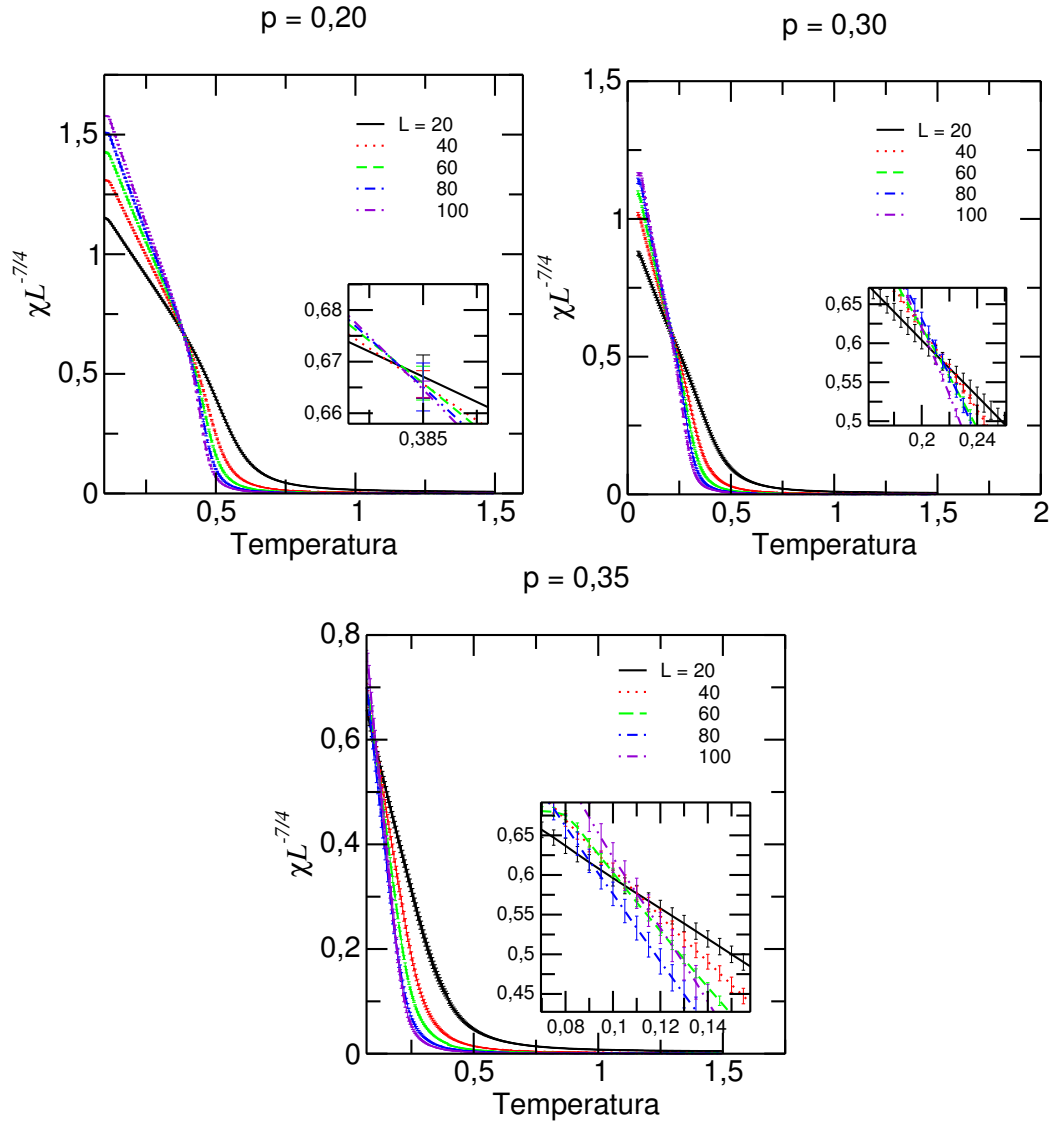


Figura 4.16: A susceptibilidade em função da temperatura para os três valores de diluição.

$T < T_{BKT}$. Podemos ver esse comportamento no gráfico, para baixas temperaturas as curvas se coincidem, dentro das barras de erros, exceto para $L = 20$. Assim, podemos prever, que o valor de T para o qual as curvas se interceptam não nos dará uma estimativa confiável para T_{BKT} .

A temperatura de transição T_{BKT} foi estimada através do módulo de helicidade. Apresentamos o resultado do cálculo dessa quantidade para a rede diluída na figura 4.18. Os pontos de interceção com a reta $\Upsilon = (2/\pi)T$ nos dá o valor de $T_{BKT}(L)$. Esta quantidade é muito sensível

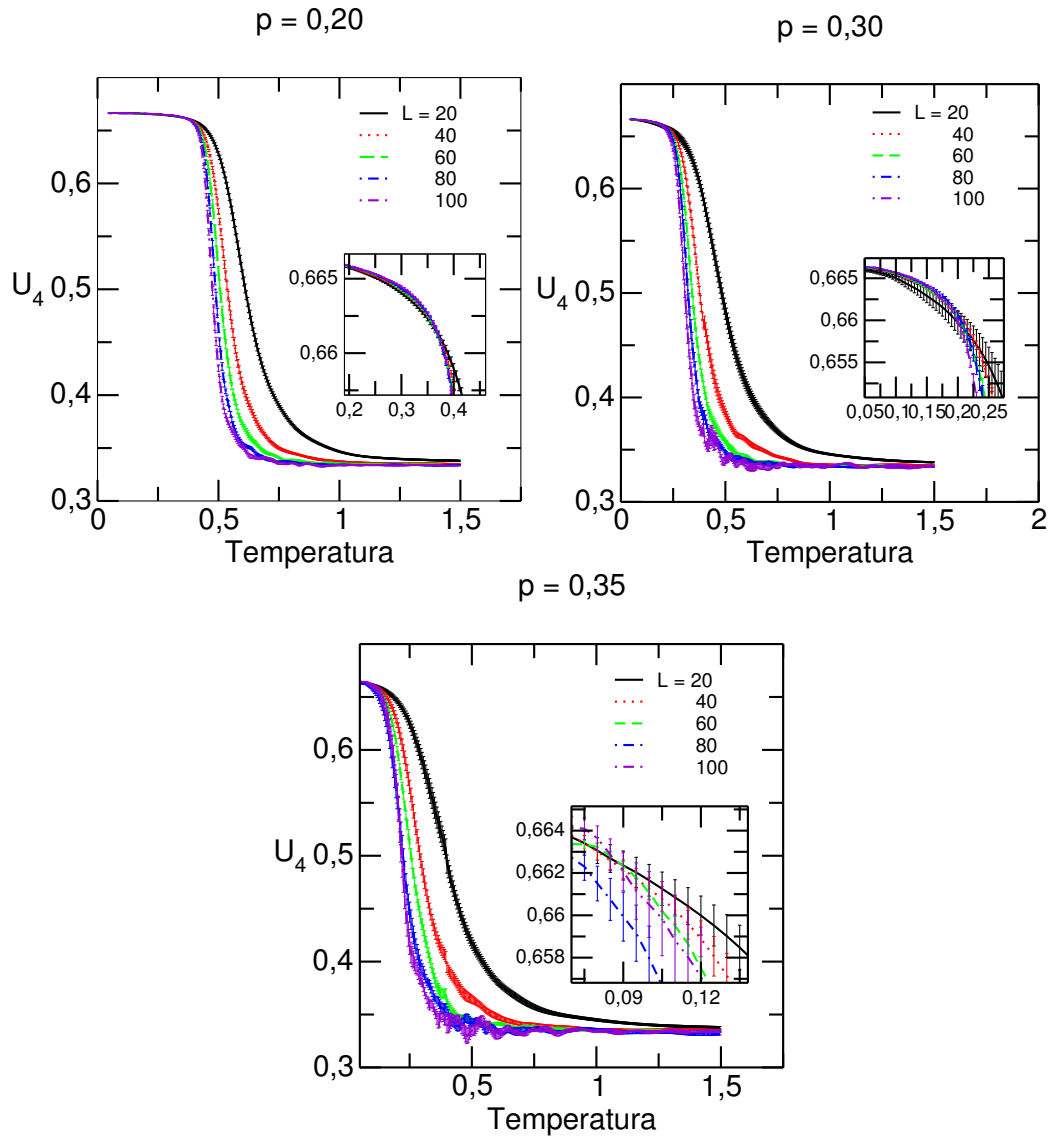


Figura 4.17: O Cumulante de Binder em função da temperatura para os três valores de diluição.

à diluição. Podemos observar que as barras de erro aumentam se p aumenta, a solução é obter o valor do módulo de helicidade sobre um número maior de distribuições para melhorarmos as médias. Para estimarmos o valor de $T_{BKT}(\infty)$, através dessa quantidade, fizemos a análise do FSS, que está apresentado na figura 4.19.

A análise do FSS foi feita também para os picos do calor específico, para as interseções das curvas do cumulante de Binder e para as interseções das curvas da susceptibilidade magnética

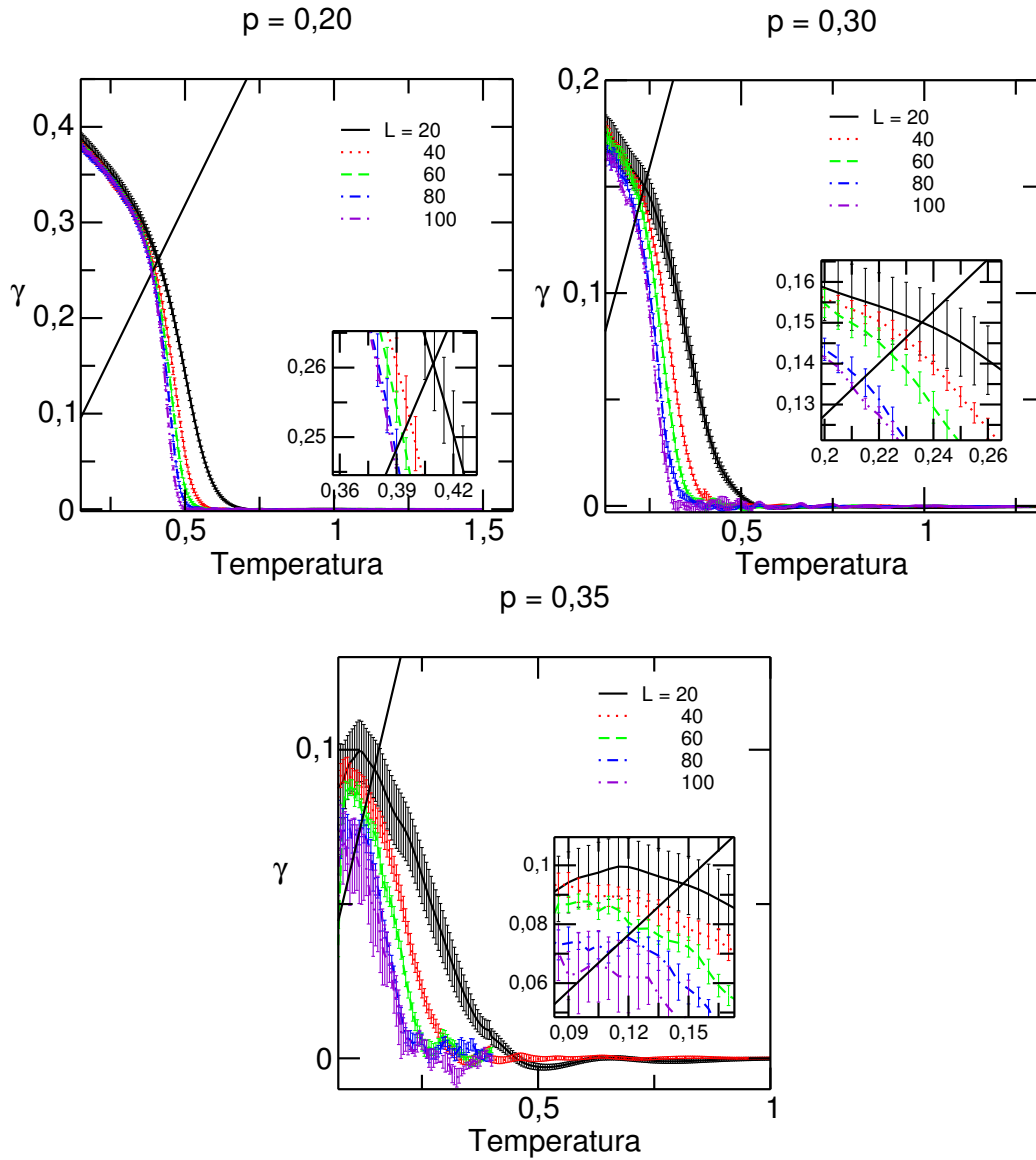


Figura 4.18: O Módulo de Helicidade em função da temperatura para os três valores de diluição.

multiplicada por $L^{-7/4}$, nas diluições $p = 0,20$ e $p = 0,30$, todos os resultados estão apresentados na figura 4.19, juntamente com as estimativas da temperatura de transição de fase de cada quantidade. Para $p = 0,35$, fizemos a análise do FSS apenas para o módulo de helicidade e a susceptibilidade magnética.

Calculamos a função de correlação spin-spin para o modelo diluído. Como o sistema é finito, esperamos que esta função terá um comportamento híbrido, isto é, lei de potência e

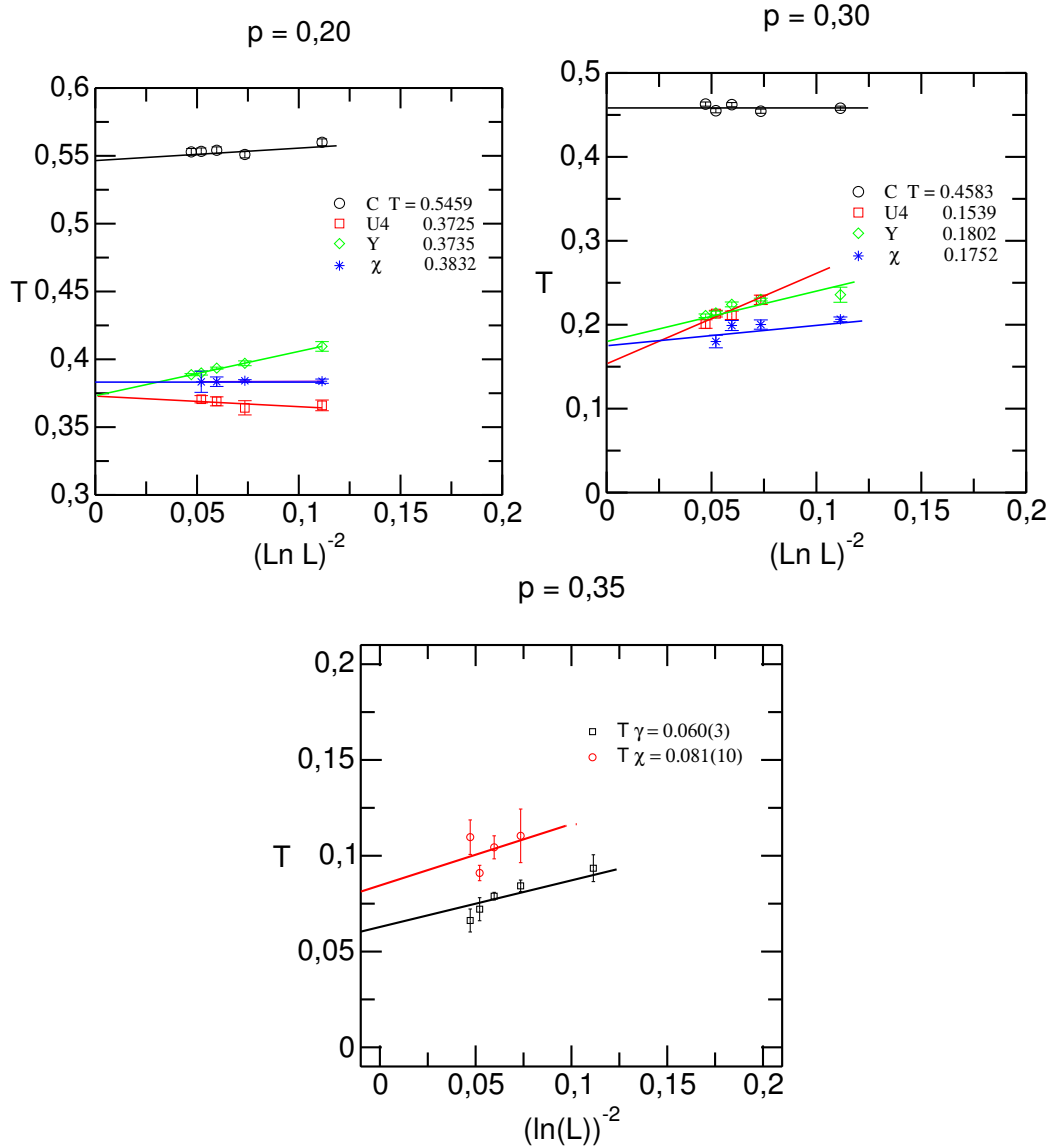


Figura 4.19: Temperatura crítica, $T(L)$, como função da função de escala $\ln(L)^{-2}$ para várias quantidades. A interseção em $L = 0$ nos dá a respectiva estimativa de cada função no limite termodinâmico.

exponencial. Assim fizemos o ajuste dos parâmetros A , η e ξ da equação 4.20, que traduz esse tipo de comportamento. Na figura 4.20, está representado como o inverso do comprimento de correlação, ξ^{-1} , varia com a temperatura. Podemos conferir que abaixo da temperatura crítica ele tende a zero mais fortemente com o aumento da rede.

Na figura 4.21 está representado o expoente η como função da temperatura. Os valores de

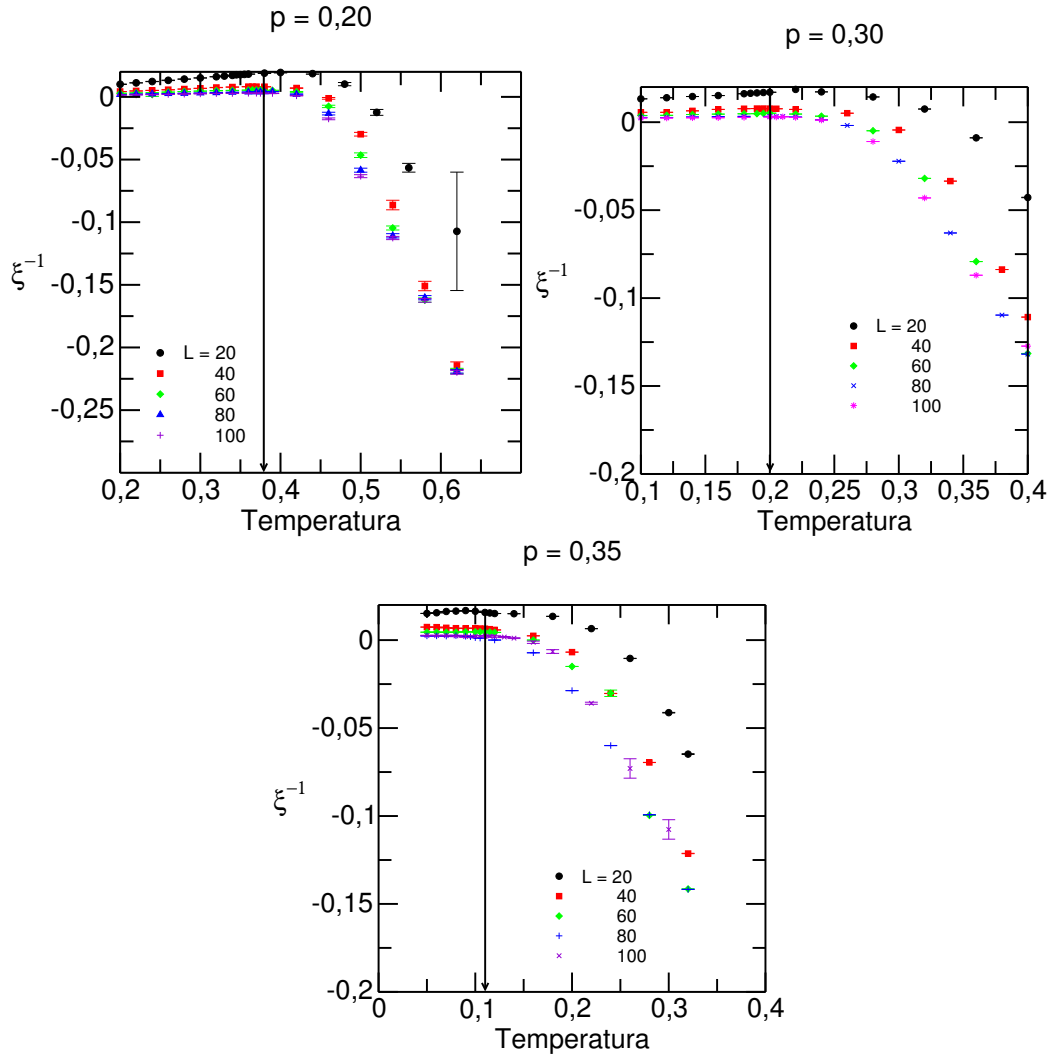


Figura 4.20: O inverso do comprimento de correlação em função da temperatura para os três valores de diluição.

η são coincidentes, dentro das barras de erros, para as redes maiores. A temperatura BKT é estimada pela média dos valores de $T_{BKT}(L)$ em $\eta = 1/4$, assim obtemos $T_{BKT}^\eta = 0,3732(20)$, para $p = 0,20$; $T_{BKT}^\eta = 0,2002(20)$ para $p = 0,30$ e $T_{BKT}^\eta = 0,110(5)$ para $p = 0,35$.

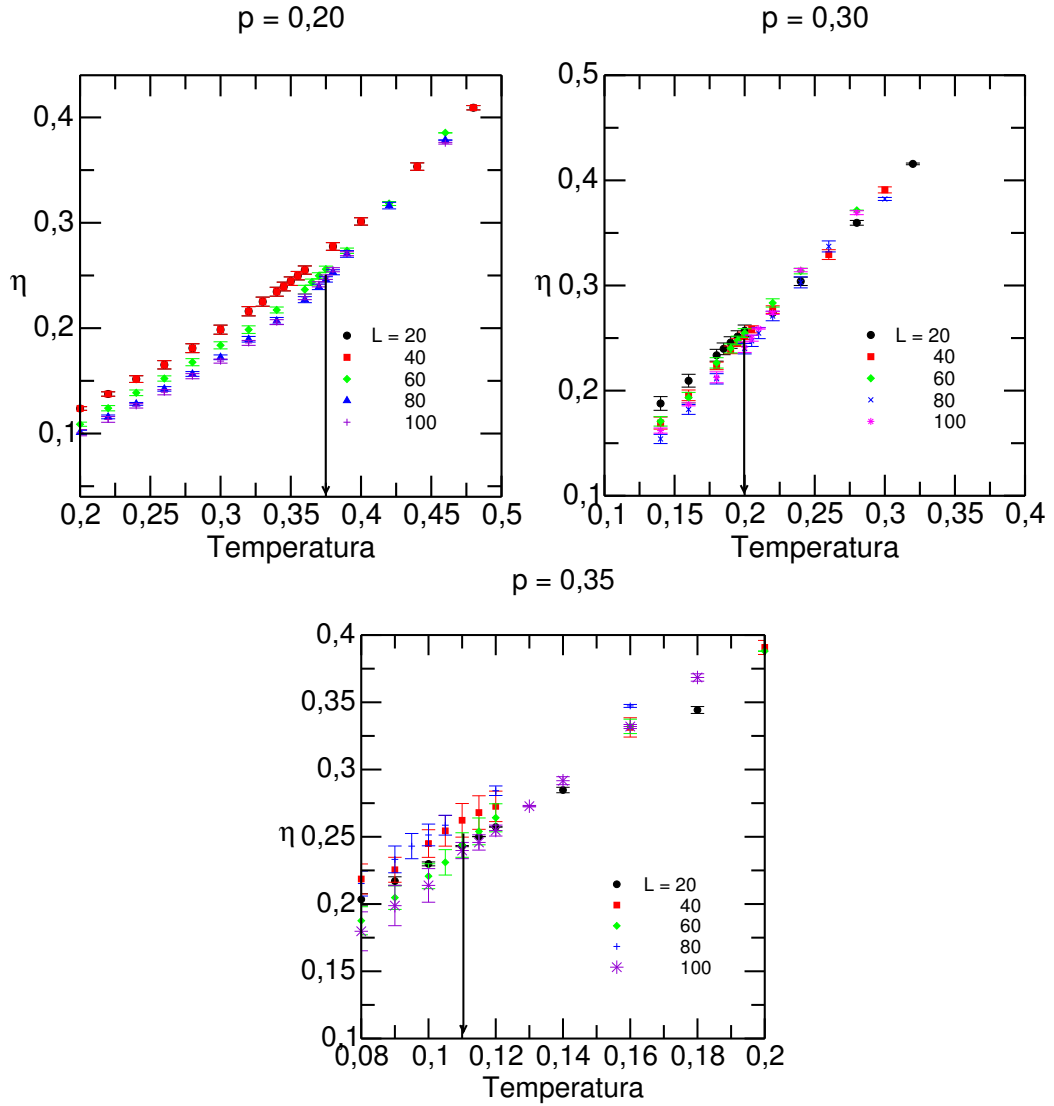


Figura 4.21: A quantidade η em função da temperatura para os três valores de diluição.

Na figura 4.22 mostramos os resultados de $\ln\eta$ em função da temperatura. Os resultados são consistentes com um comportamento exponencial, $\eta \sim e^{\zeta T}$, com $\zeta = 5,08$ para $p = 0,20$; $\zeta = 6,01$ para $p = 0,30$ e $\zeta = 6,84$ para $p = 0,35$, nessa região de temperatura.

Finalmente, plotamos o valor estimado para η no limite termodinâmico em função da concentração de sítios magnéticos, o resultado está apresentado à esquerda na figura 4.23. E à direita temos a temperatura de transição de fase, T_{BKT} , em função da concentração de sítios magnéticos.

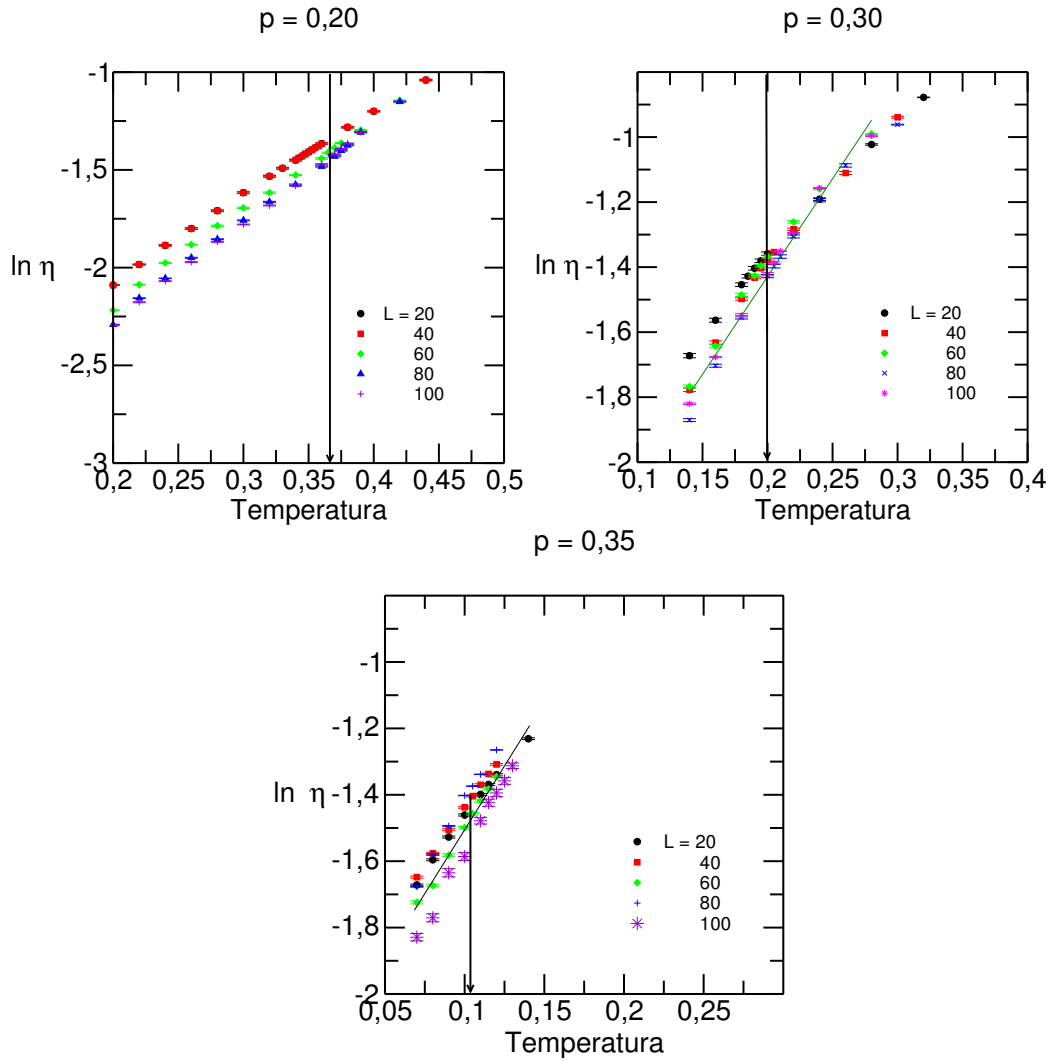


Figura 4.22: O logaritmo de η , $\ln \eta$, em função da temperatura para os três valores de diluição.

O modelo diluído apresenta uma transição de fase que está na classe de universalidade *BKT*, a inclusão de sítios não magnéticos no modelo não alterou o caráter da transição. A temperatura de transição foi estimada através da susceptibilidade magnética, do módulo de helicidade e da função de correlação, observamos que ela diminui com o aumento da diluição. Apesar de já termos um volume bastante razoável de dados para as simulações para várias diluições, consideramos que os resultados para diluições mais altas não são satisfatórios, isto é, as barras de erros ainda estão muito grandes. Estamos realizando mais simulações, com o objetivo de obter as quantidades termodinâmicas para um número maior de configurações e,

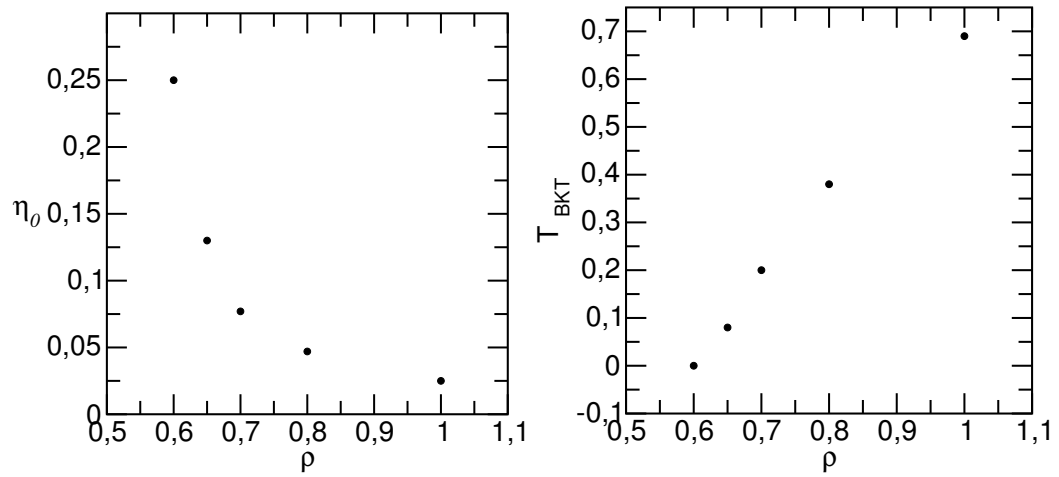


Figura 4.23: À direita, η e à esquerda T_{BKT} em função da concentração de sítios magnéticos.

então, melhorarmos as médias. Esperamos que estes resultados estejam prontos em breve.

Conclusões e Perspectivas

A transição de fase de Berezinskii-Kosterlitz-Thouless (BKT), também conhecida como uma transição de fase topológica, apresenta características que diferem das transições de fase contínuas ou críticas. Esta transição não possui parâmetro de ordem, isto é, o sistema não possui ordem de longo alcance. Apesar disso, a função de correlação muda o seu comportamento em uma temperatura finita T_{BKT} . Para $T > T_{BKT}$ a função de correlação apresenta um comportamento exponencial em função da distância entre os spins, $C \sim e^{-br}$, e para $T < T_{BKT}$ a função de correlação possui comportamento de lei de potência, $C \sim r^{-\eta}$, que é um comportamento característico de transição de fase. Dizemos que, neste caso, o modelo apresenta uma linha crítica, para temperaturas abaixo da T_{BKT} .

Neste trabalho, estudamos o modelo de Heisenberg anisotrópico (HA) em duas dimensões por apresentar esta transição não usual. Neste modelo são permitidas a formação de vórtices, cada vórtice é caracterizado por um número inteiro chamado de vorticidade. A vorticidade de uma dada configuração é uma propriedade topológica que não varia sob deformações contínuas. Segundo a teoria de Kosterlitz e Thouless a transição acontece devido ao mecanismo de desligamento dos pares de vórtices-antivórtices.

Foram feitas simulações intensas, utilizando o método de Monte Carlo com a técnica de “Wang-Landau Replica Exchange” (REWL), que nos permitiu obter bons resultados para baixas temperaturas. Através desta técnica, calculamos a densidade de estados do modelo $g(E)$. De posse de $g(E)$ calculamos as funções termodinâmicas relevantes do sistema, como: a energia, a magnetização, as susceptibilidades e as correlações. Usando técnicas de “Finite Size Scaling” determinamos a temperatura de transição T_{BKT} e o comportamento da função de correlação em

um grande intervalo de temperatura. Estudamos tanto o modelo puro quanto o modelo com a inclusão de sítios não magnéticos. Para o modelo puro, obtivemos a temperatura de transição BKT igual a $T_{BKT} = 0.6980(10)$, através da susceptibilidade magnética, da função de correlação e do módulo de helicidade. Mostramos que o cumulante de Binder de quarta ordem, U_4 , não é uma quantidade confiável para localizarmos esta transição e que o calor específico não é uma grandeza que apresenta um comportamento crítico, assim como nas transições contínuas. Para baixas temperaturas, a função de correlação comporta-se como uma lei de potência, $C(r) \propto r^{-\eta(T)}$, e o expoente η , varia exponencialmente com a temperatura, sendo finito em $T = 0$.

Estudamos também o modelo annealed diluído por sítios. Os cálculos foram feitos para várias diluições de sítios não magnéticos, p , com $p = 0, 0; 0, 20; 0, 30$ e $0, 35$. Como esperado, observamos que a temperatura de transição diminui à medida que aumentamos a concentração de sítios não magnéticos. No modelo diluído, o número de configurações possíveis aumenta quando a concentração de sítios magnéticos diminui, logo para extrair as informações relevantes do modelo, para altas diluições, é necessário um número muito grande de simulações.

Apesar de já termos um volume razoável de dados para as várias diluições, pretendemos obter resultados bem melhores aumentando o número de configurações. O aumento da diluição faz com que as simulações se tornem mais difíceis. Deste modo, para diminuirmos as barras de erros, é necessário que as quantidades termodinâmicas sejam calculadas para um número maior de configurações, para que os resultados fiquem mais consistentes.

Finalmente, ressaltamos que, como resultado deste trabalho, publicamos um artigo (Physica A, 488, 2017, apresentado no apêndice) e pretendemos preparar um outro assim que melhorarmos os resultados para as altas diluições.

Artigo publicado

Physica A 488 (2017) 121–131



Contents lists available at ScienceDirect

Physica A

journal homepage: www.elsevier.com/locate/physa

Minireview

Topological phase transition in the two-dimensional anisotropic Heisenberg model: A study using the Replica Exchange Wang–Landau sampling

T.P. Figueiredo^{a,*}, J.C.S. Rocha^b, B.V. Costa^c^a Departamento de Ciências Exatas, Universidade Estadual de Montes Claros, Montes Claros, Minas Gerais, Brazil^b Departamento de Física, ICEB, Universidade Federal de Ouro Preto, 35400-000 Ouro Preto, Minas Gerais, Brazil^c Laboratório de Simulação, Departamento de Física, ICEx, Universidade Federal de Minas Gerais, 31720-901 Belo Horizonte, Minas Gerais, Brazil

HIGHLIGHTS

- We show that the anisotropic Heisenberg model is in the BKT class of universality.
- From our simulation we obtain the BKT transition temperature as $T_{BKT} = 0.6980(10)$.
- We discuss the misuse of the fourth order Binder's cumulant to locate the T_{BKT} .
- The specific heat is shown to have a non-critical behavior.
- The correlation function, in $T < T_{BKT}$, have an exponent with a exponential behavior.

ARTICLE INFO

Article history:

Received 17 January 2017

Received in revised form 4 July 2017

Available online 19 July 2017

Keywords:

Topological phase transition

XY model

Wang–Landau replica exchange

ABSTRACT

Although the topological Berezinskii–Kosterlitz–Thouless transition was for the first time described by 40 years ago, it is still a matter of discussion. It has been used to explain several experiments in the most diverse physical systems. In contrast with the ordinary continuous phase transitions the *BKT*-transition does not break any symmetry. However, in some contexts it can easily be confused with other continuous transitions, in general due to an insufficient data analysis. The two-dimensional *XY* (or sometimes called planar rotator) spin model is the *fruit fly* model describing the *BKT* transition. As demonstrated by Bramwell and Holdsworth (1993) the finite-size effects are more important in two-dimensions than in others due to the logarithmic system size dependence of the properties of the system. Closely related is the anisotropic two dimensional Heisenberg model (*AH*). Although they have the same Hamiltonian the spin variable in the former has only two degrees of freedom while the *AH* has three. Many works treat the *AH* model as undergoing a transition in the same universality class as the *XY* model. However, its characterization as being in the *BKT* class of universality deserve some investigation. This paper has two goals. First, we describe an analytical evidence showing that the *AH* model is in the *BKT* class of universality. Second, we make an extensive simulation, using the numerical Replica Exchange Wang–Landau method that corroborate our analytical calculations. From our simulation we obtain the *BKT* transition temperature as $T_{BKT} = 0.6980(10)$ by monitoring the susceptibility, the two point correlation function and the helicity modulus. We discuss the misuse of the fourth order Binder's cumulant to locate the transition temperature. The specific heat is shown to have a non-critical behavior as expected in the *BKT* transition.

* Corresponding author.

E-mail address: tatipenafig@yahoo.com.br (T.P. Figueiredo).<http://dx.doi.org/10.1016/j.physa.2017.07.010>

0378-4371/© 2017 Elsevier B.V. All rights reserved.

An analysis of the two point correlation function at low temperature, $C(r) \propto r^{-\eta(T)}$, shows that the exponent, η , is consistent with an exponential law $\eta = \eta_0 e^{\zeta T}$, with $\eta_0 = 0.025(5)$ and $\zeta = 3.25(10)$ in close agreement with the results of Cardy (1981) for the p -state clock model.

© 2017 Elsevier B.V. All rights reserved.

Contents

1. Introduction.....	122
2. The continuous limit.....	123
3. Numerical approach.....	124
3.1. The Wang–Landau technique.....	124
3.2. Finite size scaling.....	125
4. Simulation results.....	126
5. Conclusion and final remarks.....	130
Acknowledgments.....	130
References.....	130

1. Introduction

Many papers were dedicated to the study of the Berezinskii–Kosterlitz–Thouless (*BKT*) transition in spin systems in the last four decades [1–11]. In particular the classical two dimensional *XY* model, which is a *fruit fly* system undergoing a *BKT* transition. The *XY* model is defined by the Hamiltonian

$$H_{XY} = -J \sum_{(i,j)} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j = -J \sum_{(i,j)} \cos(\phi_i - \phi_j), \quad (1)$$

where \vec{S}_i stands for a $O(2)$ spin at the site i and the sum runs over nearest-neighbor spin sites. The *XY* model is interesting in its own right, as well as being a model prototype for Josephson arrays, liquid helium superfluidity films, rough transition and many others [1]. It has a transition at a temperature T_{BKT} [9]. The nature of this transition is completely different from the common discontinuous (First order) or continuous (Second order) phase transitions. Long range order does not exist [12]. Nevertheless, there is still a phase transition in the model characterized by a change in the two point correlation function, $C(r)$, behavior: At low temperature, $T \leq T_{BKT}$, it has a power law decay, $C(r) \propto r^{-\eta(T)}$, while an exponential decay, $C(r) \propto e^{-r/\xi(T)}$, takes over for $T > T_{BKT}$ [13,14]. A model displaying a *BKT* transition has an entire line of critical points in the low temperature region. Besides, the correlation length is expected to diverge exponentially as long as T_{BKT} is approached from above, i.e. $\xi \propto e^{b(T-T_{BKT})^{-\nu}}$, $T \rightarrow T_{BKT}^+$. The renormalization group theory predicts, $\nu = 1/2$ and $\eta = 1/4$ at T_{BKT} . The correlation exponent is expected to be a function of temperature. The corresponding free energy is a C^∞ function, but not analytical inside the $T \leq T_{BKT}$ region. Its phenomenology relies on the belief that it is driven by a vortex–antivortex unbinding mechanism [13,14]. In many situations one wants to study the dynamics of the system [15–19]. However, a model with only two spin components, $\vec{S}_i \equiv \cos(\phi)\hat{x} + \sin(\phi)\hat{y}$, has no intrinsic dynamics. A remedy is to introduce an $O(3)$ spin, so that $\vec{S}_i \equiv \sin \Theta_i \cos \Phi_i \hat{x} + \sin \Theta_i \sin \Phi_i \hat{y} + \cos \Theta_i \hat{z}$, and an out-of-plane anisotropy, A , constraining the system to the *XY* plane. Here, Φ and Θ are the spherical angles. Using this parametrization we get the Hamiltonian

$$\begin{aligned} H &= -J \sum_{(i,j)} \left[\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - AS_i^z S_j^z \right] \\ &= -J \sum_{(i,j)} \left[\sin \Theta_i \sin \Theta_j \cos(\Phi_i - \Phi_j) \right. \\ &\quad \left. + (1 - A) \cos \Theta_i \cos \Theta_j \right]. \end{aligned} \quad (2)$$

If we set $A = 1$ we may expect that the polar angle will just fluctuate around $\Theta = \pi/2$ for moderate temperature. With this approximation we obtain a model with only a dependence in the azimuthal angle

$$H_{AH} = -J \sum_{(i,j)} \cos(\Phi_i - \Phi_j). \quad (3)$$

Although both Hamiltonians, Eqs. (1) and (3) are written in the same way, the spins in H_{XY} have two degrees of freedom while in H_{AH} have three, i.e., allowing out-of-plane fluctuations. We may expect the fluctuations are small enough to conserve the *BKT* character of the transition with the only effect the lowering of the transition temperature, $T_{BKT}^{AH} < T_{BKT}^{XY}$. Several numerical results [8,15–18,20] show evidences of this behavior, obtaining a *BKT* temperature close to $0.700J$, the transition for the *XY* model is at $T_{BKT}^{XY} = 0.892(2)$ [21,22].

The goals of this paper are as follows. Firstly we will show analytically that, at least in the continuum limit and moderate temperature, the *BKT* transition survives in the anisotropic Heisenberg (*AH*) model. Secondly, we use an extensive numerical Replica Exchange Wang–Landau simulation to obtain several thermodynamical quantities. A comparison with the behavior of the *XY* model strongly suggest they are in the same class of universality. We discuss the misuse of the fourth order Binder's cumulant to determine T_{BKT} and at last we obtain the exponent for the correlation function, $\eta(T)$, for a wide range of temperature. Our results are consistent with an exponential behavior $\eta \sim e^{\epsilon T}$. In all our calculation we measure energy in units of J and temperature in units of J/k_B . Error bars, when not explicitly mentioned, are smaller than the symbols used.

2. The continuous limit

An out-of-plane anisotropy, A , in the z direction obliges the polar angle, Θ , to fluctuate around $\pi/2$ so that, $\Theta \approx \pi/2 + \theta$ with $\theta \ll 1$ should be a good approximation in this regime. If we consider that Θ smoothly varies between neighbor sites (i, j) to $(i \pm 1, j)$ and $(i, j \pm 1)$, a continuum approximation is obtained by expanding the spherical angles following references [23,24]. Here we consider the system is defined in a square lattice with a standing for the lattice spacing, a schematic view is shown in Fig. 1. To write the continuum limit we make the mapping of the discrete coordinates (i, j) to the continuous (x, y) . At the end of the calculations we take the limit $a \rightarrow 0$. The polar angles can be expanded as

$$\Theta_{i\pm 1,j} = \Theta(x \pm a, y) = \Theta(x, y) \pm a \frac{\partial \Theta}{\partial x} + \frac{a^2}{2} \frac{\partial^2 \Theta}{\partial x^2} + O(a^3), \quad (4)$$

$$\Theta_{i,j\pm 1} = \Theta(x, y \pm a) = \Theta(x, y) \pm a \frac{\partial \Theta}{\partial y} + \frac{a^2}{2} \frac{\partial^2 \Theta}{\partial y^2} + O(a^3). \quad (5)$$

Expanding the sines and cosines and keeping terms up to a^3 order we readily obtain

$$\begin{aligned} \sin(\Theta_{i\pm 1,j}) &= \sin \Theta \pm \frac{a}{2} (\sin \Theta \mp 2 \cos \Theta) \frac{\partial \Theta}{\partial x} + \frac{a^2}{2} \frac{\partial^2 \Theta}{\partial x^2} \cos \Theta + O(a^3), \\ \sin(\Theta_{i,j\pm 1}) &= \sin \Theta \pm \frac{a}{2} (\sin \Theta \mp 2 \cos \Theta) \frac{\partial \Theta}{\partial y} + \frac{a^2}{2} \frac{\partial^2 \Theta}{\partial y^2} \cos \Theta + O(a^3), \\ \cos(\Theta_{i\pm 1,j}) &= \cos \Theta \pm \frac{a}{2} (\cos \Theta \pm 2 \sin \Theta) \frac{\partial \Theta}{\partial x} + \frac{a^2}{2} \frac{\partial^2 \Theta}{\partial x^2} \sin \Theta + O(a^3), \\ \cos(\Theta_{i,j\pm 1}) &= \cos \Theta \pm \frac{a}{2} (\cos \Theta \pm 2 \sin \Theta) \frac{\partial \Theta}{\partial y} + \frac{a^2}{2} \frac{\partial^2 \Theta}{\partial y^2} \sin \Theta + O(a^3). \end{aligned} \quad (6)$$

Doing the same for $\Phi_{i,j}$ we obtain

$$\cos(\Phi_{i,j} - \Phi_{i\pm 1,j}) = 1 - \frac{1}{2} a^2 \left(\frac{\partial^2 \Phi}{\partial y^2} + O(a^3) \right)^2, \quad (7)$$

where Θ and Φ are short notations for $\Theta(x, y)$ and $\Phi(x, y)$, respectively. Introducing the approximations above in the anisotropic Heisenberg Hamiltonian and taking $A = 1$, $\Theta = \pi/2$ we get

$$H_{AH}^{cont} = J \int d\mu \left\{ 1 - \frac{a^2}{2} \left[\left(\frac{\partial \Phi}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial \Phi}{\partial y} \right)^2 \right] \right\} [4 + O(a^3)]. \quad (8)$$

Out of a non-important constant, and taking the limit $a \rightarrow 0$ we obtain

$$H_{AH}^{cont} = -2J \int d\mu \left[\left(\frac{\partial \Phi}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial \Phi}{\partial y} \right)^2 \right]. \quad (9)$$

This result show that within this approximation we obtain a model with the only dependence in the azimuthal angle which corresponds to the continuum version of the anisotropic Heisenberg model given in Eq. (3). The partition functions for the models *XY* and anisotropic Heisenberg are the same out of a non important multiplicative constant

$$Z_{AH} = \int d\mu e^{-J \sum_{(i,j)} \cos(\Phi_i - \Phi_j)}, \quad (10)$$

where, $d\mu \equiv d\Phi_1 d\Phi_2 \dots d\Phi_n d\Theta_1 d\Theta_2 \dots d\Theta_n \dots$. The integrals over the out-of-plane angle fluctuations, Θ , can readily be done, so that, averages of in-plane quantities do not depend on Θ . This shows that in the continuous and high out-of-plane anisotropy limits both models are expected to be equivalent. The only difference being a lower *BKT* temperature for the anisotropic Heisenberg model due to the additional source of entropy introduced by the out-of-plane degree of freedom. This equivalence has been used by Gouvea and Pires in references [25,26] to study the one dimensional anisotropic Heisenberg model.

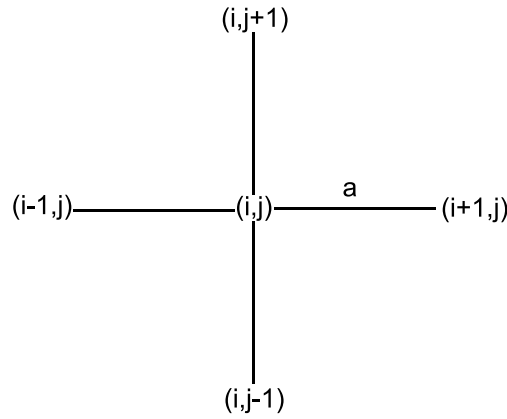


Fig. 1. Definition of the enumeration of the sites. Here, a is a parameter corresponding to the distance between sites. The continuum limit is obtained by taking $a \rightarrow 0$.

3. Numerical approach

Although our arguments in the previous section seem to be quite reasonable, they are valid if the out-of-plane fluctuations are small and vary smoothly from one site to its neighbor. In this section we use numerical simulations to show that both models, AH and XY , obey the same scaling laws, leading to the same universal behavior in the thermodynamic limit. Our simulations were done by using the Replica Exchange Wang–Landau ($REWL$) algorithm [27–31]. As a matter of completeness and comparison we briefly describe the numerical method and the finite size scaling results for the continuous (second order) and BKT transitions.

3.1. The Wang–Landau technique

In short we describe the WL method used in this work. For a more detailed discussion see references [27–29,32] and references therein. The canonical partition function, Z , of a given system can be calculated as

$$Z(\beta) = \sum_{\{S\}} e^{-\beta H(\{S\})} = \sum_E g(E) e^{-\beta E}; \quad \text{where } \beta \equiv \frac{1}{k_B T}. \quad (11)$$

Here, $\sum_{\{S\}}$ stands for a sum over all configurations of the spin S , $g(E)$ is the density of states of the system, k_B is the Boltzmann constant and T is the temperature. The sum runs over all allowed energy states of the system. The density of states does not depend upon the temperature. Once $g(E)$ is known we have access to any thermodynamical quantity at any temperature. In the WL method the final outcome is the density of states. The WL scheme works in the following way. We want to estimate $g(E)$ inside the energy interval $[E_{min}, E_{max}]$. For a model with a continuous spectrum an energy bin width δE is chosen to control the resolution of $g(E)$. An initial guess of $g(E)$ is taken. Since $g(E)$ changes along the simulation until convergence is reached the initial choice is not important. An auxiliary histogram $H(E)$ is introduced to keep track of the number of visits to each energy bin. All entries are set to zero at the beginning. The simulation starts by visiting, chosen at random, an initial configuration, E_A . A new state, E_B is generated by applying a Monte Carlo trial move to the current configuration. In this work we used a single Metropolis algorithm. The new state, with the direction chosen randomly, is accepted with probability:

$$P(A \rightarrow B) = \min \left[1, \frac{g(E_A)}{g(E_B)} \right]. \quad (12)$$

If the move B is accepted $g(E)$ and $H(E)$ are updated by $g(E_B) \rightarrow f \times g(E_B)$ and $H(E_B) \rightarrow H(E_B) + 1$. Otherwise the update is done in the current energy bin E_A . Here, f is a modification factor whose initial value is chosen to be $f_0 = e^1$. Trial states are generated until a predefined flat histogram condition for $H(E)$ is obtained. At this point, the modification factor is changed, $f \rightarrow \sqrt{f}$, the histogram is reset and the process starts over until f reaches a predefined, terminal value f_{stop} . With this process $g(E)$ is modified by smaller and smaller amounts until it converges to the true distribution. This simple scheme can become very time and CPU consuming as the system size grows. Recently [27,30,31], a more efficient, parallel, implementation was introduced, incorporating the original serial WL into a replica-exchange framework. The energy interval, $[E_{min}, E_{max}]$, is broken into a number of h subsets each of them overlapping the others. A schematic view of this procedure is shown in Fig. 2. A large overlap, around 70% gives good results. In this work we have used a 75% overlap criterion. The flatness criterion was set to $f_{stop} = 10^{-9}$ for all windows. Replica exchanges are proposed between adjacent energy windows after a predefined number of Monte Carlo steps and accepted with probability

$$P_{Exchange} = \min \left[1, \frac{g_i(E_A)g_j(E_B)}{g_i(E_B)g_j(E_A)} \right]. \quad (13)$$

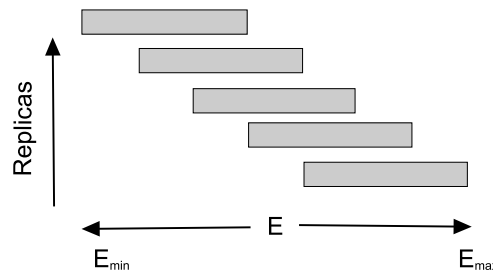


Fig. 2. Schematic view of a possible subdivision of the total energy range for replica exchange sampling.

Here, it is assumed that A (B) is the current configuration of walker i (j). At the end of the simulation the pieces of $g(E)$, for different energy intervals were joined together to furnish a single $g(E)$ in the entire energy interval. The pieces were joined where the inverse microcanonical temperatures coincide [33]. Multiple *WL walkers* can be used in each window to reduce statistical errors, but each walker has its own $g(E)$ and $H(E)$.

We observe that building a histogram for $g(E)$ allow us to get any quantity that is solely a function of energy. If one wants the magnetization, for example, a multidimensional histogram has to be built. In our calculations we are interested in several quantities that do not depend directly on E . For each of those quantities constructed a subsidiary histogram in the following way. Suppose $g(E)$ is the energy histogram. At each entry, n , we accumulate the corresponding g_n . If we need another quantity, like the magnetization, for example, we create a new entry, $m(E)$, accumulating in it the corresponding magnetization to that particular energy. At the end of the calculation the averaged, $\langle m(E) \rangle$ is easily calculated by dividing each entry, $m(E) >$ by the number of times that this particular entry is accessed. The same can be done for any quantity that does not depends directly on E .

3.2. Finite size scaling

To estimate critical quantities the finite-size scaling (*FSS*) theory is the standard method of analyses used in *MC* simulations. As a matter of comparison we make below a brief review of the *FSS* properties for both, the continuous (Second order) and *BKT* transitions. The important thermodynamical quantities we have to analyze are

- Magnetization (M),
- Specific Heat (C_v),
- Susceptibility (χ),
- Fourth Order Binder's Cumulant (U_4),
- Helicity Modulus (Υ),
- Two Point Correlation Function ($C(|i - j|)$).

If the reduced temperature is defined as $t = (T - T_c)/T_c$ the singular part of the free energy is given by $F(L, T) = L^{(2\alpha)/\nu} \tilde{f}(tL^{1/\nu})$ for T in the vicinity of the critical temperature and L not too small. Appropriate differentiation of F yields the various thermodynamic functions. For an *order-disorder* transition, exactly at T_c , M , χ , and C_v , behave respectively as

$$\begin{aligned} M &\propto L^{-\beta/\nu}, \\ \chi &\propto L^{-\gamma/\nu}, \\ C_v &\propto L^{-\alpha/\nu}. \end{aligned} \quad (14)$$

In addition to those an important quantity is the fourth-order Binder's cumulant defined as

$$U_4 \equiv 1 - \frac{\langle M^4 \rangle}{3\langle M^2 \rangle^2}. \quad (15)$$

At the critical temperature U_4 is size independent such that for large enough L curves for different sizes cross at the same point.

For a *BKT* transition the above defined quantities behave in a different and subtle way. If we fix our attention in small lattice sizes, the transition looks like an *order-disorder* one. This problem was discussed by Bramwell and Holdsworth [34]. In the thermodynamical limit there is no spontaneous magnetization. The specific heat has a peak at a temperature that is slightly higher than T_{BKT} , but α is positive and large, so that it does not depend on L at all. Models in the *BKT* universality class have an entire critical region so that, the curves for the Binder's cumulant, U_4^{XY} , must coincide inside that region. Such considerations show that U_4^{XY} is useless to precisely determine T_{BKT} . There are, however, some very precise ways to calculate the transition temperature. The in-plane susceptibility scales as $\chi^{XY} \propto L^{2-\eta}$. The exponent is $\eta = 1/4$ at T_{BKT} . Therefore, using $\eta = 1/4$, all curves $\chi^{XY} L^{-7/4}$, as a function of temperature, will intercept at a common point. Due to finite size effects the

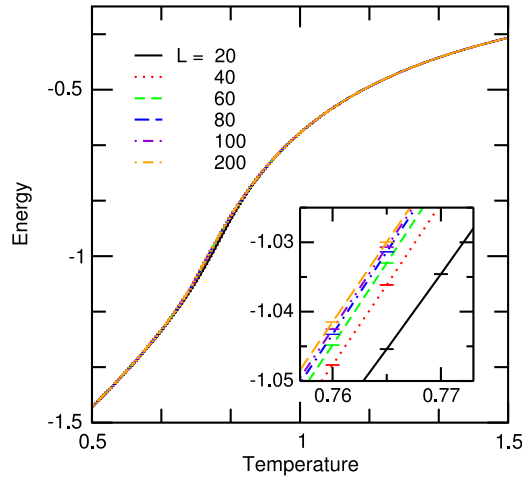


Fig. 3. (Color online) Energy as a function of temperature for several lattice sizes. All curves coalesce for $L > 20$ anticipating the non-critical behavior of the specific heat.

obtained temperatures using different crosses will be slightly different. We can construct a sequence of temperatures $T_{BKT}^X(L)$ to estimate the limit $T_{BKT}^X(L \rightarrow \infty)$. In connection with the superfluid density it is possible to define an order parameter, the helicity modulus, Υ , to the XY model [35–40]. The helicity modulus measures the response of the system to a twist, $\Delta\Phi$. In the infinite volume limit the interception of Υ with the straight line $\Upsilon = 2T/\pi$ gives T_{BKT} . A sequence of temperatures $T_{BKT}^\Upsilon(L)$ can be built for posterior analysis. As discussed before, the BKT transition is characterized by a change in the two point correlation function. For low temperature, $C(r) \propto r^{-\eta}$ while $C(r) \propto e^{-r/\xi(T)}$ for high temperature. By calculating $C(r)$ for several temperatures its behavior should be evidenced by using an Ornstein–Zernike [11,41] like formula to fit the simulated data giving the correlation length ξ and the exponent η . The BKT temperature is determined as the point where $\eta = 1/4$. Also here, a sequence $T_{BKT}^C(L)$ can be built. To obtain $T_{BKT}(L \rightarrow \infty)$ we plot all estimated $T_{BKT}(L)$ values as a function of $[\ln(L)]^{-2}$ which is the scaling behavior as obtained by Kenna and Irving [42].

4. Simulation results

Using the Replica Exchange Wang–Landau (REWL) [27–29] method we have simulated the two dimensional anisotropic Heisenberg model in a square lattice of area $L \times L$ with $L = 20, 40, 60, 80, 100$ and 200 . To obtain $E(L)$, $M(L)$, $U_4(L)$, $\chi(L)$, $\Upsilon(L)$, and $C(|i-j|; L)$ a histogram for each of those quantities is built. The results are presented in Figs. 3–11. The symbols for each lattice size are defined in the insets. In Fig. 3 we show the energy as a function of temperature. An amplified view of the inflection region is also seen. We observe that all curves almost coalesce for $L > 20$, anticipating the behavior of the specific heat which is not critical. The specific heat is presented in Fig. 4. It has a non critical peak at $T_{L \rightarrow \infty}^C = 0.7339(1)$ as estimated in Fig. 9. Except for the smallest lattice ($L = 20$), the peak heights of the specific heat, for several values of L , coincide within the error bars. The results are fully consistent with those obtained in reference [43,44] showing a clear evidence that the transition is in the BKT universality class.

The in-plane magnetization must be zero for any non zero temperature, however, as pointed out by Bramwell and Holdsworth [34], to see this effect the system under investigation should be very large. They estimate that “for a system with atomic spacing of 3\AA the area should correspond to the size of a postage stamp”. In Fig. 5 it is shown the magnetization as a function of temperature. It consistently diminishes as the system size increases. The amplified plot shows this typical behavior for a given temperature. Here we have chosen $T = 0.60$, below the expected BKT transition. Since for small values of L the magnetization is not zero the BKT transition can easily be confused with a continuous second order phase transition. In this situation we are tempted to obtain T_{BKT} by using the fourth order’s Binder cumulant U_4 . At the transition, U_4 does not depend on L , so that plotting U_4 as a function of temperature for several lattice sizes, the curves intercept at the critical temperature. However, it happens that the model is critical for any $T \leq T_{BKT}$. For sufficiently large L all curves collapse in the low temperature region. For small L the intersections between different curves give a false transition temperature, although, close to the true T_{BKT} . In Fig. 6 we show this behavior. A zoom of the collapsed region is also shown. The only interception is with the smallest lattice, all the others are collapsed, within the error bars, as expected.

In the thermodynamic limit the susceptibility is infinite for $T \leq T_{BKT}$. For finite size system sizes it behaves as $\chi \propto L^{2-\eta}$. By plotting $\chi L^{\eta-2}$ as a function of temperature for several lattice sizes the curves will intercept at the point T_{BKT}^X . The susceptibility versus T is displayed in Fig. 7. That is the expected behavior for a BKT transition. The value obtained for T_{BKT} using $\chi L^{\eta-2}$ is $T_{BKT}^X = 0.6994(1)$ (See Fig. 9). A plot of the helicity as a function of temperature is shown in Fig. 8. The FSS analysis gives $T_{BKT}^Y = 0.6948(20)$ (See Fig. 9).

In Fig. 9 it is shown $T_{BKT}(L)$ versus $(\ln(L))^{-2}$ for all quantities we have calculated so far. The straight lines are obtained from linear regression for each set. The intersection of the straight lines with the vertical axis gives an estimate for T_{BKT} .

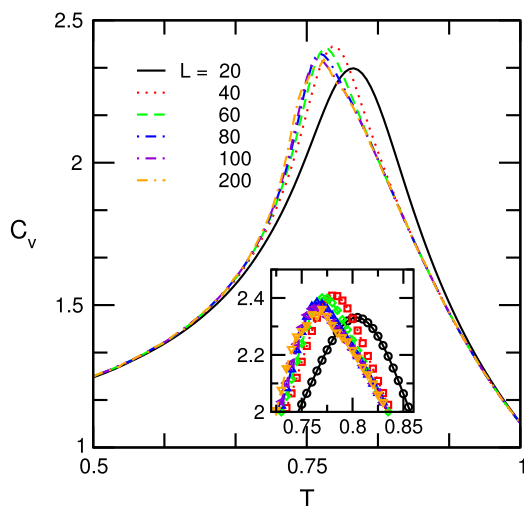


Fig. 4. (Color online) C_v as a function of temperature. It is also shown a zoomed figure of the peak region. The estimated value for the temperature at the peak is $T^C(L \rightarrow \infty) = 0.7339(1)$. Except for the smallest lattice ($L = 20$), the specific heat peak heights coincide within the error bars, not shown here as a matter of clarity.

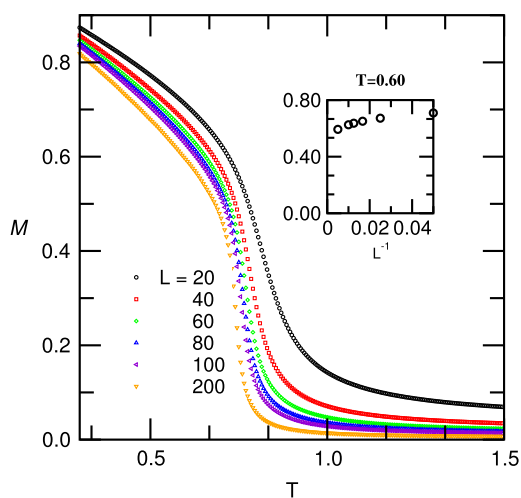


Fig. 5. (Color online) The magnetization versus temperature is shown in this figure. We see that M diminishes as L augments. The amplified plot shows this typical behavior for a given temperature. This is consistent with the absence of a finite magnetization for the XY model.

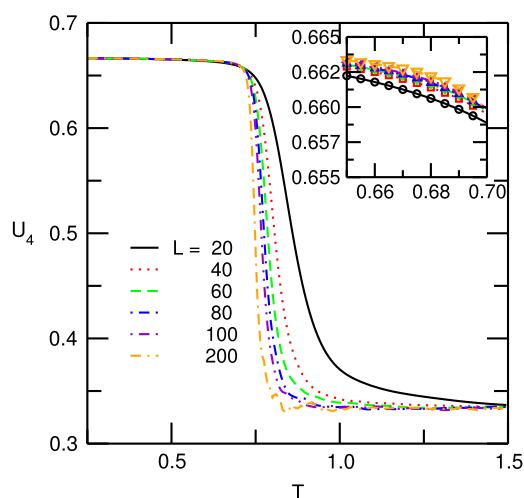


Fig. 6. (Color online) In this figure we show the Binder's Cumulant. It is worth to note that only the curve for the smaller lattice size cross the other curves. Up to a temperature $T^{U_4} = 0.6904(2)$ all curves coincide within the error bars. This is a characteristic behavior of the BKT behavior.

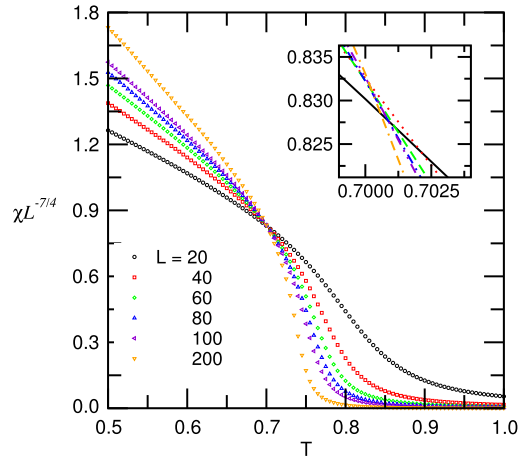


Fig. 7. (Color online) $\chi L^{-7/4}$ versus temperature. The typical XY behavior is seen once again. All curves intercept at a common temperature estimated as $T_{BKT}^{\chi} = 0.6994(1)$.

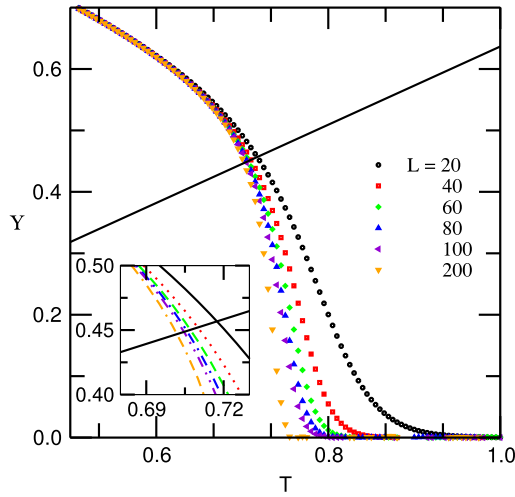


Fig. 8. (Color online) The figure shows the helicity modulus as a function of temperature. The straight line, $\gamma = 2T/\pi$ intercepts the curves at the estimated value $T_{BKT}^{\gamma} = 0.6948(20)$.

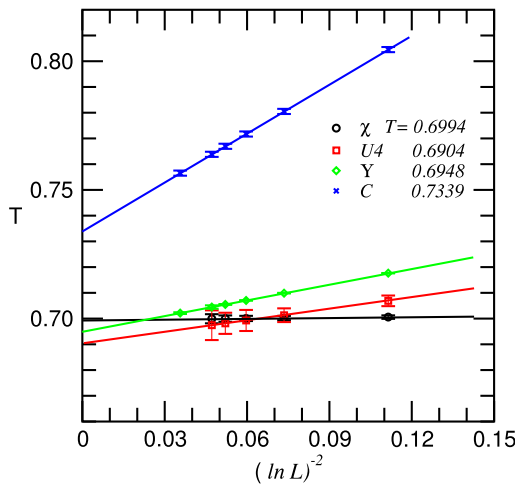


Fig. 9. (Color online) $T_{BKT}(L)$ for several quantities is plotted as a function of $(\ln L)^{-2}$. The curve for the susceptibility shows how this quantity is independent of L even for small lattice sizes. The upper curve, $T^C(L)$, is for the specific heat. It scales to a higher temperature than T_{BKT} . This odd behavior is characteristic of the BKT transition.

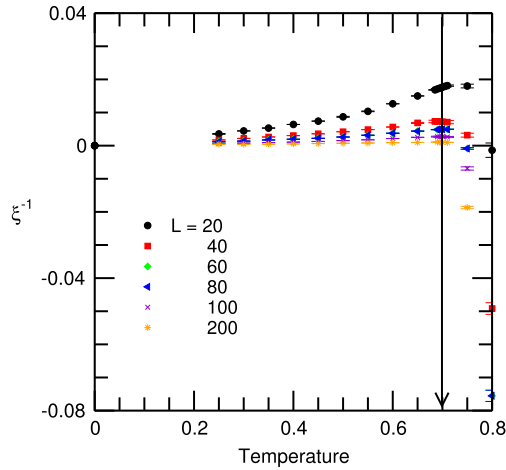


Fig. 10. (Color online) The inverse of the correlation length as a function of temperature. As expected from renormalization results the correlation length should become infinite ($\xi \rightarrow \infty$) for $T \leq T_{BKT}$. We see that the curves tend consistently to zero as L grows. The arrow shows T_{BKT} .

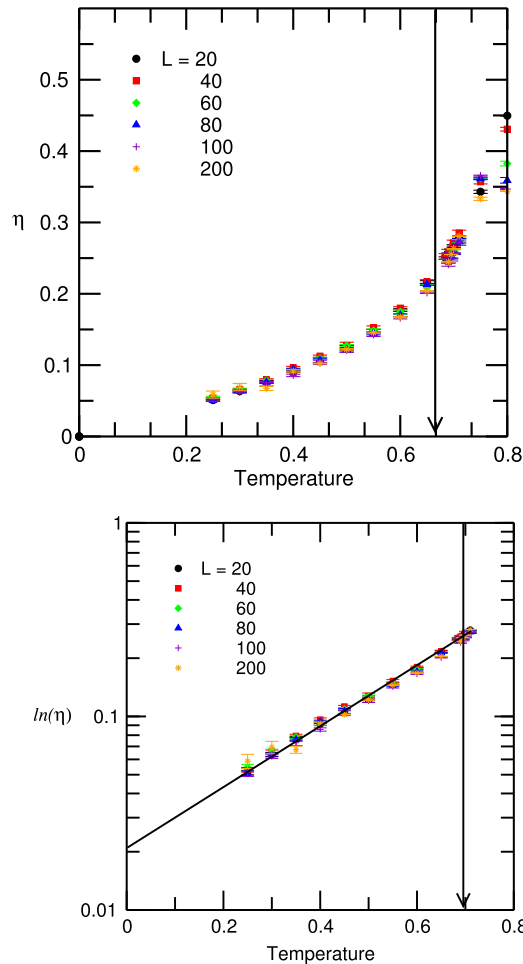


Fig. 11. (Color online) The figures show the correlation exponent, η (Top), and $\ln \eta$ (Bottom) as a function of temperature for several lattice sizes. The transition temperature is obtained at the point where $\eta = 1/4$. The estimated T_{BKT}^η is 0.6999(10). The plot for $\ln \eta$ shows that the exponent has an exponential behavior $\eta = \eta_0 e^{\zeta T}$, with $\eta_0 = 0.025(5)$ and $\zeta \approx 3.25(10)$, indicating that η is finite at $T = 0$.

Following the *BKT* picture we know that the correlation length, ξ , must be finite for $T > T_{BKT}$ and infinite for $T \leq T_{BKT}$ when the correlation length has a power law behavior, $c(r) \propto r^{-\eta}$. Here $r \equiv |i-j|$. Because the system is finite we may expect a hybrid behavior in both regions, being not completely exponential or power law. In face of that we use an Ornstein–Zernike

like expression to fit our data

$$C(r) = Ae^{-r/\xi} r^{-\eta}. \quad (16)$$

The parameters A , ξ and η are adjusted to fit our data. In Fig. 10 it is shown ξ^{-1} as a function of temperature. We observe that ξ^{-1} approaches zero consistently within the region $T \leq T_{BKT}(L)$ as L augments. In Fig. 11 it is shown the exponent η . The BKT temperature is determined by collecting the values of $T_{BKT}^\eta(L)$ for different lattice sizes at $\eta = 1/4$. We estimated $T_{BKT}^{(1/4)} = 0.6999(10)$. The bottom figure shows $\ln \eta$ versus T . The results are consistent with an exponential behavior, $\eta = \eta_0 e^{\zeta T}$, with $\eta_0 = 0.025(5)$ and $\zeta \approx 3.25(10)$.

5. Conclusion and final remarks

In this work we have used analytical and numerical arguments to show that the two dimensional anisotropic Heisenberg model is in the same universality class as the XY model. Our numerical results were obtained by using the Replica Exchange Wang–Landau parallel algorithm which allowed us to determine the BKT temperature and several thermodynamic functions quite precisely. A discussion showing that the fourth order Binder's cumulant is not a reliable quantity to forecast the BKT temperature is included. The two point correlation function exponent, η , and the correlation length, ξ were obtained. It was found that η behaves as $\eta = \eta_0 e^{\zeta T}$ with $\eta_0 = 0.025(5)$ and $\zeta \approx 3.25(10)$. This result is in contrast with Ref. [20] where they found that η goes monotonically to zero. A similar behavior to ours was found by Cardy [45] in the p -state clock model, with $p = 2n + 1$, $n = 1, 2, \dots$. The model exhibit two phases with a critical line of continuously varying exponent $\eta_{\min} \leq \eta \leq 1/4$ separating them. The discrepancy is probably due to the poor statistics at low temperature used in the Ref. [20].

Acknowledgments

The authors gratefully acknowledge partial financial support from CNPq grant no. 150503/2014-8 and grant no. 402091/2012-4 and FAPEMIG grant CEX-30034/12.

References

- [1] Jorge V. José (Ed.), 40 Years History of Berezinskii–Kosterlitz–Thouless Theory, World Scientific, 2013.
- [2] S.E. Korshunov, Phys. Uspekhi 49 (2006) 225. <http://dx.doi.org/10.1070/PU2006v049n03ABEH005838>.
- [3] P. Minnhagen, Rev. Modern Phys. 59 (1987) 1001.
- [4] B.V. Costa, Braz. J. Phys. 41 (2011) 94.
- [5] A. Cuccoli, T. Roscilde, R. Vaia, P. Verrucchi, Phys. Rev. Lett. 90 (2003) 167205.
- [6] A. Cuccoli, T. Roscilde, V. Tognetti, R. Vaia, P. Verrucchi, Phys. Rev. B 67 (2003) 104414.
- [7] S. Sarkar, S.K. Paul, R. Chaudhury, Eur. Phys. J. B 85 (2012) 380. <http://dx.doi.org/10.1140/epjb/e2012-30200-6>.
- [8] J.C.S. Rocha, L.A.S. Mól, B.V. Costa, Comput. Phys. Comm. (2016). <http://dx.doi.org/10.1016/j.cpc.2016.08.016>.
- [9] P. Minnhagen, H. Weber, Physica B 152 (1988) 50.
- [10] B.V. Costa, A.R. Pereira, A.S.T. Pires, Phys. Rev. B 54 (1996) 3019.
- [11] L.A.S. Mól, B.V. Costa, Phys. Rev. B 79 (2009) 054404. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.79.054404>.
- [12] N.D. Mermin, H. Wagner, Phys. Rev. Lett. 17 (1966) 1133.
- [13] V.L. Berezinskii, Sov. Phys.—JETP 32 (1971) 493.
- [14] J.M. Kosterlitz, D.J. Thouless, J. Phys. C: Solid State Phys. 6 (1973) 1181.
- [15] H.G. Evertz, D.P. Landau, Phys. Rev. B 54 (1996) 12302.
- [16] B.V. Costa, M.E. Gouvea, A.S.T. Pires, Phys. Lett. A 165 (1992) 179. [http://dx.doi.org/10.1016/0375-9601\(92\)90096-5](http://dx.doi.org/10.1016/0375-9601(92)90096-5).
- [17] B.V. Costa, J.E.R. Costa, D.P. Landau, J. Appl. Phys. 81 (1997) 5746. <http://dx.doi.org/10.1063/1.364712>.
- [18] J.E.R. Costa, B.V. Costa, D.P. Landau, Phys. Rev. B 57 (1998) 11510. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.57.11510>.
- [19] D. Toscano, S.A. Leonel, R.A. Dias, P.Z. Coura, J.C.S. Rocha, B.V. Costa, J. Appl. Phys. 109 (2011) 014301. <http://dx.doi.org/10.1063/1.3526970>.
- [20] G.M. Wysin, A.R. Pereira, I.A. Marques, S.A. Leonel, P.Z. Coura, Phys. Rev. B (2005) 094418.
- [21] U. Wolff, Nuclear Phys. B 322 (1989) 759.
- [22] M. Hasenbusch, Marcu, K. Pinn, Phys. A 208 (1994) 124.
- [23] H.J. Mikeska, J. Phys. C: Solid State Phys. 13 (1980) 2913.
- [24] A.S.T. Pires, S.L. Talim, B.V. Costa, Phys. Rev. B 39 (1989) 7149.
- [25] A.S.T. Pires, M.E. Gouvea, J. Phys. C: Solid State Phys. 17 (1984) 4009.
- [26] M.E. Gouvea, A.S.T. Pires, Phys. Rev. B 34 (1986) 306.
- [27] David P. Landau, Kurt Binder (Eds.), A Guid to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics, forth ed., Cambridge Press, 2015.
- [28] J.C.S. Rocha, S. Schnabel, D.P. Landau, M. Bachmann, Phys. Rev. E 90 (2014) 022601.
- [29] Dilina Perera, Ying Wai Li, Markus Eisenbach, Thomas Vogel, David P. Landau, arXiv:1411.4212v1 [cond-mat mtrl-sci].
- [30] T. Vogel, Y.W. Li, T. Wüerst, D.P. Landau, Phys. Rev. Lett. 110 (2013) 210603.
- [31] T. Vogel, Y.W. Li, T. Wüerst, D.P. Landau, Phys. Rev. E 90 (2014) 023302.
- [32] F. Wang, D.P. Landau, Phys. Rev. Lett. 86 (2001) 2050. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.86.2050>.
- [33] Y.W. Li, T. Vogel, T. Wüerst, D.P. Landau, J. Phys. Conf. Ser. 510 (1) (2014) 012012.
- [34] S.T. Bramwell, P.C.W. Holdsworth, J. Appl. Phys. 75 (1994) 5955.
- [35] T. Matsubara, H. Matsuba, Progr. Theoret. Phys. 16 (1956) 416.
- [36] T. Matsubara, H. Matsuba, Progr. Theoret. Phys. 17 (1957) 19.
- [37] P.C. Hohenberg, in: M.S. Green (Ed.), Proceedings of the International School of Physics Enrico Fermi, Course, Vol. 51, Academic, New York/London, 1971, p. 285.
- [38] M.E. Fisher, M.N. Barber, D. Jasnow, Phys. Rev. A 8 (1973) 1111.

- [39] S. Teitel, C. Jayaprakash, *Phys. Rev.* 27 (1983) 598.
- [40] P. Minnhagen, *Phys. Rev. Lett.* 54 (1985) 2351.
- [41] L.S. Ornstein, F. Zernike, *Proc. Acad. Sci. Amsterdam* 17 (1914) 795.
- [42] R. Kenna, A.C. Irving, *Phys. Lett. B* 351 (1995) 273.
- [43] B.V. Costa, P.Z. Coura, S.A. Leonel, *Phys. Lett. A* 377 (2013) 1239. <http://dx.doi.org/10.1016/j.physleta.2013.03.030>.
- [44] B.V. Costa, L.A.S. Mól, J.C.S. Rocha, Energy probability distribution zeros: a route to study phase transitions, *Comput. Phys. Comm.* 216 (2017) 77. <http://dx.doi.org/10.1016/j.cpc.2017.03.003>.
- [45] J.L. Cardy, *Phys. Rev. B* 24 (1981) 5128.

BIBLIOGRAFIA

- [1] C. Kittel; Introduction to Solid State Physics. *John Wiley & Sons*, 8 ed.,(1996).
- [2] A. M. Forrest, Meissner and Ochsenfeld revisited. *European Journal of Physics*, 4(2):117, (1983).
- [3] R. Eisberg, R. Resnick; Física Quântica. *Elsevier*, (1979).
- [4] P.Minnhagen; The two dimensional Coulomb gas, vortex unbinding, and superfluid-superconducting films. *Reviews of Modern Physics* 59,4 (1987).
- [5] J. V. José; 40 Years History of Berezinskii-Kosterlitz-Thouless Theory, *World Scientific*, (2013).
- [6] P. Minnhagen, H. Weber; *Physica B*. 152 (1988) 50.
- [7] J.C.S. Rocha, L.A.S. Mól, B.V. Costa; *Computer Physics Communications*, (2016).
- [8] H.G. Evertz, D.P. Landau; *Phys. Rev. B*. 54 (1996) 12302.
- [9] S. T. Bramwell, P. C. W. Holdsworth. *J. Appl. Phys.* 75 (1994) 5955.
- [10] H.E. Stanley. Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena. *Oxford University Press*, New York, (1971).
- [11] P. Papon, J. Leblond, P. H. E. Meijer, The Physics of Phase Transitions. *Springer*.
- [12] N. Goldenfeld. Lectures on phase transitions and the renormalization group. *Westview Press*, (1992).

- [13] P.Ehrenfest; *Prog. Amsterdam Acad.*. 36,153, (1933).
- [14] M.E.Fisher; *Rept. Prog. Phys.*. 30, 615 (1967).
- [15] N. D. Mermin, H. Wagner; Absence of ferromagnetism or antiferromagnetism in one or two dimensional isotropic heisenberg models. *Physical Review Letters*, 17(22):1133, (1966).
- [16] K. Binder, Ising model, in Hazewinkel, Michiel, *Encyclopedia of Mathematics*, Springer, (2001).
- [17] J. M. Kosterlitz, D. J. Thouless. Long range order and metastability in two dimensional solids and superfluids. *Journal of Physics C: Solids state physics*, 5(11):L124, (1972).
- [18] J. M. Kosterlitz, D. J. Thouless. Ordering, metastability and phase transitions in two dimensional systems. *Journal of Physics C: Solids state physics*, 6(7):1181, (1973).
- [19] V. L. Bereziskii, *Zh. Eksp. Teor. Fiz.*, 61, 1144, (1971).
- [20] "The Nobel Prize in Physics 2016 - Popular Science Background". *Nobelprize.org*. Nobel Media AB 2014. Web. 6 Feb 2017. <http://www.nobelprize.org/nobel_prizes/physics/laureates/2016/popular-physicsprize.pdf>
- [21] "The Nobel Prize in Physics 2016 - Advanced Information". *Nobelprize.org*. Nobel Media AB 2014. Web. 6 Feb 2017. <http://www.nobelprize.org/nobel_prizes/physics/laureates/2016/advanced.html>
- [22] L. H. Kauffman, R. A. Baadhio. Quantum Topology. *World Scientific*, (1995).
- [23] S.E Korshunov, T. Nattermann. Phase diagram of a Josephson junction array with positional disorder. *Physica B*,222 (1996).
- [24] Young-Je Yun, In-Cheol BaeK, Mu-Yong Choi. Phase transition and critical dynamics in site-diluted Josephson-Junction arrays. *PRL* 97,215701 (2006).

- [25] M. Z. Hasan, C. L. Kane; Topological Insulators. *Rev. Mod.Phys.*, 82, 3045,(2010).
- [26] D. J. Thouless, M. Kohmoto, M. P. Nightingale, M. D. Nijs. Quantized Hall Conductance in a Two-dimensional Periodic Potential. *Physical Review Letters*, 49, 405, (1982).
- [27] F.D.M. Haldane. Model for a Quantum Hall Effect without Landau Levels: Condensed-Matter Realization of the "Parity Anomaly". *Physical Review Letters*, 61(18):2015, (1988).
- [28] Cui-Zu Chang, Jinsong Zhang, Xiao Feng, Jie Shen, Zuocheng Zhang, Minghua Guo, Kang Li, Yunbo Ou, Pang Wei, Li-Li Wang, et al. Experimental observation of the quantum anomalous hall effect in a magnetic topological insulator. *Science*, 340(6129):167, (2013).
- [29] F.D.M. Haldane. Continuum dynamics of the 1-D Heisenberg antiferromagnet: Identification with the O(3) nonlinear sigma model. *Physics Letters A*, 93(9):464, (1983).
- [30] F.D.M. Haldane. Nonlinear Field Theory of Large-Spin Heisenberg Anti-ferromagnets: Semiclassically Quantized Solitons of the One-Dimensional Easy-Axis Néel State. *Physical Review Letters*, 50(15):1153, (1983).
- [31] F. Pollmann, A. M. Turner, E. Berg, M. Oshikawa; Entanglement spectrum of a topological phase in one dimension. *Physical Review B*, 81(6):064439, (2010).
- [32] H. G. Evertz, D. P. Landau; *Phys. Rev. B*, 54, 12302, (1996).
- [33] J. E. R. Costa, B. V. Costa, D. P. Landau; *Phys. Rev. B*, 57, 11510, (1998).
- [34] G. M. Wysin, A. R. Pereira, I. A. Marques, S. A. Leonel, P. Z. Coura; *Phys. Rev. B*, 094418, (2005).
- [35] B. V. Costa, P. Z. Coura, S. A. Leonel. Berezinskii-Kosterlitz-Thouless transition close to the percolaion threshold. *Physics Letters A*, 377, (2013).
- [36] J. C. S. Rocha, L. A. S. Mol, B. V. Costa. Using zeros of the canonical partition function map to detect signatures of a Berezinskii-Kosterlitz-Thouless transition. *Computer Physics Communications*, 209, (2016).

- [37] B. V. Costa, L. A. S. Mol, J. C. S. Rocha; Energy Probability Distribution Zeros: A Route to Study Phase Transitions. *Computer Physics Communications*, (216), (2017).
- [38] B.V.Costa, L.S.Lima, P.Z. Coura, S.A.Leonel, A.B.Lima. Kosterlitz-Thouless Transition: The Diluted XY model. *Journal of Physics: Conference Series* 487 (2014).
- [39] P. M. Chaikin, T. C. Lubensky, Principles of Condensed of Matter Physics. *Cambridge University Press*, (1995).
- [40] L. Onsager. *Physics Review*, 65, 117, (1944).
- [41] L. D. Landau, E. M. Lifshitz; Statistical Physics. *Pergamon Press, Oxford*, (1969).
- [42] P.C.Hohenberg, B.I.Halperin. *Rev. Mod. Phys.*, 49,435 (1977).
- [43] D. Landau, K.Binder; A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics. *Cambridge University Press*, (2015).
- [44] D. Pereira, Y. W. Li, M. Eisenbach, T. Vogel, D. P. Landau, arXiv:1411.4212v1[cond-mat.mtrl-sci].
- [45] M.E.J.Newman,G.T.Barkema; Monte Carlo Methods in Statistical Physics. *Oxford University Press*, (1999).
- [46] J. Villain. *J. Phys. (Paris)*, 36, 581, (1975).
- [47] J. V. José, L. P. Kadanoff, S. Kirkpatrick, D. R. Nelson; Renormalization, vortices, and symmetry-breaking perturbations in the two-dimensional planar model. *Physics Review B*, 16,(1997).
- [48] J. B. Kogut. An introduction to a lattice gauge theory and spin systems. *Reviews of Modern Physics*, 51, (1979).
- [49] S.E. Korshunov,T.Nattermann; Phase diagram of a Josephson junction array with positional disorder. *Physica B* 222,280, (1996).

- [50] S.R.A.Salinas; Introdução a Física Estatística. *Edusp*, (1971).
- [51] J. P. Rino, B. V. Costa; ABC da Simulação Computacional. *Livraria da Física*, (2013).
- [52] N.Metropolis *et al.*. *J. Chem. Physics*. 21,1087, (1953).
- [53] F. Wang and D. P. Landau. *Phys. Rev. Lett.* 86, 2050, (2001).
- [54] J.C.S. Rocha, S. Schnabel, D.P. Landau, and M. Bachmann. *Phys. Rev. E* 90(2014)022601.
- [55] T.Vogel,Y.W.Li,T.Wust,D.P.Landau; Generic, Hierarchical Framework for Massively Parallel Wang-Landau Sampling. *Physical Review Letters* 110,210603 (2013).
- [56] T.Vogel,Y.W.Li,T.Wust,D.P.Landau; Generic. *Physical Review E* 90 (2014) 023302.
- [57] J. E. R. Costa; B. V. Costa, D. P. Landau; Dynamic behavior vortices in the classical two dimensional anisotropic Heisenberg model. *Physical Review B*, 57, 18, (1998).
- [58] B.V. Costa. *Braz. J. Phys.* 41, 94, (2011).
- [59] C. Domb, J. L. Lebowitz; Phase Transitions and Critical Phenomena. *Academic Press*, Vol. 7, (1983).
- [60] J. W. Essam; Percolation theory. *Rep. Prog. Phys.* 43, (1980).