

UNIVERSIDADE FEDERAL DE MINAS GERAIS  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

GABRIEL BRUNO GARCIA DE SOUZA

MÉTODOS COMPUTACIONAIS DE MONTE CARLO  
PARA DETERMINAR OS ZEROS DE FISHER  
NO MODELO DE HEISENBERG ANISOTRÓPICO 2D

BELO HORIZONTE  
2021

Gabriel Bruno Garcia de Souza

**Métodos Computacionais de Monte Carlo para  
determinar do Zeros de Fisher no Modelo de Heisenberg  
Anisotrópico 2D**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física do Instituto de Ciências Exatas da Universidade Federal de Minas Gerais como requisito parcial para obtenção do título de Mestre em Ciências.

Orientador: Bismarck Vaz da Costa

Belo Horizonte

2021

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP)

S729m Souza, Gabriel Bruno Garcia de.  
Métodos computacionais de Monte Carlo para determinar do zeros de Fisher no modelo de Heisenberg anisotrópico 2D / Gabriel Bruno Garcia de Souza. – 2021.  
56f., enc. : il.

Orientador: Bismarck Vaz da Costa.  
Dissertação (mestrado) – Universidade Federal de Minas Gerais, Departamento de Física.  
Bibliografia: f. 52-56.

1. Mecânica estatística. 2. Método de Monte Carlo. 3. Transição de fase. 4. Modelo de Heisenberg. I. Título. II. Costa, Bismarck Vaz da. III. Universidade Federal de Minas Gerais, Departamento de Física.

CDU – 531.19 (043)



UNIVERSIDADE FEDERAL DE MINAS GERAIS  
INSTITUTO DE CIÊNCIAS EXATAS  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

### FOLHA DE APROVAÇÃO

A presente dissertação, intitulada “**Métodos Computacionais de Monte Carlo para determinar do Zeros de Fisher no Modelo de Heisenberg Anisotrópico 2D**”, de autoria de **GABRIEL BRUNO GARCIA DE SOUZA**, submetida à Comissão Examinadora, abaixo-assinada, foi aprovada para obtenção do grau de **MESTRE EM FÍSICA** em 21 de outubro de 2021.

Belo Horizonte, 21 de outubro de 2021.

Prof. Bismarck Vaz da Costa  
Orientador do estudante  
Departamento de Física/UFMG

Prof. Lucas Álvares da Silva Mol  
Departamento de Física/UFMG

Prof. João Antônio Plascak  
Departamento de Física/UFMG



Documento assinado eletronicamente por **Lucas Alvares da Silva Mol, Professor do Magistério Superior**, em 22/10/2021, às 09:19, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 5º do [Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020](#).



Documento assinado eletronicamente por **João Antonio Plascak, Membro**, em 22/10/2021, às 13:37, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 5º do [Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020](#).



Documento assinado eletronicamente por **Bismarck Vaz da Costa, Diretor(a)**, em 25/10/2021, às 17:22, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 5º do [Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020](#).

---



A autenticidade deste documento pode ser conferida no site [https://sei.ufmg.br/sei/controlador\\_externo.php?acao=documento\\_conferir&id\\_orgao\\_acesso\\_externo=0](https://sei.ufmg.br/sei/controlador_externo.php?acao=documento_conferir&id_orgao_acesso_externo=0), informando o código verificador **1035711** e o código CRC **1BF41DC2**.

---

Referência: Processo nº 23072.254752/2021-83

SEI nº 1035711

# Agradecimentos

Ao Prof. Bismarck Vaz da Costa pelo excelente orientação e incentivo desde à iniciação científica.

À minha família por sempre ter me apoiado na minha trajetória como físico e pesquisador, em especial ao meu pai Wellington e minha mãe Valéria.

Aos professores Lucas Álvares da Silva Mol e Júlio César Siqueira Rocha pelas discussões frutíferas.

Ao professor Von Braun Nascimento pelo meu recente ingresso em seu grupo de pesquisa.

A todos os meus amigos e colegas de trabalho do Departamento de Lucas Menicucci, Vitor Lima, Catarina Haase, Maria Clara Alvim, Guilherme Moura, Maria Cristina Maia, Ronaldo Givisiez, Rodrigo Stancioli, e tantos outros que participaram da minha caminhada na física desde meu ingresso em 2016.

Em especial à Laura Detoni Baêta de Melo Cançado pelo apoio e pela disponibilidade para me auxiliar na redação deste trabalho no que refere ao português e à escrita.

Aos professores Nelson Yokomizo, Emmanuel Pereira, Carlos Heitor Fonseca, Lucas Wardil, Luís Gustavo Cançado e Silas Luiz de Carvalho por terem ministrado excelentes cursos durante minha graduação e mestrado.

Aos meus amigos de fora do ambiente universitário.

Aos professores e funcionários técnico-administrativos da UFMG, em particular do ICEX e do Departamento de Física.

Ao CNPq pela concessão da bolsa e, assim como à FAPEMIG, pelo suporte ao Laboratório de Simulação

A Deus e a Nossa Senhora Maria Santíssima.

# Resumo

Nesse trabalho estudou-se as transições de fase características do modelo de Heisenberg anisotrópico em uma rede quadrada bidimensional variando o parâmetro de anisotropia  $\delta$  que acompanha a componente  $z$  do spin. Nesse estudo utilizou-se métodos de Monte Carlo sofisticados para simular o modelo e um conjunto de técnicas de histogramas com um método baseado no conhecimento parcial dos Zeros de Fisher capaz de determinar, com grande precisão, a localização do zero dominante. O método se mostrou capaz de determinar tanto as temperaturas quanto os expoentes críticos para diversos valores de  $\delta$ . O Modelo apresenta transição de fase de Ordem-Desordem para  $\delta > 1$  que é pertencente à classe de universalidades do *Ising 2D*. O foco do trabalho foi analisar o modelo para  $\delta \rightarrow 1^-$  e obter vários valores de temperaturas críticas. Nenhuma transição de fase no limite isotrópico em que  $\delta = 1$  foi detectada, como esperado.

**Palavras-chave:** Transição de fase, Monte Carlo, Mecânica Estatística, Metrópolis, Wolff, Zeros de Fisher, Modelo de Heisenberg, Magnetismo

# Abstract

In this work we studied the phase transitions that characterize the Anisotropic Heisenberg spin model varying the anisotropy parameter  $\delta$ . In this work we used Monte Carlo Methods to run simulations of the model and used a "reweighting" method based on the energy histograms combined with a method based on the partial knowledge of the Fisher Zeros that allow the determination of the dominant zero with precision. The method used in this work was sufficient to determine the critical exponents that describes the phase transitions and allowed us to obtain the critical temperatures for many values of  $\delta$ . The model shows an Order-Disorder phase transition for  $\delta > 1$  that belongs to the *2D Ising* universality class. The main focus was to study the model for  $\delta \leftarrow 1^-$ . Any phase transition at the isotropic limit  $\delta = 0$ , was detected.

**Keywords:** Phase Transition, Monte Carlo, Statistical Mechanics, Metropolis, Wolff, Fisher Zeros, Heisenberg Model, Magnetism



# Sumário

<b>1</b>	<b>O MODELO DE HEISENBERG ANISOTRÓPICO</b>	<b>13</b>
<b>1.1</b>	<b>O modelo</b>	<b>13</b>
<b>1.2</b>	<b>Considerações gerais sobre o modelo</b>	<b>14</b>
1.2.1	Análise energética	14
<b>2</b>	<b>TRANSIÇÕES DE FASE</b>	<b>18</b>
<b>2.1</b>	<b>Transições e grandezas termodinâmicas</b>	<b>18</b>
<b>2.2</b>	<b>Parâmetro de ordem e quebra espontânea de simetria</b>	<b>19</b>
<b>2.3</b>	<b>Exponentes críticos e classes de universalidades</b>	<b>20</b>
<b>2.4</b>	<b>O teorema de Mermin-Wagner</b>	<b>22</b>
<b>3</b>	<b>EFEITOS DE TAMANHO FINITO (<i>FINITE SIZE SCALING</i>)</b>	<b>24</b>
<b>3.1</b>	<b>Escala dos potenciais termodinâmicos</b>	<b>24</b>
<b>3.2</b>	<b>Escala das correlações críticas</b>	<b>25</b>
<b>3.3</b>	<b>Aplicação das leis de escala na análise das simulações</b>	<b>27</b>
<b>4</b>	<b>SIMULAÇÃO E ANÁLISE DOS DADOS</b>	<b>29</b>
<b>4.1</b>	<b>Simulação: métodos de Monte Carlo</b>	<b>29</b>
4.1.1	Cadeias de Markov e equação de balanço detalhado	30
4.1.2	Algoritmo de Metrópolis	30
4.1.3	Algoritmo de Wolff	32
4.1.4	Superrelaxação	33
4.1.5	Algoritmo híbrido utilizado	34
<b>4.2</b>	<b>Análise dos dados: método de histogramas</b>	<b>34</b>
4.2.1	Histogramas simples	34
4.2.2	Histogramas múltiplos	36
<b>4.3</b>	<b>Análise dos dados: zeros da distribuição de probabilidades da energia (EPD)</b>	<b>38</b>
4.3.1	Zeros de Fisher	38
4.3.2	Zeros de EPD	39
<b>5</b>	<b>RESULTADOS E DISCUSSÕES</b>	<b>43</b>
<b>5.1</b>	<b>Convergência das simulações</b>	<b>43</b>
<b>5.2</b>	<b>Resultados das simulações</b>	<b>44</b>
<b>6</b>	<b>CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS</b>	<b>52</b>

<b>REFERÊNCIAS</b>	<b>53</b>
--------------------	-----------

# Introdução

Registros acerca de materiais com propriedades magnéticas podem ser constatados a pelo menos 2500 anos, fazendo com que o Magnetismo seja uma das áreas mais antigas da física. Na primeira metade do século XIX, os experimentos de Michael Faraday fizeram com que o estudo deste ramo atingissem seu ápice, especialmente pelo respaldo matemático adequado fornecido por James Clerk Maxwell, responsável por propor a primeira teoria de unificação de fenômenos elétricos e magnéticos. Posteriormente, a introdução da mecânica estatística, desenvolvida principalmente por Ludwig Boltzmann, permitirá o uso da teoria de Maxwell para explicar os materiais magnéticos.

Os fenômenos do magnetismo podem ser melhor explicados analisando-se os campos gerados pelas cargas e correntes de cada átomo de um material magnético, assim como o comportamento do conjunto de grande número destes mesmos átomos. De forma mais técnica, pode-se dizer que os estudos teóricos envolvendo materiais magnéticos se dão por meio da Mecânica Estatística [1, 2].

A Mecânica estatística surge no final do século XIX para explicar a *teoria cinética dos gases* em termos do comportamento de suas partículas constituintes. Baseada principalmente na *hipótese ergódica* [3] que estabelece que estados de mesma energia têm a mesma probabilidade de ocorrerem. A Física Estatística, a partir de interações microscópicas por meio de médias no estado de equilíbrio do sistema, tem como principal objetivo obter informações macroscópicas, denominados de grandezas termodinâmicas (como a energia interna e o calor específico). Dessarte, a Mecânica Estatística é a ferramenta que estabelece a conexão entre a Mecânica, seja ela clássica ou quântica, com a Termodinâmica.

O desenvolvimento de computadores, especialmente a partir da década de 1960, possibilitou o surgimento de uma nova perspectiva para resolução de problemas, ainda que de forma não analítica. Assim, tornou-se viável o uso de simulações não apenas para impulsionar o estudo de materiais magnéticos, mas também como algo essencial para diversas áreas do conhecimento. São duas as técnicas principais de simulação: Dinâmica Molecular e Monte Carlo [1, 4, 5].

Simulações usando técnicas de dinâmica molecular baseiam-se na resolução numérica das equações de movimento para se estudar um sistema físico. Em problemas clássicos pode-se resolver tanto a **2ª Lei de Newton** quanto as **Equações de Euler-Lagrange** [6] e em problemas quânticos costuma-se resolver a **Equação de Schrödinger** [7]. Simulações usando técnicas de Monte Carlo, por sua vez, baseiam-se no uso de números aleatórios e na **lei dos grandes números** para se obter informações probabilísticas de um sistema físico.

A partir destas técnicas e adjunto com "experimentos computacionais" teve-se o desenvolvimento acelerado de novas tecnologias, assim como a descoberta de novos materiais, propiciando o nascimento de novas teorias e abrindo inúmeras ramificações para pesquisas. Assim, uma das mais exaltadas e eficientes aplicações da Mecânica Estatística será no estudo de transições de fase. Como exemplo, pode-se citar a solução analítica do Modelo de Ising bidimensional feita por Lars Onsager [8] em 1944. Este estudo recebe grande destaque e tem grande importância por ser o primeiro modelo microscópico a apresentar descontinuidades em suas funções termodinâmicas, em especial uma divergência logarítmica no calor específico. Descontinuidades nas funções termodinâmicas são os principais indicativos de que um sistema passa por uma transição de fase.

No desenvolvimento desta pesquisa, modelamos um material magnético na forma de uma rede de spins que interagem entre si, de acordo com algum potencial. Dessa forma, estudamos as transições de fase do Modelo de Heisenberg Anisotrópico em duas dimensões.

No modelo isotrópico a energia é dependente de termos de acoplamento da forma  $\mathbf{S}_j \cdot \mathbf{S}_i$ , i.e., as três componentes do spin  $\mathbf{S}_i$  têm o mesmo peso em sua contribuição para a energia. Conseqüentemente, a menos que seja aplicado um campo externo  $\mathbf{H}$ , o sistema não tem uma direção preferencial de magnetização e, portanto, não pode apresentar o que é conhecido como *quebra espontânea de simetria*, tornando-o incapaz de explicar a transição de fase característica de um material ferromagnético. Tal resultado é conhecido como **Teorema de Mermin-Wagner** [9]

Entretanto, ao se introduzir uma anisotropia entre as componentes do spin  $\mathbf{S}_i = S_i^x \mathbf{x} + S_i^y \mathbf{y} + S_i^z \mathbf{z}$ , é possível que o sistema tenha uma direção preferencial de magnetização sem que haja a necessidade de se aplicar um campo externo. Então, introduzindo uma anisotropia da forma  $\delta S_i^z S_j^z$  tal que  $\delta > 1$ , podemos obrigar o sistema a passar por uma transição de fase e, além disso, estudar qual o tipo de transição que o sistema sofre através de seus expoentes críticos, verificando se o modelo mantém sua devida *classe de universalidades* para valores muito próximos do limite isotrópico, i.e.,  $\delta \rightarrow 1^+$ .

No primeiro capítulo deste trabalho, apresentar-se-á o Hamiltoniano de interesse, analisando-se assim o modelo de Heisenberg Anisotrópico. O segundo capítulo será dedicado à discussões sobre transições de fases e suas principais características. No terceiro capítulo será discutido acerca das teorias de escala de tamanho finito (ou, em inglês, *finite size scaling - FSS*), de forma a saber como se pode tirar conclusões do modelo em estudo no limite termodinâmico  $N \rightarrow \infty$ , usando apenas redes de tamanho finito. As técnicas computacionais tanto para simulação como para análise dos dados obtidos serão introduzidas no quarto capítulo. O quinto capítulo é reservado para a discussão dos resultados obtidos. Finalmente, no sexto capítulo, evidenciaremos as conclusões e perspectivas sobre a pesquisa.

# 1 O modelo de Heisenberg anisotrópico

Transições de fase são observadas nos mais diversos tipos de sistemas físicos, podendo ser claramente evidenciadas pela transformação de água líquida em vapor ou em um ímã que perde sua magnetização à alta temperatura. Neste trabalho iremos discutir as fases existentes no modelo de Heisenberg anisotrópico descrito pelo seguinte hamiltoniano:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \left( S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y + \delta S_i^z S_j^z \right). \quad (1.1)$$

A notação  $\langle i, j \rangle$  indica apenas soma entre os primeiros vizinhos e  $\delta$  uma anisotropia que, dependendo do valor, poderá criar um eixo fácil ( $\delta > 1$ ) ou um plano fácil ( $\delta < 1$ ). O caso isotrópico ( $\delta = 1$ ) é conhecido por não apresentar nenhuma direção preferencial de magnetização.

O modelo é simulado em uma rede quadrada com condições periódicas de contorno. As componentes  $S^x$ ,  $S^y$  e  $S^z$  serão tratadas em uma aproximação clássica, i.e., como vetores e não como operadores. Tal aproximação é válida em situações onde o spin das partículas na rede cristalina é suficientemente grande, fazendo com que as relações de comutação entre os spins possam ser ignoradas [10].

## 1.1 O modelo

O modelo foi introduzido por Werner Heisenberg em 1935 para descrever um material magnético. Abaixo discutimos suas principais propriedades [11].

1. Neste trabalho vamos considerar os spins localizados em uma rede de modo que a variável de spin  $\mathbf{S}_j$  esteja associada com seu sítio  $j$ .

Nas situações onde a dinâmica de spins é muito mais rápida que o movimento dos íons, podemos supor que os spins residem em sítios fixos. Assim, um modelo geral de interações entre dois spins da rede, definido pelo hamiltoniano abaixo, se mostra adequado para tratar tais problemas:

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N J_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - g\mu_B \sum_{i=1}^N \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{H} \quad (1.2)$$

em que o fator de 1/2 foi inserido para evitar dupla contagem,  $\mathbf{H}$  é o campo magnético externo aplicado,  $g\mu_B$  é o momento magnético por spin e  $J_{ij}$  é a constante de acoplamento entre os spins nos sítios  $i$  e  $j$ . Se positiva, a constante descreve

um modelo ferromagnético e, se negativa, descreve um modelo antiferromagnético. O termo de acoplamento tem origem em fenômenos puramente quânticos, estando relacionada com a superposição das funções de onda das partículas nos sítios  $i$ . Sua dedução formal pode ser encontrada na referência [12].

2. Consideraremos então que os spins serão identificados por suas posições na rede, que deverão ser quadradas, de dimensões  $L \times L$  e espaçamento unitário em cada direção. Tais considerações são importantes, pois garantem que o spin com índices  $i, j$  estarão localizados em pontos específicos. A interação será considerada entre vizinhos próximos e tomaremos  $J_{i,j} = J > 0$ .

## 1.2 Considerações gerais sobre o modelo

De acordo com as condições estabelecidas acima, o modelo definido em (1.1) também pode ser definido de maneira equivalente pelo seguinte hamiltoniano:

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= -J \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + A \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^z S_j^z \\ &= -J \sum_{\langle i,j \rangle} \left[ S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y + S_i^z S_j^z - \frac{A}{J} S_i^z S_j^z \right] \\ &= -J \sum_{\langle i,j \rangle} \left[ S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y + \left( 1 - \frac{A}{J} \right) S_i^z S_j^z \right]. \end{aligned}$$

em que o termo  $A \sum S_i^z S_j^z$  é uma anisotropia de troca e tem sua origem física relacionada à existência de uma direção preferencial dos momentos magnéticos que provêm de acoplamentos entre camadas magnéticas em sistemas com multicamadas [13]. Definindo o hamiltoniano reduzido  $H = \mathcal{H}/J$  e a constante de anisotropia  $\delta = (1 - A/J)$ , tem-se o hamiltoniano da forma apresentada em (1.1):

$$H = - \sum_{\langle i,j \rangle} \left( S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y + \delta S_i^z S_j^z \right) \quad (1.3)$$

### 1.2.1 Análise energética

Em baixas temperaturas, a maximização da entropia se torna secundária de forma que o sistema tende a se organizar de forma a minimizar sua energia [14]. Assim, podemos fazer uma análise em função de  $\delta$  para saber o comportamento esperado em baixas temperaturas.

O spin da rede pode ser decomposto em coordenadas esféricas [15]:

$$\mathbf{S} = S^x \hat{\mathbf{x}} + S^y \hat{\mathbf{y}} + S^z \hat{\mathbf{z}}, \quad \begin{cases} S^x = \sin \theta \cos \varphi \\ S^y = \sin \theta \sin \varphi \\ S^z = \cos \theta \end{cases} \quad (1.4)$$

Logo, o cada produto de componentes do spin pode ser reescrito em termo dos ângulos como:

$$\begin{cases} S_i^x S_j^x = \cos \varphi_i \sin \theta_i \cos \varphi_j \sin \theta_j \\ S_i^y S_j^y = \sin \varphi_i \sin \theta_i \sin \varphi_j \sin \theta_j \end{cases} \implies S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y = \cos(\varphi_i - \varphi_j) \sin \theta_i \sin \theta_j$$

$$\delta S_i^z S_j^z = \delta \cos \theta_i \cos \theta_j$$

de forma que o hamiltoniano é dado por

$$H = - \sum_{\langle i,j \rangle} [\cos(\varphi_i - \varphi_j) \sin \theta_i \sin \theta_j + \delta \cos \theta_i \cos \theta_j]. \quad (1.5)$$

Ao se considerar a situação da figura 1.1 a energia deste arranjo será:

$$\begin{aligned} -h_0 &= \cos(\varphi_0 - \varphi_1) \sin \theta_0 \sin \theta_1 + \delta \cos \theta_0 \cos \theta_1 + \cos(\varphi_0 - \varphi_2) \sin \theta_0 \sin \theta_2 + \\ &+ \delta \cos \theta_0 \cos \theta_2 + \cos(\varphi_0 - \varphi_3) \sin \theta_0 \sin \theta_3 + \delta \cos \theta_0 \cos \theta_3 + \\ &+ \cos(\varphi_0 - \varphi_4) \sin \theta_0 \sin \theta_4 + \delta \cos \theta_0 \cos \theta_4, \end{aligned}$$

podendo ser decomposto em  $h_i = h_{i0} + \delta h_{i\delta}$  de tal maneira que o primeiro termo seja independente da anisotropia  $\delta$ , na forma:

$$\begin{aligned} h_{i0} &= - \sin \theta_0 [\cos(\varphi_0 - \varphi_1) \sin \theta_1 + \cos(\varphi_0 - \varphi_2) \sin \theta_2 + \\ &+ \cos(\varphi_0 - \varphi_3) \sin \theta_3 + \cos(\varphi_0 - \varphi_4) \sin \theta_4] \end{aligned} \quad (1.6)$$

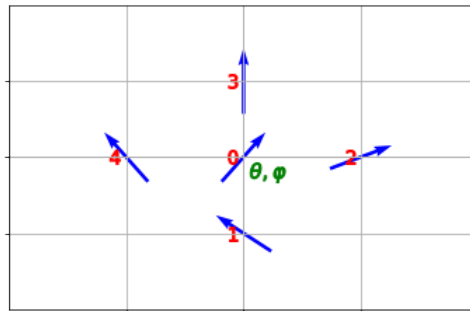


Figura 1.1 – Desenho esquemático do arranjo de spins. As setas azuis indicam os spins apontando em direções aleatórias. Os ângulos  $\theta$  e  $\varphi$  determinam a direção do spin 0

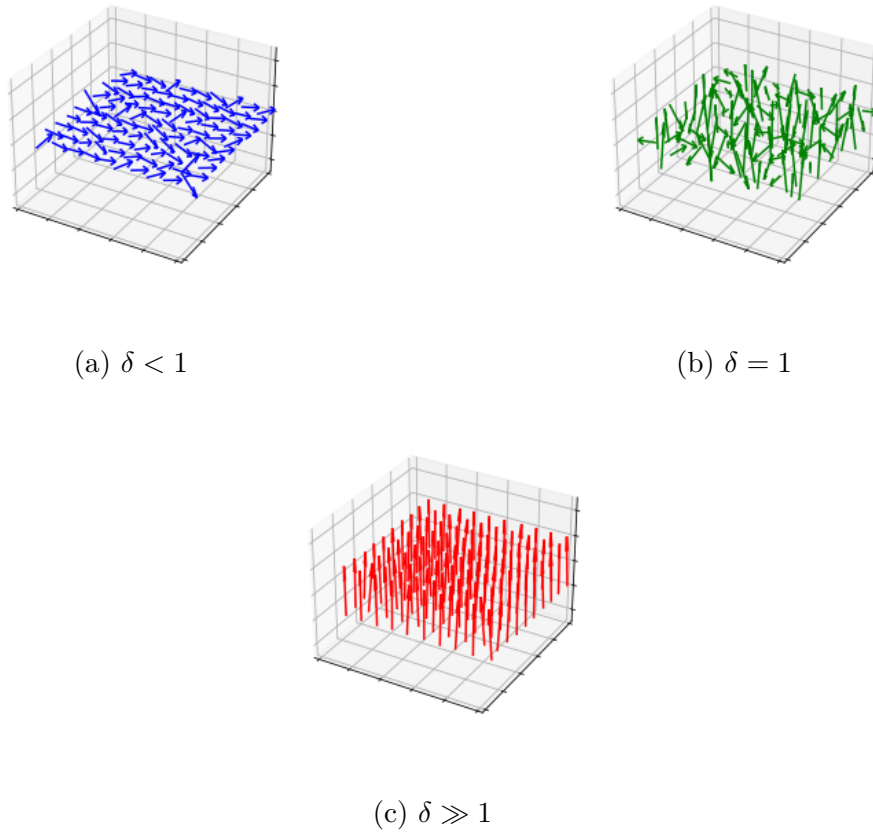


Figura 1.2 – Os três possíveis casos de orientação dos spins para vários valores de  $\delta$ .

e que o segundo termo carregue a anisotropia do sistema

$$h_{i\delta} = -\cos \theta_0 (\cos \theta_1 + \cos \theta_2 + \cos \theta_3 + \cos \theta_4). \quad (1.7)$$

Abaixo fazemos uma análise energética para os três casos:  $\delta \gg 1$ ,  $\delta < 1$  e o caso limite  $\delta = 1$ .

1. Caso  $\delta \gg 1$ :

O termo  $h_{i0}$  assume seu menor valor quando os spins adjacentes tem as mesmas componentes planares, i.e.,  $\varphi_0 = \varphi_{1,2,3,4}$ . Com os spins alinhados no plano, o valor mínimo que  $h_1$  pode ter é:

$$h_{i0} = -4 \sin \theta_0.$$

Porém, mais importante que  $h_{i0}$ , para a orientação do sistema, será o termo  $h_{i\delta}$ , sendo este responsável por acompanhar  $\delta$  que, neste caso, assume valores grandes. Expressando-se a anisotropia  $\delta$  em termos dos ângulos  $\theta_i$  quando igualamos  $h_{i0}$  e  $\delta h_{i\delta}$  (ainda considerando  $\varphi_0 \approx \varphi_i$ ), obteremos a seguinte relação:



$$\delta = \tan \theta_0 \frac{\sin \theta_1 + \sin \theta_2 + \sin \theta_3 + \sin \theta_4}{\cos \theta_1 + \cos \theta_2 + \cos \theta_3 + \cos \theta_4}. \quad (1.8)$$

Supondo que o sistema esteja orientado em  $z$ , i.e.,  $\theta_i \approx 0$ . Isto significa que o numerador tenderia a zero com o denominador tendendo a 4. Ora, isto implicaria que  $\delta \approx 0$  de tal forma de que o regime  $\delta \gg 1$  teria de ser abandonado durante a análise. Agora, em suposições de que o sistema se oriente em uma direção diferente de  $z$ , e.g., a direção em que todos os spins tenham  $\theta_i = \pi/3$ . Substituindo os valores de seno, cosseno e tangente em cada um dos ângulos levaria à conclusão de que  $\delta = 3$ . Dessa forma, é possível que o sistema se oriente em uma direção que não seja  $z$  quando  $\delta > 1$ .

Este de comportamento é conhecido como **Ferromagnético**, caracterizado pela existência de uma *direção preferencial*, seja ela a direção  $z$  ou não. Na literatura tal tipo de comportamento também é chamado de **Tipo Ising**, uma vez que no modelo de Ernest Ising [8, 16] considera-se apenas a componente  $z$  do spin no hamiltoniano, caracterizando um modelo altamente anisotrópico em  $z$ . Estudos de Monte Carlo já existentes sobre este modelo neste regime de  $\delta$  podem ser encontrados em [17, 18].

## 2. Caso $\delta = 1$

Tal caso é conhecido como **Modelo de Heisenberg Bidimensional**. Neste regime não há direção preferencial e o sistema não apresenta qualquer comportamento crítico.

## 3. Caso $0 < \delta < 1$

Neste limite, o menor valor que  $h_{i\delta}$  pode ter é  $h_{i\delta} = -4$ . Sendo assim,  $h_{i0}$  terá uma contribuição maior para o ordenamento do sistema que  $\delta h_{i\delta}$ . Portanto, de forma a se ter uma ordem local, o sistema deve ficar no plano. Este comportamento magnético é chamado de *planar*, ou **Tipo XY**. Estudos de Monte Carlo já existentes na literatura para este regime de  $\delta$  podem ser encontrados em [19]

## 2 Transições de fase

Este capítulo é dedicado à uma breve revisão sobre os conceitos básicos que abrangem o estudo de transições de fases. São exemplos familiares deste assunto a condensação da água ou a fusão de gelo, processos de fácil visualização marcados por uma significativa alteração no sistema.

Perto de uma transição de fase, as propriedades termodinâmicas de um sistema sofrem mudanças bruscas em resposta às variações contínuas das condições externas, tais como temperatura, pressão ou do campo magnético aplicado. Além disso, o entendimento das transições de fase é relacionado com a *quebra espontânea de simetria*, da qual o sistema sob análise sofre, possibilitando a definição de um *parâmetro de ordem* [1], caracterizador do sistema.

### 2.1 Transições e grandezas termodinâmicas

A descrição matemática de uma transição de fase se dá por meio da análise de derivadas dos potenciais termodinâmicos. Por exemplo, pode-se observar dessa forma a **Energia Livre de Helmholtz** [14]:

$$F(T, V, N) = U - TS, \quad dF = -SdT - pdV + \mu dN.$$

Assim, grandezas termodinâmicas podem ser escritas como derivadas da energia livre, de forma que sejam descontínuas nos pontos críticos. Dois importantes exemplos são a compressibilidade térmica e o calor específico:

$$K_T = -\frac{1}{V} \left( \frac{\partial V}{\partial p} \right)_T, \quad C_v = \frac{1}{N} \left( \frac{\partial U}{\partial T} \right)_V.$$

Ehrenfest [20] propôs uma classificação para as transições de fase. Uma transição de fase de primeira ordem é aquela em que a primeira derivada da energia livre é descontínua. Por sua vez, em uma transição de segunda ordem, a segunda derivada é contínua porém singular no ponto de transição, que também é conhecido como ponto crítico. Para materiais magnéticos, a energia livre se torna uma função de campo aplicada de forma que sua primeira derivada será a magnetização do sistema, enquanto sua segunda derivada será a susceptibilidade magnética, ou seja, a quantidade de divergência no ponto crítico. Outras classificações são possíveis como aquelas que atribuem calor latente às transições de primeira ordem e susceptibilidade divergente assim como comprimento de correlação

Sistema	Transição	Parâmetro de ordem
Líquido-gás	Evaporação	Diferença de densidade $\Delta\rho = \rho_l - \rho_g$
Magnetita ( $Fe_3O_4$ )	Ferromagnética	Magnetização espontânea $M$
Perovskita ( $CaTiO_3$ )	Ferroelétrica	Polarização espontânea $P$

Tabela 2.1 – Parâmetros de ordem de alguns sistemas. Tabela Adaptada [21]

infinito às transições de segunda ordem. Já é válido mencionar que temperatura crítica e comportamento próximo à criticalidade só é bem definido em transições de segunda ordem, a qual o modelo (1.1) apresenta para  $\delta > 1$ .

## 2.2 Parâmetro de ordem e quebra espontânea de simetria

Lev Landau, de forma a possibilitar uma melhor caracterização e compreensão dos sistemas, introduziu o conceito de **parâmetro de ordem** [1]: uma grandeza, característica do sistema, não nula abaixo da temperatura crítica e nula acima dela. Dessa forma, o parâmetro de ordem do sistema assumirá dois valores: nulo e não-nulo. A fase ordenada é a que o parâmetro de ordem é não nulo e a fase desordenada é a que o parâmetro de ordem é nulo.

Considerando o estudo de transições de fase, dizemos que um sistema tem determinada simetria se o seu Hamiltoniano é invariante por determinada transformação. Um sistema onde a quebra de simetria é evidente é o modelo de Ising. Nele, o Hamiltoniano  $\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^z S_j^z$ <sup>1</sup> pode sofrer uma rotação de todos os spins de  $\theta_i = \pi \forall i$ , sem que a energia seja afetada. Dessa forma, esta operação levará um estado desmagnetizado  $M_z = \hat{\mathbf{z}} \cdot (\sum_i \mathbf{S}_i) = 0$  para o mesmo estado, preservando sua simetria. Em contra partida, levará um estado de magnetização  $M_z = M_0$  para um estado magnetizado em outra direção  $M_z = -M_0$ .

Em baixas temperaturas, não há nada que favoreça o estado de magnetização positiva ou negativa. Assim, durante o resfriamento de um ímã, o sistema será obrigado a escolher um dos estados  $M_z = \pm M_0$ , desencadeando o processo conhecido como **quebra espontânea de simetria**.

A relação entre parâmetro de ordem e simetrias do sistema é explorada ao se considerar a minimização da energia livre como função da temperatura e do parâmetro de ordem  $\psi$ . No caso da ausência de campos aplicados, pode-se estudar o sistema em questão escrevendo a energia livre como uma série de potências pares do parâmetro de ordem, chamada de *tratamento fenomenológico* [1, 11]:

$$F(T, \psi) = a_0(T) + a_2(T)\psi^2 + a_4(T)\psi^4 + \dots \quad (2.1)$$

<sup>1</sup> No modelo de Ising, considera-se que o spin da rede só tem sua componente em  $z$ , i.e.,  $\mathbf{S}_i = S_i^z \hat{\mathbf{z}}$

Já para o caso em que  $a_2 > 0$ , a energia livre tem um único mínimo, em  $\psi = 0$ . Todavia, se  $a_2 < 0$ , o ponto  $\psi = 0$  é um ponto de equilíbrio instável, surgindo 2 mínimos localizados em  $\pm\psi_0$ , ambos com a mesma energia livre. Este é um caso em que o sistema se encontra obrigado a escolher entre estes dois mínimos, promovendo a quebra de simetria. A figura 2.1 ilustra esse processo.

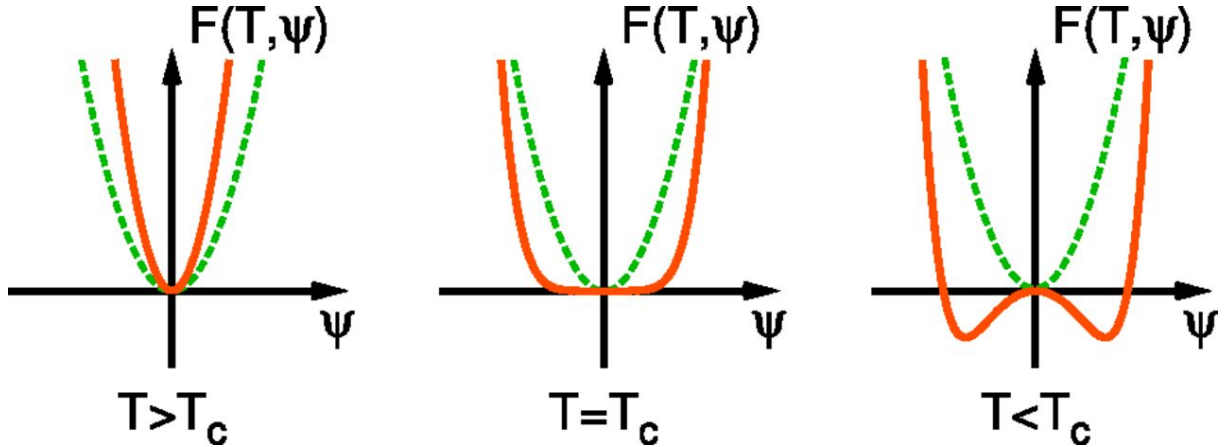


Figura 2.1 – Energia livre de Landau como uma série de potências no parâmetro de ordem. Imagem emprestada de [22]

No sistema em questão, a aplicação de um campo magnético tem o efeito de deslocar verticalmente um dos dois mínimos, de forma que a energia livre tenha somente um mínimo global. Isto faz com que uma transição de fase também seja interpretada como a coexistência de duas fases.

### 2.3 Expoentes críticos e classes de universalidades

Dentre a extrema importância das transições de fase, deve-se ressaltar o grande interesse no estudo do comportamento de grandezas termodinâmicas próximas à elas. Em meados do século XX, estudos experimentais mostravam o comportamento da quantidade nas grandezas termodinâmicas, por meio de leis de potência. O principal destes experimentos, publicado em 1945 [23], compilava os dados obtidos para diferentes tipos de gases, mostrando que a diferença das densidades seguia uma lei de potência universal:  $(\rho_L - \rho_G) = (|T - T_c|/T_c)^\beta$  com  $\beta = 1/3$ . Resultados deste estudo são mostrados na figura 2.2

De fato, é perceptível que várias grandezas macroscópicas seguem tal comportamento em lei de potência quando perto de sua criticalidade. Ao se definir a temperatura reduzida  $t \equiv (T - T_c)/T_c$ , é possível expor alguns desses expoentes (Tabela 2.2).

Dois conceitos importantes para se compreender no estudo de transições de fase são os de **função correlação** e **comprimento de correlação**. Considere um spin  $S_i$

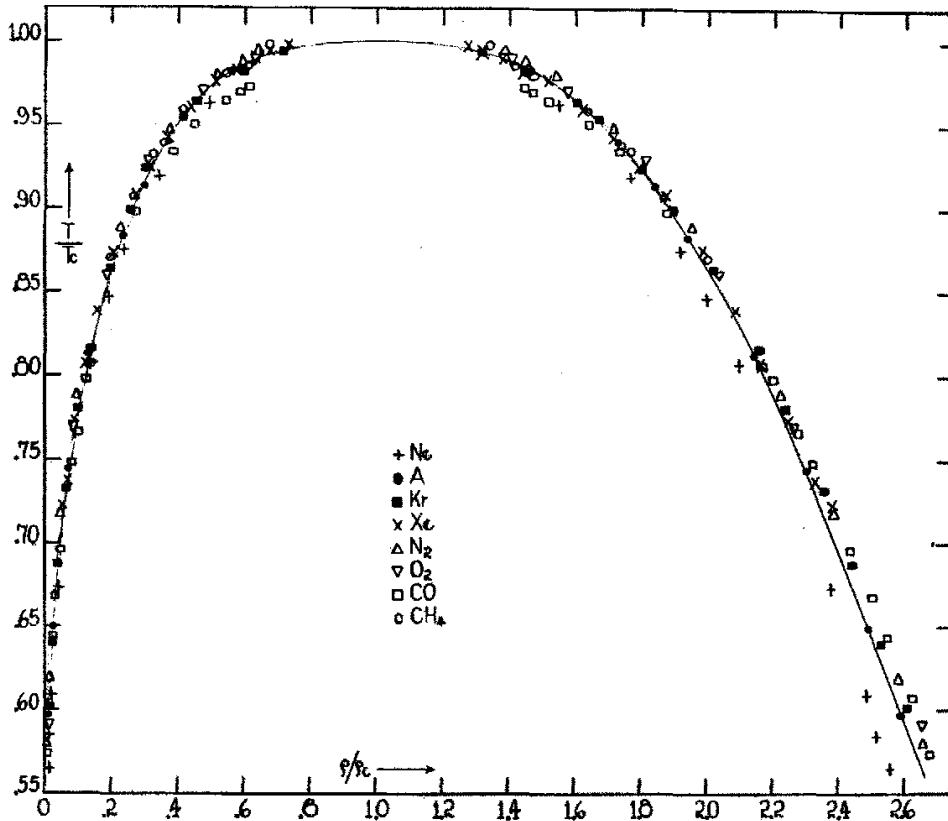


FIG. 2.

Figura 2.2 – Curva de coexistência para gases [23] que ilustra o comportamento de lei de potência do parâmetro de ordem dos gases próximo à transição de fase.

Grandeza	Expoente crítico	Lei de Potência
Calor específico	$\alpha$	$C_v \propto  t ^\alpha$
Magnetização	$\beta$	$M \propto  t ^{-\beta}$
Susceptibilidade	$\gamma$	$\chi \propto  t ^\gamma$
Comprimento de correlação	$\nu$	$\xi \propto  t ^{-\nu}$
Função correlação	$\eta$	$\Gamma(r) \propto r^{-(d-2+\eta)}$

Tabela 2.2 – Grandezas e seu comportamento próximo à criticalidade.  $d$  é a dimensão espacial da rede. Tabela Adaptada [10].

localizado no sítio  $i$  e outro spin  $\mathbf{S}_{i+r}$  em um sítio na distância  $r$  de  $i$ . Pode-se calcular a média termodinâmica do produto de ambos os spins como

$$\Gamma(r) = \langle \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+r} \rangle - \langle \mathbf{S}_i \rangle \langle \mathbf{S}_{i+r} \rangle. \quad (2.2)$$

A média será um valor entre 0 e 1 que indica o "alinhamento médio" entre 2 spins separados por  $r$ : quanto mais próximo de 1, mais eles estão alinhados. Assim, é possível atribuir uma noção de correlação ao sistema ao se observar este alinhamento. Tal observação consiste em analisar se, com o aumento de  $r$  a função  $\Gamma$  não se distancia rapidamente de 1, fazendo com que as alterações do spin em  $i$  se propaguem de forma que seus efeitos não

sejam desprezíveis em  $i + r$ . Neste caso, diz-se que o sistema está altamente correlacionado, sendo uma das principais características do comportamento crítico.

Em sistemas com simetria translacional, o comportamento assintótico da função de correlação é dado pela fórmula de Ornstein-Zernike [24]:

$$\Gamma(r) \approx r^{-\lambda} e^{-\frac{r}{\xi}} \quad (2.3)$$

de forma que, próximo à temperatura crítica,  $\lambda = d - 2 + \eta$  e  $\xi$  são o comprimento de correlação. Tal comprimento será a distancia necessária a se percorrer para que a correlação diminua por um valor de  $1/e \approx 0.37$ . Quando próximo da temperatura crítica, o comprimento de correlação diverge.

A determinação da temperatura crítica depende dos diversos parâmetros associados a cada sistema. Todavia, os expoentes críticos em geral dependem da dimensão espacial  $d$  do sistema físico, dimensão do parâmetro de ordem  $n$  e o alcance das interações microscópicas, de forma que eles assumam valores universais e permitindo que vários sistemas distintos possam compartilhar do mesmo conjunto de expoentes críticos. Neste caso de dois sistemas distintos compartilhando os mesmos expoentes críticos, afere-se que eles pertencem à mesma *classe de universalidade*. A tabela 2.3 ilustra algumas destas classes.

Universalidade	$d$	$n$	$\alpha$	$\beta$	$\gamma$	$\delta$	$\nu$	$\eta$
Ising 2d	2	1	0(log)	1/8	7/4	15	1	1/4
Ising 3d [25]	3	1	0.110(5)	0.325(2)	1.23708(33)		0.69912(86)	0.031(4)
XY	3	2	-0.007(6)	0.3455(20)	1.316(3)		0.669(2)	0.33(4)
Heisenberg	3	3	-1.115(9)	0.3645(25)	1.386(4)		0.705(3)	0.33(4)
Esférico	3	$\infty$	-1	1/2	2	5	1	0

Tabela 2.3 – Expoentes críticos para algumas classes de universalidade. Tabela Adaptada [21].

## 2.4 O teorema de Mermin-Wagner

As condições para que um determinado sistema apresente transição de fase dependem do tipo de simetria que seu Hamiltoniano apresenta. Diferentemente de modelos que apresentam simetria discreta como o de Ising, modelos como o descrito pela equação (1.1) no regime planar ( $0 < \delta \leq 1$ ) apresentam uma simetria contínua.

Qualquer rotação no plano aplicada em todos os spins conserva o hamiltoniano. A presença da simetria contínua faz com que seja possível a existência de ondas de spin, conhecidas como *mágnons*, capazes de dissipar qualquer tipo de ordenamento para longas distâncias, o que impossibilita a existência de uma quebra espontânea de simetria. A impossibilidade da quebra espontânea de simetria acarretará também na impossibilidade de

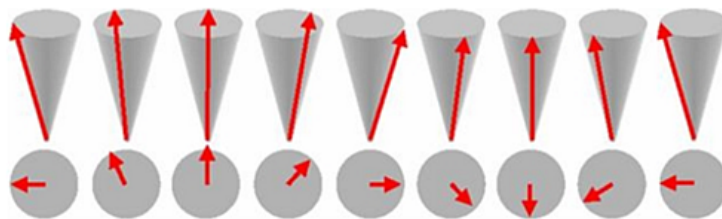


Figura 2.3 – Desenho esquemático de uma onda de spin. A primeira fileira ilustra o movimento de precessão do spin. A segunda fileira é a projeção do spin no plano.

uma transição de fase do tipo Ordem-Desordem [26], assim como enunciado no **Teorema de Mermin-Wagner** [9]. A figura 2.3 ilustra o comportamento dos *mágnons*.

Outro tipo de transição de fase pode ser observado em sistemas que obedecem o teorema em Mermin-Wagner. Este tipo não são relacionadas com a magnetização espontânea da matéria, e sim com as propriedades topológicas que a matéria apresenta [27, 28]. Essas são conhecidas como *transições de fase topológicas* e o mecanismo por traz desta transição é devido ao desligamento dos pares vórtice-antivórtice, como o ilustrado na figura 2.4.

O modelo definido pela equação (1.1) é conhecido por apresentar esse tipo de transição de fase quando ( $0 < \delta < 1$ ), mas não apresenta transição de fase de nenhum dos dois tipos para o limite isotrópico ( $\delta = 1$ ), fazendo com que a temperatura crítica tenda para zero tanto para  $\delta \rightarrow 1^+$ , quanto para  $\delta \rightarrow 1^-$  [17–19]. Nossos estudos se restringem apenas em analisar o comportamento para  $\delta \rightarrow 1^+$ , sendo o outro limite objeto para futuras pesquisas relacionadas a este trabalho.

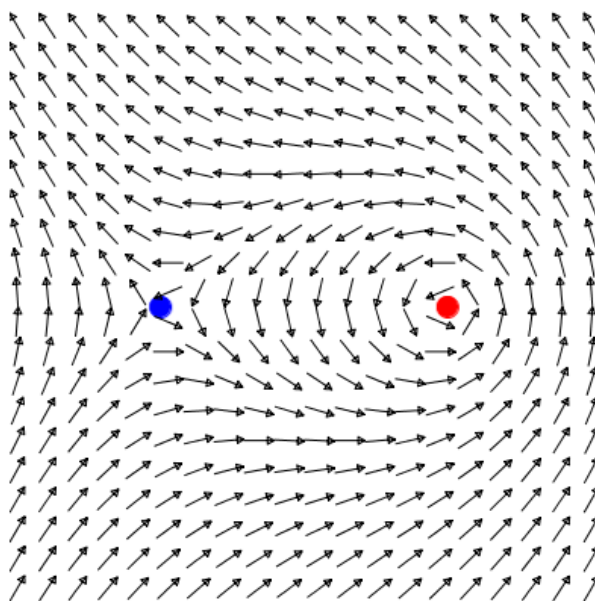


Figura 2.4 – Par vórtice(ponto vermelho) - antivórtice (ponto azul) formado que caracteriza a fase topológica presente no modelo da equação 1.1 para  $0 < \delta < 1$ .

### 3 Efeitos de tamanho finito (*finite size scaling*)

Simulações pelo método Monte Carlo possuem a limitação de só se poder simular sistemas de tamanho finito, tendo por objetivo obter comportamentos anômalos, bem definidos apenas no limite termodinâmico. Com informações do sistema em estudo para diferentes tamanhos de rede, é possível usar a teoria de escala das redes para atribuir o limite em  $L \rightarrow \infty$  de maneira adequada. Esta análise é conhecida como *Finite Size Scaling (FSS)*. Neste capítulo, apresenta-se o embasamento teórico necessário para validar o uso das leis de potências apresentadas na tabela (2.1) e saber como vincular as simulações obtidas em diferentes valores  $L$  de rede.

#### 3.1 Escala dos potenciais termodinâmicos

No estudo de transições de fase características de um ferromagneto, admitem-se diversas abordagens teóricas. A mais conhecida dessas abordagens, é o tratamento fenomenológico, citado no capítulo anterior, consistente em descrever a energia livre como uma série de potências no parâmetro de ordem  $\psi$ . Esta hipótese é capaz de reproduzir a forma, sem o valor numérico, das leis de potência da tabela (2.1). Ademais, a solução exata de Onsager [8] indica a impossibilidade de escrever tais coeficientes como funções analíticas da temperatura.

Por sua vez, as hipóteses de escala são mais fracas, baseando-se em formas gerais que a energia livre pode assumir. Estas hipóteses consistem basicamente em assumir que a energia livre é uma *função homogênea*<sup>1</sup> em suas entradas. Considere a energia livre de um ferromagneto  $g(T, H)$  descrito pela seguinte soma:

$$g(T, H) = g_0(T, H) + g_s(t, H) \quad (3.1)$$

em que  $g_0$  é uma função bem comportada, desinteressante no estudo da criticalidade. A parte singular  $g_s$  é uma função homogênea generalizada de  $t$  e  $H$ :

$$g_s(t, H) = \lambda g_s(\lambda^a t, \lambda^b H) \quad (3.2)$$

<sup>1</sup> A necessidade do uso de funções homogêneas na descrições de fenômenos termodinâmicos já são encontrados inclusive nos próprios postulados da termodinâmica [14] em que a Energia interna  $U(S, V, N)$  ou a Entropia  $S(U, V, N)$  precisam ser funções homogêneas de primeiro grau de seus argumentos, i.e.,  $U(\lambda S, \lambda V, \lambda N) = \lambda U(S, V, N)$



em que  $\lambda$  é um parâmetro arbitrário. A arbitrariedade de  $\lambda$  permite fazer a escolha  $\lambda t^a = 1$ :

$$g_s(t, H) = t^{-\frac{1}{a}} g_s\left(1, \frac{H}{t^{\frac{1}{a}}}\right) = t^{-\frac{1}{a}} Y\left(\frac{H}{t^{\frac{1}{a}}}\right) \quad (3.3)$$

de forma que a função  $Y(x)$  seja bem comportada, tornando possível tirar todas as derivadas de  $g_s$  e conhecer as grandezas termodinâmicas derivadas da equação fundamental:

$$dg_s = -s dT - m dH, \quad \begin{cases} s &= (\partial g_s / \partial T)_H \\ m &= (\partial g_s / \partial H)_T \end{cases} \quad (3.4)$$

sendo que a magnetização espontânea  $m = m(t, H = 0)$  fornece informações sobre o expoente  $\beta$ , o calor específico  $C_v(t, H = 0) = T(\partial s / \partial H)_{H=0}$  fornece informação sobre o expoente  $\alpha$  e a susceptibilidade magnética  $\chi = (\partial m / \partial H)_{H=0}$  fornece informação sobre o expoente  $\gamma$ . As derivadas mencionadas (3.4), são capazes reproduzir as leis de potência da tabela (2.1) em termos de  $a$  e  $b$ , vinculando também os expoentes críticos da seguinte forma:

$$\alpha + 2\beta + \gamma = 2. \quad (3.5)$$

## 3.2 Escala das correlações críticas

As leis de escala, além de serem usadas para definir os potenciais termodinâmicos, também podem ser usadas para definir as correlações críticas [29]. Esta ideia pode ser ilustrada considerando-se o modelo de Ising:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^z S_j^z - H \sum_{i=1}^N S_i^z \quad (3.6)$$

A magnetização termodinâmica deste modelo será:

$$m(T, H) = \lim_{N \rightarrow \infty} m_N(T, H) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left\langle \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N S_i^z \right\rangle_{T,N} \quad (3.7)$$

e, portanto, a magnetização espontânea pode ser definida pelo limite de campo nulo:

$$m_0 = \lim_{H \rightarrow 0} m(T, H). \quad (3.8)$$

Considerando-se a simetria de translação do sistema, é possível descrever a função de correlação do sistema de forma semelhante à equação 2.2, atribuindo ao modelo de Ising uma rede de  $n$  sítios, da seguinte forma:

$$\Gamma_N(k, l) = \langle S_k^z S_l^z \rangle_N - \langle S_k^z \rangle_N \langle S_l^z \rangle_N = \langle S_k^z S_l^z \rangle_N - m_N^2. \quad (3.9)$$

Assim, no limite termodinâmico, se obterá que

$$\Gamma(k, l) = \lim_{N \rightarrow \infty} \Gamma_N(k, l) = \langle S_k^z S_l^z \rangle - m^2 \quad (3.10)$$

em casos de ausência de campo externo ( $m_N = 0$ ), devido à invariância do hamiltoniano pela inversão dos spins. Portanto, com campo nulo, a existência de **ordem de longo alcance** deve ficar estabelecida pela seguinte relação:

$$\lim_{|\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_l| \rightarrow \infty} \langle S_k^z S_l^z \rangle \rightarrow m_0^2 \neq 0. \quad (3.11)$$

Dessa forma, analisando-se a criticalidade, é possível se estabelecer uma relação entre as distâncias dentro do sistema e o parâmetro de ordem. Por se tratar de um sistema com simetria translacional, pode-se recorrer à fórmula de Ornstein-Zernike, já mencionada no capítulo 2, para caracterizar as correlações. Na criticalidade, i.e., em  $T = T_c(t = 0)$  e  $H = 0$ , as correlações spin-spin para grandes distâncias se comportam como:

$$\Gamma(\mathbf{r}) \implies B_d(\mathbf{r}) = B_d r^{-(d-2+\eta)} \quad (3.12)$$

em que  $d$  é a dimensionalidade do sistema e  $\eta$  um expoente crítico, definidor a classe de universalidade. Nas redondezas da temperatura crítica, i.e.,  $t \rightarrow 0$ , tem-se o seguinte comportamento assintótico:

$$\Gamma(\mathbf{r}) \implies B_d(\mathbf{r}) e^{-\frac{r}{\xi}}, \quad \xi \propto D|t|^{-\nu} \quad (3.13)$$

referenciando-se os expoentes já apresentados na tabela 2.1.

Dessarte, compreendidas as demonstrações apresentadas, é possível construir uma teoria de escala para as correlações críticas, assim como foi feito para os potenciais termodinâmicos:

$$\Gamma(r, t, H) = \lambda \Gamma(\lambda^a r, \lambda^b t, \lambda^c H) = t^{-\frac{1}{b}} F\left(\frac{r}{t^{\frac{a}{b}}}, \frac{H}{t^{\frac{c}{b}}}\right). \quad (3.14)$$

Escolhendo convenientemente os expoentes  $a, b$  e  $c$ ,

$$\Gamma(r, t, H) = t^{-\nu(d-2+\eta)} F\left(\frac{r}{t^{-\nu}}, \frac{H}{t^\Delta}\right). \quad (3.15)$$

Para o modelo de Ising, é fácil demonstrar que

$$\chi_N(T, H) \equiv \left(\frac{\partial m_N}{\partial H}\right)_\beta = \frac{1}{Nk_B T} \left[ \left\langle \sum_{k,l=1}^{\infty} S_k^z S_l^z \right\rangle_N - \left\langle \sum_{k=1}^{\infty} S_k^z \right\rangle_N \left\langle \sum_{l=1}^{\infty} S_l^z \right\rangle_N \right], \quad (3.16)$$

sendo possível reescrever a demonstração como:

$$\chi_N(T, H) = \frac{1}{Nk_B T} \sum_{i,j=1}^{\infty} \Gamma_N(i, j). \quad (3.17)$$

Aplicando a simetria de translação do sistema e considerando o limite termodinâmico, chega-se no *teorema da flutuação-dissipação* em sua forma estática:

$$\chi(T, H) = \frac{1}{k_B T} \sum_{\mathbf{r}} \Gamma(\mathbf{r}) \quad (3.18)$$

que relaciona a susceptibilidade, medida macroscópica do sistema, com as flutuações magnéticas, caracterizantes microscópicas do sistema. Próximo à temperatura crítica, é possível transformar a soma em uma integral, inserindo as formas assintóticas da susceptibilidade e das correlações apresentadas na equação 3.18, de modo que:

$$t^{-\gamma} \propto \int d^d r \frac{e^{-rt^\nu}}{r^{d-2+\eta}}, \quad (3.19)$$

integral que, ao ser resolvida, fornece a relação de Fisher:

$$\gamma = \nu(2 - \eta) \quad (3.20)$$

que satisfaz a forma de escala proposta na equação 3.15. Outra importante relação de escala é a da equação 3.21, cuja dedução é mais problemática:

$$2 - \alpha = d\nu \quad (3.21)$$

que é verificada por meio de dados experimentais e numéricos presentes na literatura. Assim, todos os expoentes críticos estão vinculados de tal forma que se é possível determinar todos conhecendo-se apenas dois, aplicando as equações 3.5, 3.20 e 3.21.

### 3.3 Aplicação das leis de escala na análise das simulações

As hipóteses de escala fornecem vínculos para os expoentes críticos universais apresentados na tabela (2.1). A princípio, todos os expoentes estão em termos da temperatura reduzida, mas, usando-se a lei de potência do comprimento de correlação, é possível reescrevê-las em termos deste.

$$\xi \propto t^{-\nu} \implies t \propto \xi^{-\frac{1}{\nu}} \quad (3.22)$$

de tal maneira que as leis de escala, tomam a seguinte forma:

$$M_z \propto \xi^{-\frac{\beta}{\nu}} \quad (3.23)$$

$$\chi_z \propto \xi^{\frac{\gamma}{\nu}} \quad (3.24)$$

$$C_v \propto \xi^{\frac{\alpha}{\nu}}. \quad (3.25)$$

Expandindo a temperatura reduzida, a própria equação (3.22) pode ser reescrita de forma a achar uma lei de escala para a temperatura crítica, ao se tomar o limite pela direita.

$$\begin{aligned} \frac{T - T_c}{T_c} &= t_0 \xi^{-\frac{1}{\nu}} \implies \\ T - T_c &= T_c t_0 \xi^{-\frac{1}{\nu}} = \lambda \xi^{-\frac{1}{\nu}} \implies \\ T(\xi) &= T_c + \lambda \xi^{-\frac{1}{\nu}}. \end{aligned}$$

Assim, as equações (3.22-25) exibem todas as grandezas termodinâmicas relevantes pro estudo da criticalidade de um sistema com o *comprimento de correlação*, que é o único comprimento próprio do sistema capaz de caracterizar a rede em seu comportamento crítico. Em sistemas finitos,  $\xi$  é limitado pela dimensão linear  $L$  da rede. Portanto, espera-se que efeitos de tamanho finito não sejam relevantes para  $L \gg \xi$  mas comecem a ser determinantes para as propriedades do sistema quando  $L \ll \xi$ . Como sabemos que  $\xi \propto t^{-\nu}$ , esperamos que os efeitos de tamanho finito se manifestem no sistema com uma escala do tipo  $t^\nu L$ . Assim, como feito em [30], podemos definir funções de escala  $\tilde{\Omega}(x)$  tais que as grandezas termodinâmicas obedeçam

$$\begin{aligned} M_z &\propto L^{\beta/\nu} \tilde{\mathcal{M}}(tL^{1/\nu}) \\ \chi &\propto L^{\gamma/\nu} \tilde{\chi}(tL^{1/\nu}) \\ C_v &\propto L^{\alpha/\nu} \tilde{\mathcal{C}}_v(tL^{1/\nu}) \end{aligned}$$

em que  $\tilde{\Omega}(x) \rightarrow \text{cte.}$  para  $x \gg 1$  e  $\tilde{\Omega}(x) \rightarrow x^a/\nu$  ( $a = \alpha, \beta, \gamma$ ) para  $x \rightarrow 0$ . Dessa forma, para  $t = 0$ , i.e.,  $T = T_c$ , temos:

$$M_z(L) = M_0 L^{-\frac{\beta}{\nu}} \quad (3.26)$$

$$\chi_z(L) = \chi_0 L^{\frac{\gamma}{\nu}} \quad (3.27)$$

$$C_v(L) = C_0 L^{\frac{\alpha}{\nu}} \quad (3.28)$$

$$T(L) = T_c + \lambda L^{-\frac{1}{\nu}} \quad (3.29)$$

Dessarte, estas relações são as equações usadas para fazer o *finite size scaling*, obtendo-se a temperatura crítica e os expoentes críticos.

## 4 Simulação e análise dos dados

Este capítulo apresentará os principais métodos de simulação e análise de dados. As simulações foram feitas usando um código híbrido, combinando 3 métodos diferentes de Monte Carlo: Metrópolis [31], Wolff [32] e Superrelaxação [33]. Por sua vez, a análise dos dados obtidos usufrui de duas estratégias: uma repesagem ("reweighting") das funções termodinâmicas para temperaturas não simuladas [34] e um método recente que envolve tratar a distribuição de probabilidade de energia como um polinômio e encontrar suas raízes [35].

### 4.1 Simulação: métodos de Monte Carlo

Grande parte dos problemas de relevância na física atualmente, não são passíveis de se resolverem analiticamente. Dessa forma, se faz necessária a utilização de métodos aproximativos e numéricos para abordá-los, destacando-se o **método de Monte Carlo**.

A Mecânica Estatística é a principal maneira de se extrair propriedades macroscópicas a partir de modelos microscópicos de interação [1, 2]. A conexão com a termodinâmica [14] pode ser feita no ensemble micro-canônico (energia constante), por meio da entropia:

$$S = k_b \ln \Omega \quad (4.1)$$

em que  $\Omega$  é o número de estados de energia  $E$ . Esta conexão também pode ser feita no ensemble canônico (temperatura constante):

$$\mathcal{Z} = \sum_{\{E_i\}} e^{-\beta E_i}, \quad \beta = \frac{1}{k_b T} \quad (4.2)$$

$$F = U - TS = -\frac{\ln \mathcal{Z}}{\beta} \quad (4.3)$$

em que  $\mathcal{Z}$  é conhecida como função de partição que se relaciona com a Energia Livre de Helmholtz, como em (4.3). Esta função é a soma dos estados de energia, de forma que a probabilidade de encontrar o sistema em um estado  $\sigma_i$ , com energia  $E_i$ , seja dado por:

$$P(\sigma_i) = \frac{e^{-\beta E_i}}{\mathcal{Z}} \quad (4.4)$$

de forma a se obter grandezas termodinâmicas, como a energia interna, ainda é possível definir uma distribuição de probabilidade de energias, a partir de médias ponderadas:

$$U = \langle E \rangle = \frac{\sum_i p_i E_i}{\sum_i p_i}, \quad p_i = e^{\beta E_i}. \quad (4.5)$$

#### 4.1.1 Cadeias de Markov e equação de balanço detalhado

Antes da apresentação dos algoritmos de simulação utilizados neste trabalho, é necessária a discussão sobre **cadeias de Markov** [36]. Para iniciar esta discussão, considere a seguinte sucessão de eventos aleatórios  $X_1, X_2, \dots, X_j, \dots$  e a probabilidade condicional denotada por  $P(X_i|X_j)$ . Uma sequência é dita Markoviana se:

$$P(X_j|X_{j-1}, \dots, X_1) = P(X_j|X_{j-1}) \quad (4.6)$$

ou seja, a probabilidade de  $X_j$  acontecer depende apenas do evento anterior a ele. Definindo a *matriz de transição de probabilidade*  $W_{ij} = P(X_j|X_{j-1})$  e a probabilidade do evento  $i$  acontecer, na forma  $P_i = P(X_i)$ , pode-se definir um **cadeia de Markov** a partir da matriz de transferência e da probabilidade inicial  $P_i^{(0)}$ , de forma que:

$$P_i^{k+1} = \sum_j W_{ij} P_j^{(k)}, \quad k = 0, 1, \dots \quad (4.7)$$

em que  $\sum_i P_{ij} = 1$  (condição de normalização). Uma propriedade da equação 4.7 é a de que, sob condições bem gerais sobre  $W_{ij}$  e  $P_i^0$ , e após um número suficiente de iterações da equação, o sistema atinge o que é conhecido como *condição estacionária*:

$$P_i = \sum_j W_{ij} P_j. \quad (4.8)$$

Metropolis et al. [31] propuseram que, para obter uma distribuição específica  $P_i$  a partir de uma cadeia markoviana que esteja em uma condição estacionaria, é suficiente que ela satisfaça a seguinte condição:

$$W_{ij} P_j = W_{ji} P_i \quad (4.9)$$

i.e., que a probabilidade de o sistema evoluir de  $i$  para  $j$  seja a mesma de o sistema evoluir de  $j$  para  $i$ . Esta condição garante que  $W_{ij}$  e  $P_i$  sejam consistentes com um estado estacionário, e é conhecida como **condição de balanço detalhado**.

#### 4.1.2 Algoritmo de Metrópolis

A equação 4.4 carrega informação suficiente para descrever as grandezas termodinâmicas por meio de médias, possibilitando a resolução do problema termodinâmico.

Para a maioria de casos de interesses físicos, essa distribuição não é possível de ser obtida analiticamente. Entretanto, a distribuição pode ser obtida por meio de uma cadeia de Markov. Considere a probabilidade do sistema estar no estado  $n$ :

$$P_n(T) = \frac{e^{-\beta E_n}}{\mathcal{Z}}$$

que por sua vez pode ser usada para gerar um outro estado  $m$ , culminando em duas configurações sucessivas e possibilitando que a condição do balanço detalhado (4.9) seja satisfeita.

$$\frac{e^{-\beta E_n}}{\mathcal{Z}} W_{mn} = \frac{e^{-\beta E_m}}{\mathcal{Z}} W_{nm} \implies \frac{W_{nm}}{W_{mn}} = e^{-\beta \Delta E}, \quad \Delta E = E_n - E_m.$$

Dessa forma, apenas a diferença de energia entre os dois estados é necessária no processo iterativo markoviano, permitindo que qualquer matriz de transferência que cumpra a condição de balanço detalhado possa ser utilizada<sup>1</sup>. Assim, o algoritmo de Metrópolis pode ser descrito da seguinte forma:

1. Escolha uma configuração inicial, e.g., aleatória;
2. Calcule a energia correspondente desta configuração;
3. Escolha um sítio da rede e proponha uma nova direção para o spin deste sítio;
4. Calcule a energia do estado recém gerado e sua diferença de energia  $\Delta E$ ;
5. Se essa diferença for negativa, aceite a nova configuração gerada;
6. Se essa diferença for positiva, calcule  $e^{-\beta \Delta E}$  e sorteie um número aleatório  $r \in (0, 1)$ :
  - a) Se  $r < e^{-\beta \Delta E}$ , aceite a nova configuração;
  - b) Se  $r > e^{-\beta \Delta E}$ , Continue com a configuração inicial;
7. Volte ao passo (3) e repita o procedimento.

Após um grande número de iterações deste processo, será gerada a cadeia de Markov que obedece a condição de balanço detalhado, acarretando em dados conforme a distribuição de probabilidades (4.4), sendo possível obter as informações termodinâmicas de um sistema com temperatura  $T$ .

<sup>1</sup> É válido ressaltar que, como a distribuição de probabilidades não é conhecida *a priori*, existem várias escolhas que satisfazem a relação acima.

### 4.1.3 Algoritmo de Wolff

Por mais que o algoritmo de Metrópolis seja eficaz na resolução de problemas termodinâmicos, temperaturas pequenas e redes muito grandes de spins podem acarretar em sua falha, desencadeada pela geração de estados metaestáveis de energia dos quais o algoritmo não consegue desfazer. A Figura 4.1 exemplifica um problema geral dos algoritmos de flipagens "locais", i.e. em que se flipa um spin de cada vez, relacionado com a formação de domínios magnéticos que colocam a rede em um estado metaestável da Energia Livre. De forma a se obter resultados confiáveis, inclusive para temperaturas pequenas, é necessário introduzir um algoritmo de flipagem de clusteres (subconjunto de vários spins da rede conectados entre si) para resolver o problema dos domínios. Assim, essa seção apresentará o algoritmo de Wolff [32].

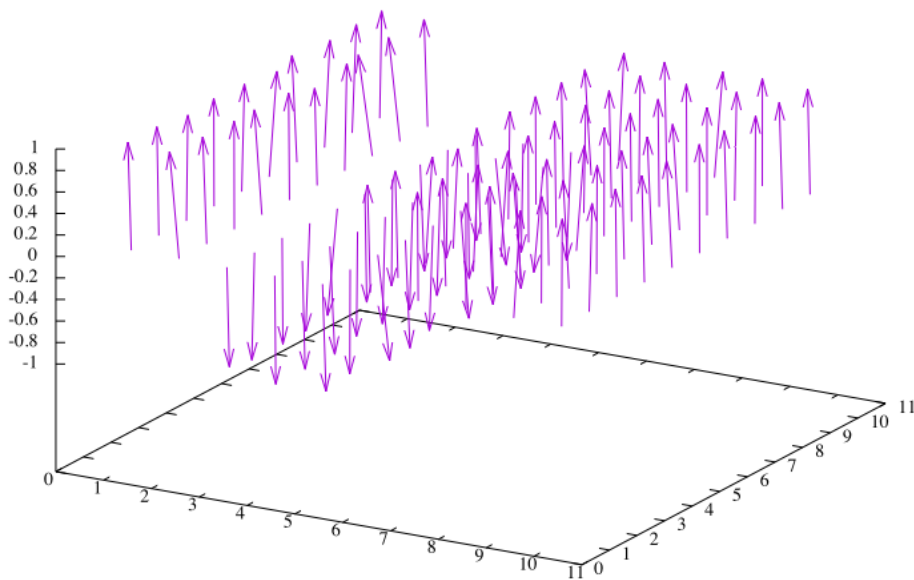


Figura 4.1 – Estado metaestável da energia livre em baixa temperatura. Os spins apontando para cima formam um domínio magnético enquanto os spins apontando para baixo formam outro. Metrópolis é incapaz de desfazer esses domínios.

A formação do cluster de spins é feita da seguinte forma:



1. Selecione um spin  $i$  aleatório na rede. Este será a "semente" inicial do cluster a ser formado;
2. Sorteie uma direção aleatória definida pelo vetor unitário  $\hat{\mathbf{n}}$ ;
3. Verifique todos os spins vizinhos e adicione uma ligação entre eles com a seguinte probabilidade  $P_{add}$ :

$$P_{add} = 1 - e^{-2\beta(\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{S}_i)(\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{S}_j)};$$

4. Ao se esgotar os vizinhos de  $i$ , passe para os spins  $j$  conectados a  $i$  e adicione ligações aos vizinhos de  $j$  com a mesma probabilidade  $P_{add}$ ;
5. Repita (3) até não restarem ligações a serem feitas;
6. Gire todos os spins da rede em relação à direção  $\hat{\mathbf{n}}$  sorteada.

Uma demonstração de satisfação da equação do balanço detalhado pode ser encontrada na referência [37]. Ressalta-se que devido à anisotropia presente no eixo  $z$ , o algoritmo de Wolff só satisfaz a condição de balanço detalhado se ele for feito apenas no plano  $XY$ . Dessa forma, ele não substitui o uso do algoritmo Metrópolis uma vez que o Wolff não altera a componente  $z$  do spin da maneira que ele foi descrito.

#### 4.1.4 Superrelaxação

O último algoritmo na seção de métodos simulacionais, não é um algoritmo de Monte-Carlo, mas uma maneira de descorrelacionar sucessivas iterações da cadeia Markoviana, tendo como objetivo a obtenção de duas medições independentes do sistema. Dessa forma, considere o spin  $\mathbf{S}_{ij}$  e seus vizinhos  $\mathbf{S}_{i+1,j}$ ,  $\mathbf{S}_{i-1,j}$ ,  $\mathbf{S}_{i,j+1}$ ,  $\mathbf{S}_{i,j-1}$ . Os spins vizinhos geram no sítio  $ij$  um campo efetivo  $\mathbf{h}_{ij}$  com o qual  $\mathbf{S}_{ij}$  interage.

Girando spin em torno do campo efetivo na direção azimutal, i.e., mantendo o ângulo entre eles constante, se é capaz de gerar uma configuração diferente da original, mas que mantenha a mesma energia. Dessa forma, a cadeia de Markov não será quebrada. Pelos mesmos motivos que Wolff só pode ser aplicado ao plano  $XY$ , a superrelaxação também só é feita com as componentes planares de  $\mathbf{S}_{ij}$ . Além disso, para que ela funcione, é necessário que a rede de spins como em um tabuleiro de xadrez, i.e., primeiro realizar a superrelaxação nos sítios "pretos" do tabuleiro e depois realizá-la nos sítios "brancos".

### 4.1.5 Algoritmo híbrido utilizado

Para as simulações, utilizou-se um algoritmo híbrido combinando os 3 previamente descritos, de forma que um passo de Monte Carlo - Monte Carlo Step (MCS) em inglês - é contado da seguinte forma:

- $n$  vezes percorrendo toda rede e propondo um movimento Metrópolis para cada spin da rede ( $n = 4$ );
- 1 movimento de superrelaxação para cada spin da rede;
- 1 movimento Wolff de formação e giro de cluster.

## 4.2 Análise dos dados: método de histogramas

Como a distribuição da probabilidade de energia é sempre obtida no ensemble canônico, a temperatura é sempre um parâmetro dado antes de se iniciar a simulação. Isso significa que para cada temperatura simulada é necessário termalizar o sistema e repetir a obtenção de dados, i.e., realizar um número suficientes de MCS para que a distribuição de probabilidades gerada pela cadeia de markov atinja sua condição estacionária. Assim, se configura a desvantagem da maioria dos métodos de Monte-Carlo, pois as simulações se tornam muito longas.

Para se obter informações em temperaturas que não foram simuladas, adota-se o uso de técnicas de repesagem (em inglês "reweighting") que são conhecidas também como técnicas de histogramas [38]. Estas técnicas permitem obter grandezas termodinâmicas do sistema em estudo para um intervalo  $\delta T$  em torno da temperatura de simulação  $T_0$ .

### 4.2.1 Histogramas simples

Para entender este método, recorda-se da função de partição (4.2) que pode ser reescrita de forma a se somar a sobre os possíveis valores de energia  $E$ , ao invés de se obter somar sobre os estados  $\sigma_i$ . Para isso, se introduz a densidade de estado  $g(E)$ , que informa quantos estados degenerados uma energia  $E$  possui, de forma que a função de partição será feita com a soma sobre todas as energias, não sobre estados.

$$g(E) \quad \text{t.q.} \quad \mathcal{Z} = \sum_E g(E) e^{-\beta E} \quad (4.10)$$

Considera-se então o sistema na temperatura  $T = 1/k_b\beta_0$ . A Probabilidade de uma energia  $E$  ser obtida é:

$$P_{\beta_0}(E) = \frac{g(E)e^{-\beta_0 E}}{\mathcal{Z}(\beta_0)}. \quad (4.11)$$

de tal forma que em uma simulação de Monte Carlo feita em  $\beta_0$ , passado o tempo de termalização necessário para se termalizar o sistema, o processo markoviano garante que após esse tempo a densidade de probabilidade gerada será a descrita na equação 3.11. Isto significa que cada valor de energia será visitado de acordo com esta equação. Dessa forma, ao se colocar em um vetor  $H(E)$  o número de vezes que a energia  $E$  foi visitada na simulação, obtém-se um histograma capaz de estimar  $P_{\beta_0}$ .

Considerando  $N_{MCS}$  o número total de passos de Monte Carlo feitos para montar o Histograma, pode-se escrever:

$$P_{\beta_0} = \frac{g(E)e^{-\beta_0 E}}{\mathcal{Z}(\beta_0)} \approx \frac{H(E)}{N_{MCS}} \implies H(E) \approx \frac{N_{MCS}}{\mathcal{Z}(\beta_0)} g(E)e^{-\beta_0 E} \quad (4.12)$$

para obter a seguinte estimativa da densidade de estados

$$g(E) \approx \frac{\mathcal{Z}(\beta_0)}{N_{MCS}} H(E)e^{\beta_0 E}. \quad (4.13)$$

Agora, com a densidade de estados estimada, obtém-se a distribuição de probabilidade para uma temperatura  $\beta$  arbitrária substituindo a equação 4.13 na equação 4.11:

$$P_{\beta}(E) \approx \frac{H(E)e^{-\Delta\beta E}}{\sum_E H(E)e^{-\Delta\beta E}}, \quad \Delta\beta = \beta - \beta_0 \quad (4.14)$$

possibilitando o cálculo das grandezas termodinâmicas para temperaturas que não foram simuladas, e.g., a energia interna

$$U(\beta) = \langle E \rangle_{\beta} \approx \sum_E E P_{\beta}(E) = \frac{\sum_E E H(E)e^{-\Delta\beta E}}{\sum_E H(E)e^{-\Delta\beta E}} \quad (4.15)$$

$$\langle A(E) \rangle_{\beta} \approx \sum_E A(E) P_{\beta}(E) = \frac{\sum_E A(E) H(E)e^{-\Delta\beta E}}{\sum_E H(E)e^{-\Delta\beta E}} \quad (4.16)$$

Grandezas como a magnetização podem ser obtidas com histogramas bidimensionais. Para isso, enquanto acontece a simulação, o número de vezes em que um estado de energia  $E$  e magnetização  $M$  serão armazenados em uma matriz  $H(E, M)$ , possibilitando que os dados sejam analisados da seguinte forma:

$$M(\beta) \approx \frac{\sum_{E,M} M H(E, M)e^{-\Delta\beta E}}{\sum_{E,M} H(E, M)e^{-\Delta\beta E}} \quad (4.17)$$

A exposição acima foi feita considerando um espectro discreto de energias, como o espectro do modelo de Ising. Porém o modelo estudado nesse trabalho é contínuo. A continuidade deste espectro se deve ao fato de que os spins podem girar livremente em torno de seu sítio ao invés de assumir valores como  $\pm 1$ . Assim, usando como exemplo o hamiltoniano escrito em termos dos ângulos entre sucessivos spins como na forma da equação 1.6, pequenas variações de  $\theta_i$  e  $\varphi_i$  levam a pequenas variações no valor  $H$  de energia. Portanto, a energia total do sistema pode ser qualquer valor real e não apenas múltiplos de  $J$ , gerando uma dificuldade na formação do histograma para espectros de modelo contínuo, haja vista ser improvável exatamente o mesmo valor de energia ser visitado duas vezes neste tempo. Uma maneira de se contornar a dificuldade encontrada, é definindo uma discretização  $dE$ . Assim, o histograma é montado quantas vezes o intervalo de energia  $E + dE$  foi visitado. É possível se obter  $P_\beta(E)$  apenas lendo os dados obtidos de forma direta, sem a necessidade de definir uma discretização [10]. Todavia, a discretização definida será importante na discussão da próxima seção de método de análise dos dados.

## 4.2.2 Histogramas múltiplos

O método de histogramas simples é eficaz para repesar temperaturas próximas a  $\beta_0$ , porém é incapaz de estimar  $P_\beta(E)$  para valores grandes de  $\Delta\beta$ . Esta problemática está ilustrada na figura 4.2.

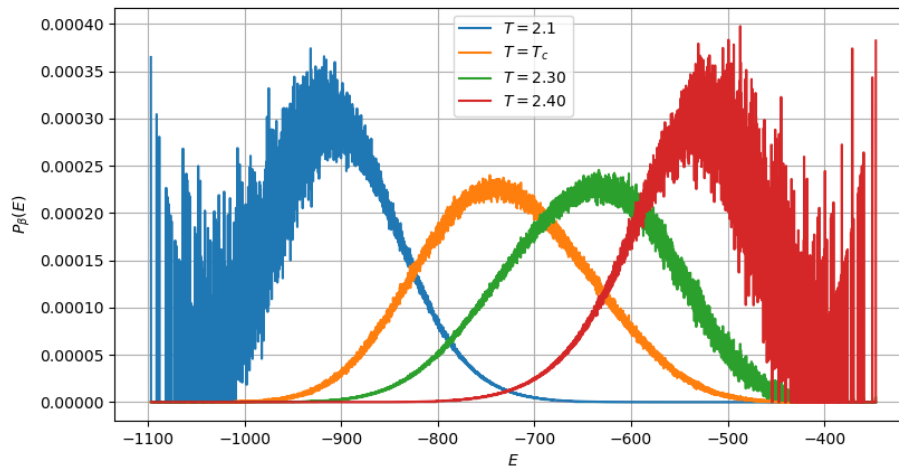


Figura 4.2 – Estimativa da distribuição de probabilidades para diferentes temperaturas.

Um método proposto em [34] é capaz de combinar histogramas no caso de existir uma superposição considerável das distribuições de probabilidades obtidas por simulações feitas em diferentes temperaturas. Este método é conhecido como **Método de Histogramas Múltiplos**. Para compreender este método, considere que foram realizadas  $m$  simulações de Monte Carlo para cada temperatura  $\beta_k$ . Cada simulação irá gerar uma densidade de

estados como na equação .13, de forma que:

$$g_k(E) = \frac{H_k(E)}{N_k^{MCS}} \frac{\mathcal{Z}_k}{e^{-\beta_k E}} \quad (4.18)$$

Como  $g(E)$  é uma função que depende só do sistema em estudo, cada temperatura  $\beta_k$  oferece uma estimativa da mesma função. Esta estimativa  $g_k(E)$  feita em  $\beta_k$  seria exata se a simulação durasse um tempo infinito gerando infinitas amostras. Porém, como este não é o caso real, realiza-se uma média ponderada sobre as densidades de estados geradas por cada simulação. Os pesos serão escolhidos de forma que os erros estatísticos de cada medida sejam mínimos. O conjunto de pesos  $w_i$  responsáveis por minimizar as incertezas da média dos valores  $\{x_i\}_{i=1}^M$  são [39]:

$$\bar{x} = \frac{\sum_{i=1}^M (x_i/\sigma_i^2)}{\sum_{j=1}^M (1/\sigma_j^2)}, \quad \sigma_i^2 = x_i^2 - \bar{x}^2, \quad (4.19)$$

conhecido como **Inverse Square Weighting**. Fazendo isto, pode-se mostrar que a maneira mais adequada de se combinar resultados de simulações feitas em  $\beta_k$  é utilizando a seguinte distribuição de probabilidades (sem considerar o fator de normalização):

$$P_\beta(E) = \frac{1}{\mathcal{Z}(\beta)} \frac{\sum_{k=1}^m H_k(E)}{\sum_{j=1}^m N_j^{MCS} \mathcal{Z}_j e^{(\beta-\beta_j)E}} \quad (4.20)$$

onde

$$\mathcal{Z}(\beta) = \sum_E \frac{\sum_{k=1}^m H_k(E)}{\sum_{j=1}^m N_j^{MCS} \mathcal{Z}_j e^{(\beta-\beta_j)E}} \quad (4.21)$$

$$\mathcal{Z}_k = \sum_E \frac{\sum_{k=1}^m H_k(E)}{\sum_{j=1}^m N_j^{MCS} \mathcal{Z}_j e^{(\beta_k-\beta_j)E}} \quad (4.22)$$

As funções de partição descritas na equação 4.22 são calculadas de maneira iterativa. Com a distribuição de probabilidades calculada, obtém-se todas as outras grandezas termodinâmicas no intervalo (como a energia interna, explicitada no exemplo), até a maior temperatura:

$$\langle E \rangle_\beta = \sum_E E P_\beta(E) = \frac{1}{\mathcal{Z}(\beta)} \sum_E \frac{\sum_{k=1}^m E H_k(E)}{\sum_{j=1}^m N_j^{MCS} \mathcal{Z}_j e^{(\beta-\beta_j)E}}. \quad (4.23)$$

Usando os histogramas bidimensionais da equação 4.17, obtém-se outra grandeza relacionada, a magnetização:

$$\langle M \rangle_\beta = \frac{1}{\mathcal{Z}(\beta)} \sum_{E,M} \frac{M \sum_{k=1}^m H_k(E, M)}{\sum_{j=1}^m N_j^{MCS} \mathcal{Z}_j e^{(\beta-\beta_j)E}}, \quad (4.24)$$

e nessa mesma forma, substitui-se os termos  $(E, M)$  por  $\langle E^2 \rangle$  e  $\langle M^2 \rangle$  nas grandezas acima.

### 4.3 Análise dos dados: zeros da distribuição de probabilidades da energia (EPD)

O outro método de análise de dados usado neste estudo, proposto em 2017 por B.V. Costa, L.A.S Mol e J.C.S. Rocha [35], envolve tratar o histograma repesado em (4.20) como um polinômio do plano complexo. Ele será referenciado ao longo da seção como **Zeros de EPD - "Energy Probability Distribution"**. *A priori*, uma das vantagens desse método é a não necessidade da determinação de um parâmetro de ordem, além de ter se mostrado eficaz em caracterizar transições de fase tanto contínuas quanto descontínuas.

#### 4.3.1 Zeros de Fisher

Semelhante aos Zeros de Yang-Lee [40, 41], que tratam a fugacidade como um polinômio no plano complexo (Ensemble Grande Canônico), os Zeros de Fisher [11] se comportam de maneira análoga, porém no ensemble canônico. Considera-se a função de partição descrita com o auxílio da densidade de estados, como na equação 4.10, por meio de um espectro discreto de energias (ou com discretização introduzida *a posteriori*)  $E = \epsilon_0 + n\epsilon$ .

Nesse sentido:

$$\mathcal{Z} = \sum_E g(E)e^{-\beta E} = e^{-\beta\epsilon} \sum_{n=1}^N g_n e^{-\beta n\epsilon} = e^{-\beta\epsilon_0} \sum_{n=1}^N g_n (e^{-\beta\epsilon})^n \quad (4.25)$$

em que  $g_n = g(\epsilon_0 + n\epsilon)$ . A mesma função de partição pode ser reescrita como um polinômio na variável  $z = e^{-\beta\epsilon}$ , de forma que, fazendo uma continuação analítica da temperatura (ou, equivalentemente, de  $z$ ) para o plano complexo para que  $\mathcal{Z}$  possa ter raízes:

$$\mathcal{Z} = e^{-\beta\epsilon_0} \sum_{n=1}^N g_n z^n = e^{-\beta\epsilon_0} \prod_{n=1}^N (z - z_n) \quad (4.26)$$

onde os  $z_n$ , conhecidos como zeros de Fisher, são as raízes da função de partição, i.e.,  $\mathcal{Z}(z_n) = 0$ . A relação entre os Zeros de Fisher e as transições de fase do sistema é explicitada pela análise dos potenciais termodinâmicos, como a energia livre de Helmholtz:

$$F = -\frac{\ln \mathcal{Z}}{\beta} = -\frac{1}{\beta} \sum_{n=1}^N \ln(z - z_n). \quad (4.27)$$

Dessa forma, a existência de singularidades dos potenciais termodinâmicos justamente nos zeros de Fisher são o principal indicativo de que as raízes em questão estão relacionadas com descontinuidades das derivadas da função de partição. Como todos os coeficientes  $g_n \in \mathbb{R}$  são reais, as raízes  $z_n$  aparecem todas em pares conjugados de forma que, em um sistema finito, nenhuma raiz  $z_n$  pode estar localizada na reta real  $\Im(z_n) = 0$ . Porém,

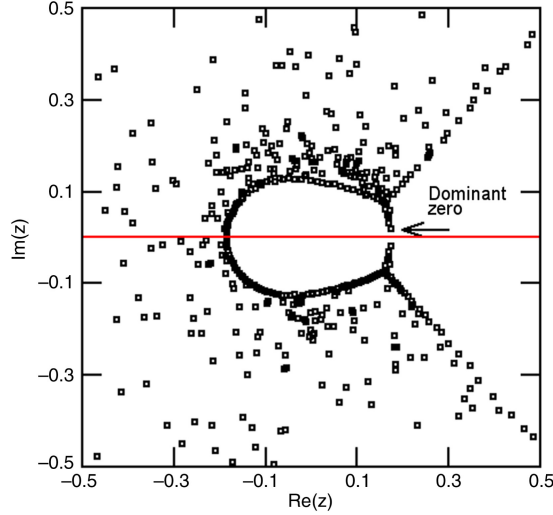


Figura 4.3 – Zeros de Fisher do modelo de Ising  $32 \times 32$ . Imagem retirada de [35]

quando ao se considerar o limite termodinâmico  $L \rightarrow \infty$ , espera-se que um conjunto de zeros se aproxime cada vez mais do eixo real em um sistema que passa por  $M$  transições de fase:

$$\left\{ z^*(L) = a^*(L) + ib^*(L) \right\}_M \in \left\{ z_j \right\}_{j=1}^N, \quad \begin{cases} \lim_{L \rightarrow \infty} a^*(L) = 0 \\ \lim_{L \rightarrow \infty} b^*(L) = a^*(\infty) \end{cases} \quad (4.28)$$

Estes zeros são chamados de **zeros dominantes** e caracterizam a transição de fase analisada por serem os mais próximos do eixo real. A figura 4.3 mostra os zeros de Fisher do modelo Ising para uma rede quadrada  $32 \times 32$  [35], calculados usando o pacote *solve* do Mathematica. <sup>2</sup>

### 4.3.2 Zeros de EPD

Para introduzir o método utilizado neste trabalho, multiplica-se a equação 4.22 por  $1 = e^{-\beta_0 E} e^{\beta_0 E}$ , reescrevendo como:

$$\mathcal{Z}_{\beta_0} = \sum_E h_{\beta_0}(E) e^{-\Delta\beta E}, \quad \begin{cases} h_{\beta_0}(E) = g(E) e^{-\beta_0 E} \\ \Delta\beta = \beta - \beta_0 \end{cases} \quad (4.29)$$

<sup>2</sup> Os zeros não apareceram em pares conjugados devido à um erro do pacote de solução usado. Isto ocorre, pois o polinômio tratado tem valores dos coeficientes  $g_n$  que variam sobre  $10^4$  ordem de magnitude. Além disso, o polinômio tem um grau da ordem de  $10^3$  de forma que mesmo os melhores algoritmos para se encontrar zeros não funcionam corretamente.

Atribuindo a identificação  $x = e^{-\Delta\beta\epsilon}$ , pode-se reescrever a função de partição em termos de outro polinômio:

$$\mathcal{Z}_{\beta_0} = e^{-\Delta\beta\epsilon_0} \sum_n h_{\beta_0}(n)x^n \quad (4.30)$$

em que  $h_n^{\beta_0} = h^{\beta_0}(E)$  é identificado com a distribuição (não normalizada) de probabilidades de energia no ensemble canônico (EPD). Um mapeamento do tipo conforme é responsável por fazer uma correspondência injetiva entre os zeros de Fisher e os zeros de EPD.

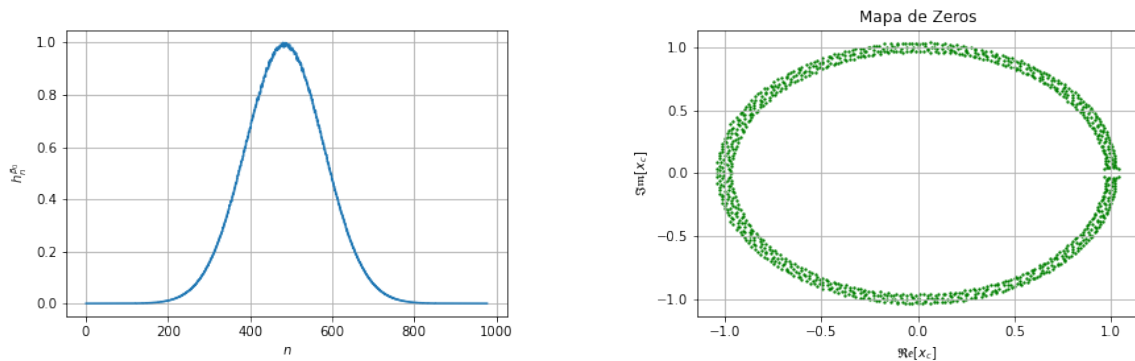


Figura 4.4 – Histograma de energias e mapa de zeros correspondente a ele

Considerando sistemas em seus limites termodinâmicos, com a construção de um histograma na temperatura crítica  $\beta_c$ , o zero dominante  $x_c$  estará no ponto  $(1, 0)$ , de forma que a função de partição será anulada. Para sistemas finitos, uma pequena parte imaginária de  $x_c$  é esperada, com o zero dominante sendo a raiz mais perto do ponto  $(1, 0)$ . Uma vez localizado o zero dominante, esta distância oferece  $\Delta\beta$  e uma estimativa para  $\beta_c$ . Para temperaturas próximas à temperatura crítica, apenas estados com uma probabilidade não nula de ocorrerem são relevantes para a transição de fase. Isto significa que pode-se descartar valores baixos do histograma de energias  $h_n^{\beta_0}$  de forma que os coeficientes do polinômio não fiquem variando em grandes ordens de grandeza. O costume neste método é escolher uma "normalização" específica de forma que o valor máximo do histograma de energias seja unitário.<sup>3</sup> Com a reescala, descarta-se valores menores que um corte  $h_{cut}$ , permitindo evitar considerar energias com amostragem insuficiente no cálculo da temperatura crítica. Propõe-se então um algoritmo que, começando por uma temperatura de tentativa  $\beta_0^0$  (Falsa) para a temperatura crítica, pode-se refiná-la de maneira semelhante ao método Regula Falsi para se resolver uma equação com uma variável. O processo iterativo será da seguinte forma:

<sup>3</sup> A reescala não interfere na posição das raízes no plano complexo por ser apenas uma escolha arbitrária de  $e^{-\Delta\beta\epsilon_0}$ . Por este motivo, pode-se fazer as contas com o histograma não normalizado na equação 4.20.



1. Construa um Histograma  $h_{\beta_0^j}$  na temperatura  $\beta_0^j$  (Reescalado de forma que  $\max h_{\beta_0^j} = 1$  e com o valor de corte aplicado);
2. Encontre as raízes do polinômio:

$$\sum_n h_n^{\beta_0^j} x^n = 0;$$

3. Selecione o zero dominante  $x_c^j$ 
  - Se  $x_c^j$  estiver perto o suficiente do ponto  $z = 1 + 0i$ , pare;
  - Caso contrário, faça:

$$\beta_0^{j+1} = -\frac{\ln(\Re[x_c^j])}{\epsilon} + \beta_0^j$$

e volte para (1).

As figuras 4.5 e 4.6 ilustram o processo de iteração e convergência da temperatura crítica pelo método descrito. Na figura 4.5, os pontos azuis servem como um guia de como é o comportamento do zero dominante próximo à temperatura crítica. Observa-se que o algoritmo converge para o mínimo da função como esperado.

Após a convergência, definir uma temperatura do zero dominante (ou temperatura pseudo-crítica)  $\beta_c$ , calcula-se as demais quantidades termodinâmicas como a Susceptibilidade  $\chi(\beta_c)$  e o calor específico  $c_v(\beta_c)$ , por meio das técnicas de repesagem descritas na seção 4.2.

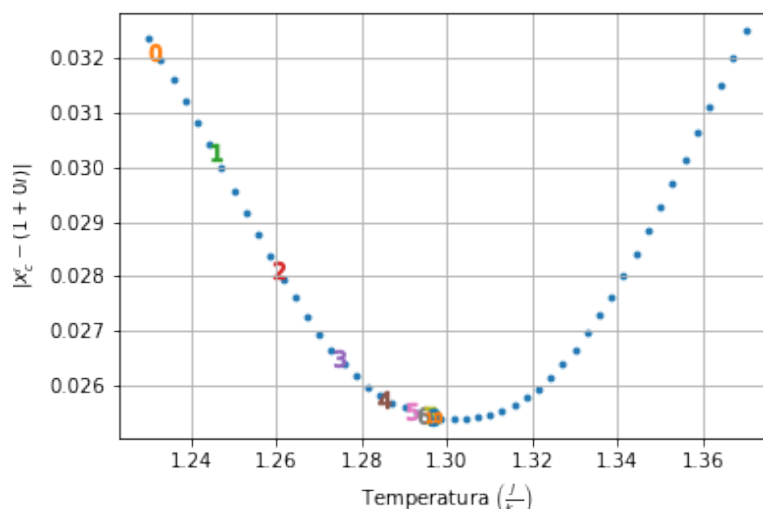


Figura 4.5 – Distância do zero dominante ao ponto (1,0) em função da temperatura. Os números indicam os passos no processo iterativo.

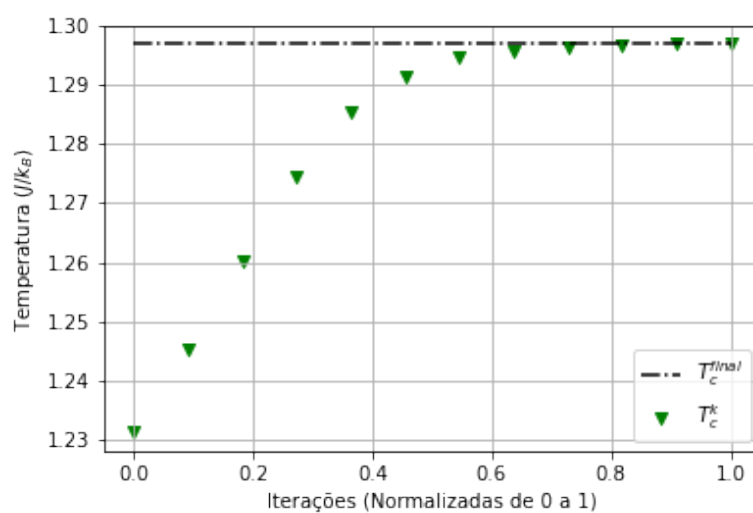


Figura 4.6 – Processo de convergência até a temperatura do zero dominante. Os pontos indicam a temperatura 'tentativa' de cada iteração e a reta indica a temperatura resultado do processo

## 5 Resultados e discussões

Este capítulo é destinado à discussão dos resultados. Primeiro, será analisada a convergência das simulações para as várias redes simuladas. Depois, em detalhes, a transição de fase pela qual o modelo em questão passa, de forma a obter os expoentes e as temperaturas críticas com as leis definidas no capítulo 3. Na seção de análise dos dados, estão explicitados os observáveis termodinâmicos usados, sendo a energia dada em termos de unidades  $J$  e a temperatura em unidades de  $J/k_B$ .

### 5.1 Convergência das simulações

Com o objetivo de termalizar as redes e alcançar a condição de balanço detalhado descrita pela equação 4.9 e, de forma que a distribuição de probabilidades seja consistente com a mecânica estatística, realizou-se  $100L^2$  passos de Monte Carlo (de acordo com a definição de MCS dada na seção 5.1.5. A figura 5.1 descreve o processo de termalização para vários valores de  $L$  para exemplos de  $\delta$ .

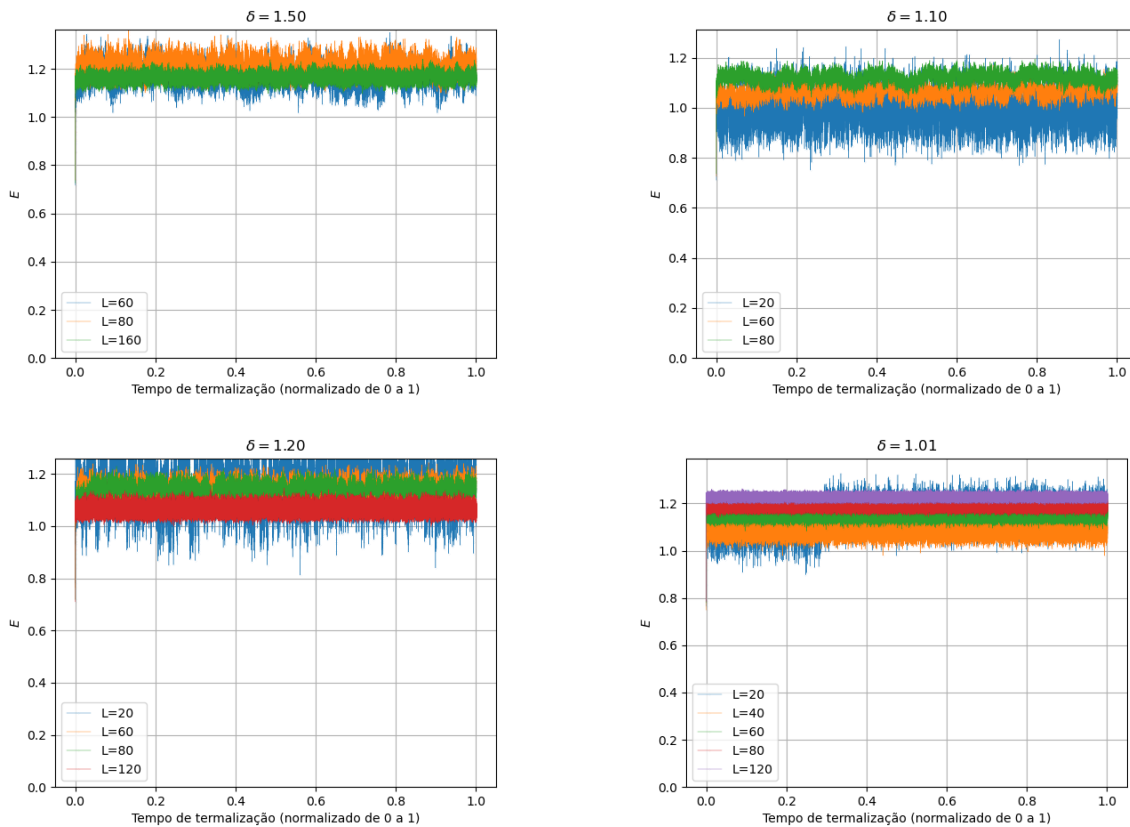


Figura 5.1 – Convergência da Energia por Spin da Equação 1.1

Na figura, nota-se que depois de um certo tempo de simulação, a energia do sistema

começa a oscilar em torno de um valor médio. A partir deste momento, é possível aferir que o equilíbrio termodinâmico foi atingido e que o código está reproduzindo a distribuição de probabilidades correta para gerar os histogramas de energias da simulação. Mesmo para as maiores redes e em valores de  $\delta$  próximos da isotropia, momento de maior dificuldade de convergência para a simulação, o código usado se mostrou suficiente para resolver o problema.

## 5.2 Resultados das simulações

Para analisar a transição em questão, consideram-se as seguintes grandezas termodinâmicas:

- Energia Interna:

$$U = \frac{\langle \mathcal{H} \rangle}{N} \quad (5.1)$$

em que  $N$  é o número total de spins na rede e  $\mathcal{H}$  é o hamiltoniano definido em (1.1)

- Magnetização fora do plano:

$$M_z = \frac{1}{N} \left\langle \sum_{k=1}^N S_k^z \right\rangle \quad (5.2)$$

- Calor específico:

$$C_v = \frac{1}{N} \frac{\langle \mathcal{H}^2 \rangle - \langle \mathcal{H} \rangle^2}{k_B T^2} \quad (5.3)$$

- Susceptibilidade fora do plano:

$$\chi_z = \frac{1}{N} \frac{1}{k_B T} \left[ \left\langle \left( \sum_{k=1}^N S_k^z \right)^2 \right\rangle - \left\langle \sum_{k=1}^N S_k^z \right\rangle^2 \right] \quad (5.4)$$

Descartando-se os primeiros  $100L^2$  MCS para efeitos de termalização, nos  $2 \times 10^6$  MCS posteriores foram guardados valores de energia de magnetização fora do plano, em cada passo, de forma a montar os histogramas. Também foram guardadas as listas de valores de  $M_z^2$ .

As temperaturas de simulações rodadas foram determinadas da seguinte forma: executou-se uma simulação rápida percorrendo um grande intervalo de temperaturas e um passo de temperatura consideravelmente grande ( $\Delta T = 0.1$ ). Esta diferença é necessária para localizar o ponto de inflexão da energia, escolhendo-se duas temperaturas abaixo

e duas acima deste ponto, de forma que a superposição entre os dois histogramas seja considerável.

Como o espectro de energias em questão é um espectro contínuo, foi necessário definir uma discretização. Uma discretização de  $dE = 0.5$  nos histogramas mostrou-se suficiente para montar os histogramas de forma que eles fossem aparentemente contínuos para os valores de rede  $20 < L < 120$ . Se a discretização usada for muito baixa, pode ser que a amostragem de energia entre sucessivos estados  $E$  e  $E + dE$  não seja suficiente para preencher todo o espectro de energias simulado, de forma que hajam grandes saltos entre  $H(E)$  e  $H(E + dE)$ . A figura 5.2 ilustra a importância da escolha da discretização na hora de montar o histograma:

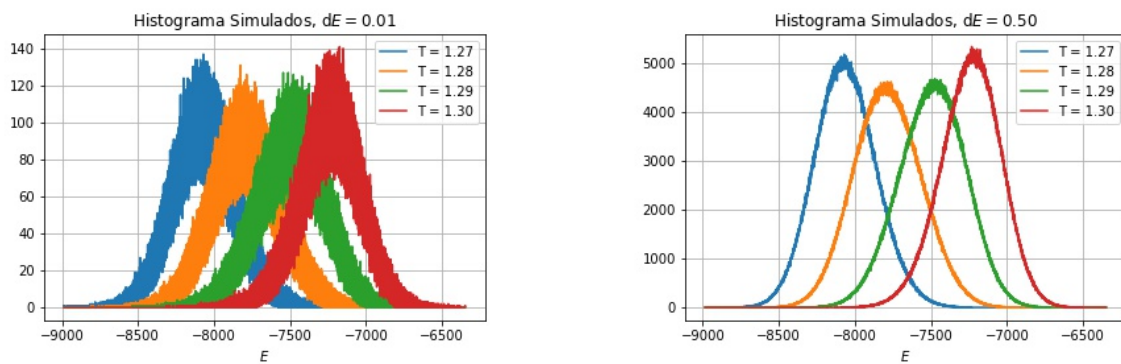


Figura 5.2 – Exemplo de Histogramas para diferentes discretizações. Tais histogramas foram feitos usando os dados da simulação de maneira direta.

A figura 5.3, por sua vez, ilustra a qualidade da repesagem por meio do método de histogramas múltiplos descrito na seção 4.2.2. Atribuiu-se uma altura de corte no histograma de  $h_{cut} = 10^{-3}$  para calcular os polinômios dados pela equação (4.30). Na

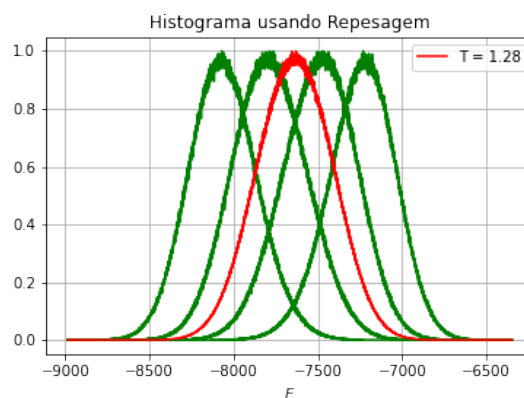


Figura 5.3 – Exemplo de histograma repesado, onde usou-se os histogramas verdes para obter o histograma vermelho

figura 5.4, percebe-se a melhora da resolução do mapa de zeros no plano complexo próximo ao ponto  $z = 1 + 0i$ , ao utilizar um corte mais baixo nos valores do histograma. Ressalta-se

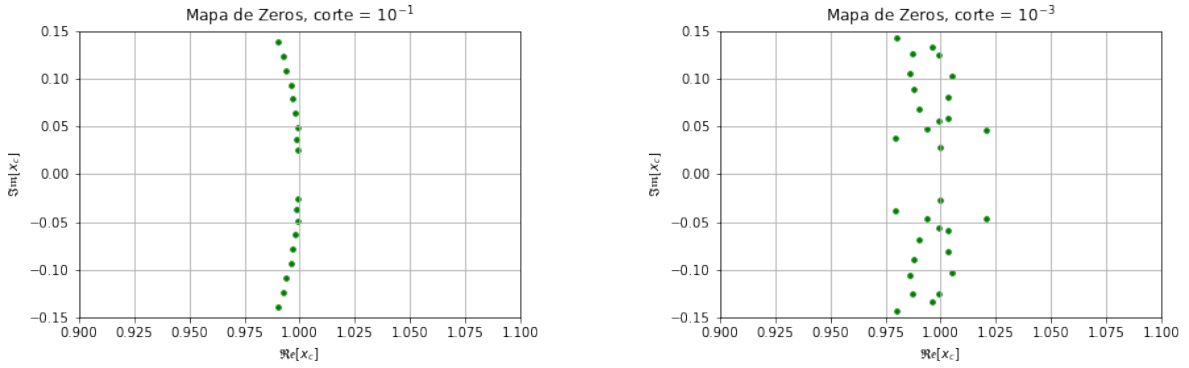


Figura 5.4 – Mapa de zeros para dois valores diferentes de corte no histograma. Nota-se que o mapa de zeros relacionado com o histograma de menor corte é melhor definido em torno do ponto  $(1,0)$ .

que não é adequado utilizar um corte muito menor que  $h_{cut} = 10^{-3}$ , de forma a não se incluir partes do histogramas com baixa amostragem, que gerariam coeficientes com alto grau de incerteza no polinômio.

De forma a se obter a incerteza das medidas, foram feitos cinco histogramas independentes, cada um com  $2 \times 10^6$  MCS para cada temperatura simulada, que fornecem uma estimativa para a temperatura do zero dominante (ou temperatura pseudo-crítica). Esta estimativa é feita por meio do método descrito na seção 4.3.2, calculando-se a média e as incertezas relacionadas a estes valores. Com a temperatura do zero dominante, utilizou-se as equações (4.21-24), relacionadas com a distribuição de probabilidades descrita pela equação 4.20, para calcular  $\langle E \rangle$ ,  $\langle E^2 \rangle$ ,  $\langle M_z \rangle$ ,  $\langle M_z^2 \rangle$ , permitindo o cálculo de  $C_v$  e  $\chi_z$  com cada um dos cinco histogramas independentes, atribuindo um valor para as grandezas mencionadas. Todos os polinômios envolvidos neste trabalho tiveram suas raízes calculadas usando o software `MPsolve` [42, 43].

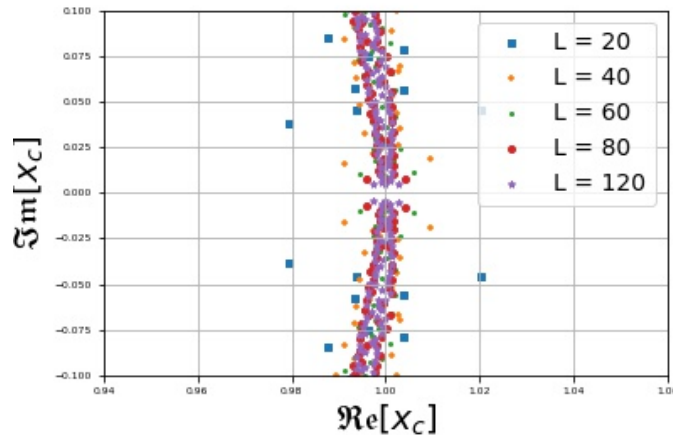


Figura 5.5 – Mapa de zeros em torno de  $z_0 = 1 + 0i$  para  $\delta = 1.5$  e  $20 < L < 120$ . Nota-se que quanto maior a rede, mais próximo de  $z_0$  o zero dominante da rede é.

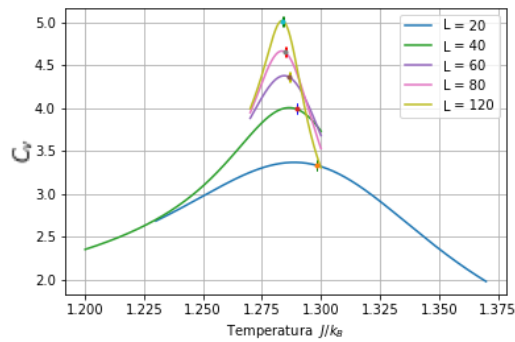


Figura 5.6 – Calor específico em função da temperatura.

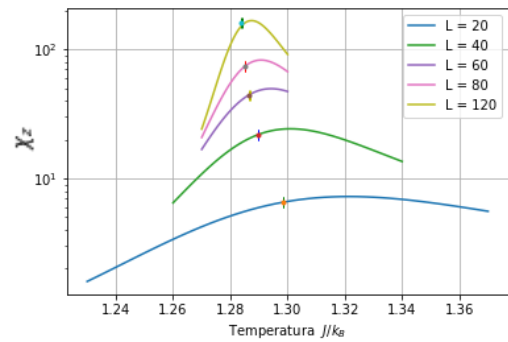


Figura 5.7 – Susceptibilidade em função da temperatura.

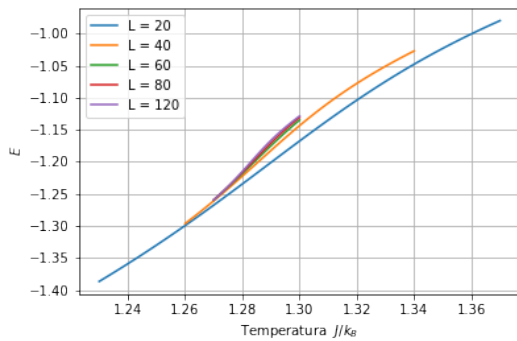


Figura 5.8 – Energia em função da temperatura.

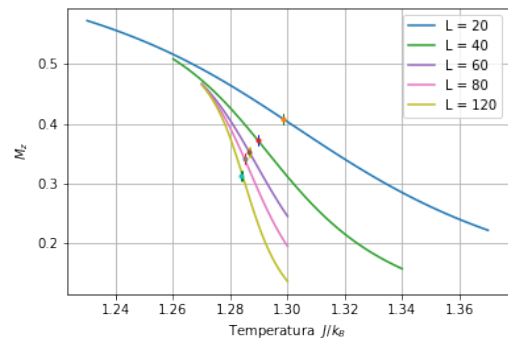


Figura 5.9 – Magnetização em função da temperatura.

A princípio, considerar-se-á uma análise extensa para  $\delta = 1.5$ , mostrando todas as grandezas termodinâmicas discutidas para as redes  $20 < L < 120$ . O procedimento de análise dos dados feito para os demais valores de  $\delta$  simulados é idêntico ao descrito nos seguintes parágrafos. A figura 5.5 mostra o mapa de zeros para todos os tipos de redes simulados e confirma o que foi discutido na seção 4.3.1: para valores de rede maiores, o zero dominante fica cada vez mais próximo do eixo real. As Figuras 5.6, 5.7, 5.8, 5.9 mostram respectivamente os resultados do calor específico, susceptibilidade fora do plano, energia por spin e magnetização fora do plano por spin. Em destaque, está indicado o valor da grandeza termodinâmica calculada na temperatura do zero dominante. Apesar de a temperatura do zero dominante não coincidir exatamente com a temperatura de pico das figuras 5.6 e 5.7 ou do ponto de inflexão de 5.9, todas são suficientemente próximas para que o método descrito em 4.3.2 reproduza o caráter crítico esperado neste estudo. A Figura 5.7 encontra-se em escala logarítmica, apenas para que os picos de todas as redes sejam visíveis.

Antes de partir para a determinação da temperatura crítica e dos expoentes críticos seguindo o raciocínio desenvolvido no capítulo 3, é preciso realizar a seguinte observação sobre o uso dos **Zeros de Fisher** no estudo de transições de fase: a temperatura do zero

dominante deve obedecer a lei de escala estabelecida pela equação 3.29:

$$T_c(L) = T_c^\infty + \lambda L^{-\frac{1}{\nu}} \quad (5.5)$$

de forma que o sobrescrito  $\infty$  indique a temperatura no limite termodinâmico e  $\nu$  seja o expoente a ser determinado. Assim, devido a relação unívoca entre o zero dominante e sua temperatura correspondente, pode-se reescrever 3.29 em termos dos zero dominantes calculados:

$$x_c(L) = x_c^\infty + \lambda' L^{-\frac{1}{\nu}} \quad (5.6)$$

o qual sabe-se que deve ser  $x_c^\infty$  no limite termodinâmico: exatamente os pontos  $x = 1$  e  $y = 0$  do plano complexo, o que torna possível deduzir a seguinte lei de escala para a parte imaginária do zero dominante:

$$\Im[z_c(L)] = y_0 L^{-\frac{1}{\nu}}. \quad (5.7)$$

Dessarte, uma escala log-log da equação 5.7 e uma regressão linear são capazes de fornecer o expoente  $\nu$  de maneira direta. Substitui-se o valor  $\nu$  na equação 5.6 e realiza-se uma regressão linear, de forma que a temperatura crítica  $T_c^\infty$  será o coeficiente linear.

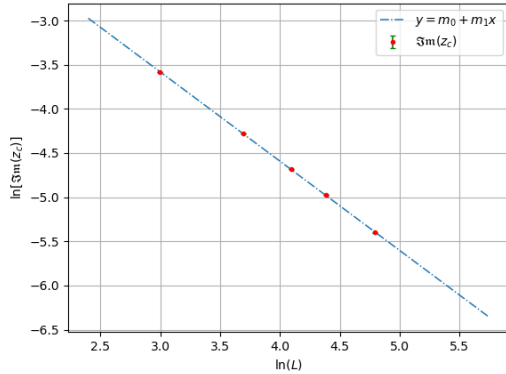


Figura 5.10 – Gráfico e ajuste linear de:  
 $\ln \Im[z_c] = \ln y_0 - (1/\nu) \ln L$

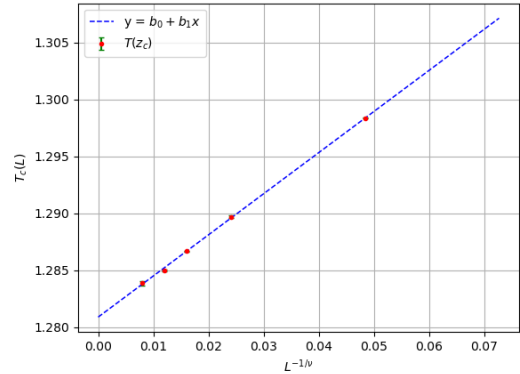


Figura 5.11 – Gráfico e ajuste linear de:  
 $T_c(L) = T_c^\infty + \lambda L^{-1/\nu}$

A figura 5.10 mostra, em uma escala log-log, a dependência da parte imaginária que fornece o expoente de correlação  $\nu = 0.985(8)$  por meio da inclinação do ajuste. A figura 5.11, por sua vez, mostra a temperatura do zero dominante em função de  $L^{-1/\nu}$ , de forma a fornecer, por meio do coeficiente linear do ajuste feito, o seguinte valor para a temperatura crítica para a anisotropia:  $\delta = 1.5 \rightarrow T_c = 1.2811(3)$ . Além da temperatura crítica do modelo, também é possível determinar os expoentes críticos definidos na tabela 2.2 por meio das leis de potências definidas pelas equações 3.26, 3.27 e 3.28, da mesma forma que foi feito para determinar o expoente  $\nu$ . Os valores de  $M_z(L)$  e  $\chi_z(L)$  não foram



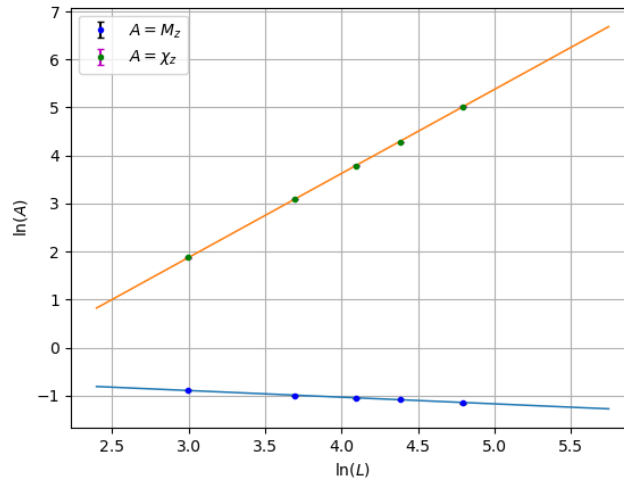


Figura 5.12 – Gráficos e ajustes lineares para as escalas da magnetização e susceptibilidade fora do plano.

os valores dos picos (ou, no caso da magnetização, da inflexão) nas figuras 5.6 e 5.7, e sim aqueles calculados para a temperatura do zero dominante  $T_c(L)$ , devido sua proximidade com o valor dos máximos.

A figura 5.12 mostra os ajustes feitos para permitir que as inclinações fornecessem  $-\beta/\nu$ ,  $\gamma/\nu$ , de acordo com as equações 3.26 e 3.27 respectivamente. Para a anisotropia  $\delta = 1.5$ , os valores dos expoentes críticos nesta análise foram  $\gamma = 1.72(2)$  e  $\beta = 0.136(6)$ . É possível comparar os valores obtidos com os apresentados para a classe de universalidade Ising 2d na tabela 2.3:  $\beta = 1/8$ ,  $\gamma = 7/4$  e  $\nu = 1$ , percebendo-se a proximidade dos valores obtidos neste estudo com os estabelecidos pela classes de universalidades.

O caso do calor específico merece uma atenção especial nesta análise, uma vez que, se o modelo participa da classe de universalidades do Ising 2d, seu calor específico deve apresentar uma divergência logarítmica (como indicado na tabela 2.3), Isto pois, um ajuste linear feito de maneira semelhante para  $\beta$  e  $\gamma$  não seria adequado para analisar o comportamento do calor específico. De fato, para a classe de universalidades do Ising 2d, não faz sentido definir o expoente  $\alpha$  como na equação 3.28. Para ilustrar o caso especial da classe Ising 2d, a figura 5.13 mostra um ajuste linear feito no gráfico log-log do calor específico em função do tamanho da rede, possibilitando que possa ser notada a curvatura dos pontos em torno da reta ajustada, considerando-se que os pontos não formam uma linha reta. Além disso, observou-se que o valor de  $\chi^2$  para este ajuste é  $2.7 \times 10^{-3}$ . Por sua vez, a figura 5.14 mostra um ajuste de uma divergência logarítmica  $c_v(L) = a \ln(L) + b$  que fornece o valor  $\chi^2 = 2.8 \times 10^{-4}$ . Desta análise, conclui-se o ajuste logarítmico feito é mais adequado que o ajuste linear, confirmando que o modelo pertence à classe de universalidade do Ising 2d.

O mesmo procedimento de discussão dos dados feito para  $\delta = 1.5$  pode ser feito

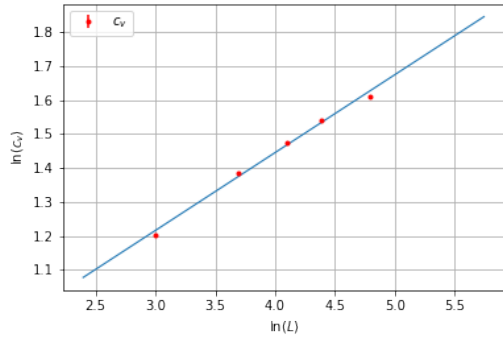


Figura 5.13 – Ajuste linear feito com o calor específico

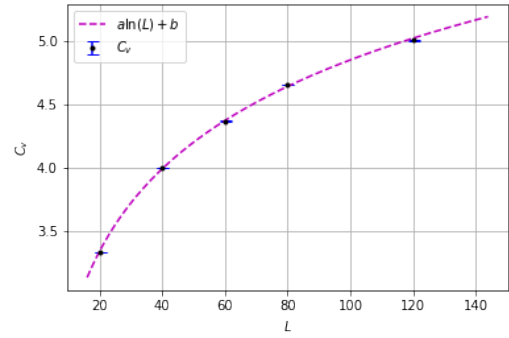


Figura 5.14 – Ajuste logarítmico feito com o calor específico

para outros valores de  $\delta > 1$ . A tabela 5.1 mostra os resultados para a temperatura crítica e os expoentes críticos obtidos para vários valores de anisotropia pertencentes a este regime, sendo que todos eles foram obtidos usando  $L = 20, 40, 60, 80, 120$ . Nota-se que todos os expoentes obtidos são próximos uns dos outros, o que indica que todos os valores de  $\delta$  analisados devem pertencer à mesma classe de universalidade, independente do quanto  $\delta$  esteja próximo do regime isotrópico  $\delta = 1$ .

$\delta$	$T_c$	$\beta$	$\gamma$	$\nu$
1.5	1.2811(3)	0.136(3)	1.72(2)	0.985(8)
1.2	0.9543(4)	0.129(4)	1.71(2)	0.976(6)
1.1	0.8320(2)	0.123(5)	1.69(3)	0.982(9)
1.05	0.7499(4)	0.104(9)	1.62(2)	0.978(3)

 Tabela 5.1 – Tabela de temperaturas e expoentes críticos obtidos para vários valores  $\delta$ 

Em especial, pode-se comparar os resultados aqui apresentados com os já existentes na literatura, como um estudo de Monte Carlo feito por P.A. Serena *et al.* [17] em 1992, que faz a seguinte observação: o hamiltoniano presente neste estudo, tem a anisotropia aplicada nas componentes planares:

$$\mathcal{H}' = -J' \sum_{\langle i,j \rangle} \left[ (1 - \Delta) (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y) + S_i^z S_j^z \right] \quad (5.8)$$

sendo possível reescrevê-lo na mesma forma da equação 1.1, ao retirar-se a anisotropia de dentro do somatório:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}' &= -J'(1 - \Delta) \sum_{\langle i,j \rangle} \left( S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y + \frac{1}{1 - \Delta} S_i^z S_j^z \right) \\ \mathcal{H} &= -J \sum_{\langle i,j \rangle} \left( S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y + \delta S_i^z S_j^z \right) \end{aligned}$$

em que identificamos  $J = J'(1 - \Delta)$  e  $\delta = 1/(1 - \Delta)$ .

A temperatura encontrada para cada valor de  $\delta$  é sempre dada em termos de  $J/k_B$ . Porém, para comparar os valores encontrados, é preciso reescalar a constante de acoplamento. Dessa forma, as temperaturas críticas encontradas no artigo, devem ser multiplicadas por  $\delta = 1/(1 - \Delta)$ , de forma a serem comparadas com temperaturas encontradas em nosso estudo. O artigo em questão encontrou  $T'_c = 0.76(1)$  para  $\Delta = 0.1$  o que, em nosso estudo  $\Delta = 0.1$  equivale a  $\delta = 10/9 \approx 1.1$ . Para se estabelecer uma relação entre os valores, é necessário multiplicar a temperatura crítica do artigo por 1.1, obtendo  $T_c = 0.84(1)$ . Observa-se que este valor está de acordo com o encontrado usando o método do zeros:  $T_c = 0.8320(2)$ .

Dessarte, os resultados obtidos em nosso estudo são compatíveis aos presentes já estão presentes na literatura. A Figura 5.15 mostra todos os ajustes feitos que possibilitaram encontrar as temperaturas críticas indicadas pela tabela 5.1. Ressalta-se que, mesmo para as simulações mais próximas do limite isotrópico ( $\delta = 1.1, 1.05$ ), os expoentes críticos permaneceram semelhantes àqueles que caracterizam a classe de universalidades do modelo de Ising 2D.

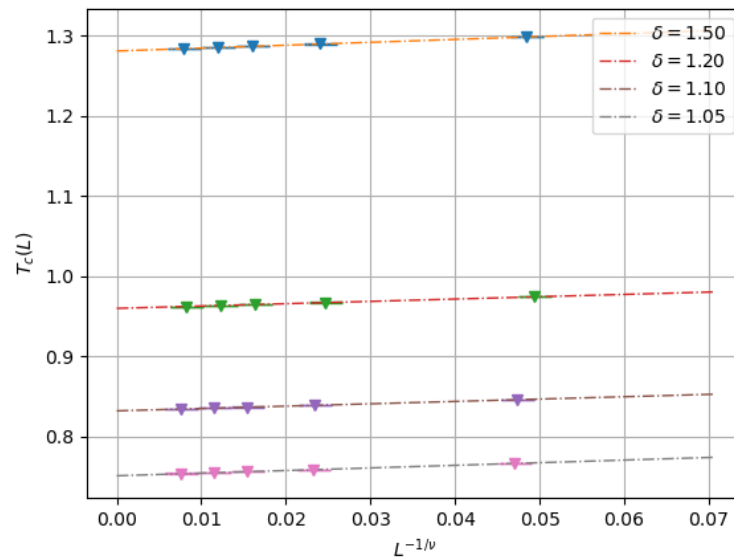


Figura 5.15 – Temperatura pseudo-crítica como função de  $L^{-1/\nu}$  para todos os valores de  $\delta$  simulados.

## 6 Conclusões e Perspectivas

No presente estudo, aplicamos o Método de Monte Carlo em conjunto com técnicas de histogramas e zeros da distribuição de probabilidades, visando estudar o **Modelo de Heisenberg Anisotrópico Bidimensional** definido pela Equação 1.1. Os resultados obtidos foram os esperados, haja vista os já presentes na literatura. Destaca-se o valor encontrado para a temperatura crítica  $T_c = 0.8320(2)J/k_B$  em  $\delta = 1.1$ , que está de acordo  $T_c = 0.76(1)J'/k_B = 0.84(1)J/k_B$ , previamente obtido e discutido em [17]. Ademais, os resultados explicitam que mesmo para o  $\delta$  mais próximo do limite isotrópico ( $\delta = 1.05$ ), o modelo ainda permanece na *classe de universalidades* do Ising 2d, por meio da análise dos expoentes críticos.

A continuidade deste estudo está na aplicação do mesmo método para analisar a região em que  $0 < \delta < 1$ , onde há uma transição de fase topológica cuja existência foi mencionada ao final do capítulo 2. Nesta transição, as leis de escala precisam ser tratadas de maneira distinta das leis apresentadas no capítulo 3.

# Referências

- [1] Salinas, S.R.A.: *Introdução a Física Estatística Vol. 09*. EDUSP, 1997, ISBN 9788531403866. <https://books.google.com.br/books?id=cAlP3sc0K44C>. Citado 4 vezes nas páginas 11, 18, 19 e 29.
- [2] Pathria, R.K.: *Statistical Mechanics*. International series of monographs in natural philosophy. Elsevier Science & Technology Books, 1972, ISBN 9780080167473. <https://books.google.com.br/books?id=ejUVnQEACAAJ>. Citado 2 vezes nas páginas 11 e 29.
- [3] Reif, F.: *Statistical Physics*. Berkeley physics course. McGraw-Hill, 1967. <https://books.google.com.br/books?id=DLYRAQAAIAAJ>. Citado na página 11.
- [4] Landau, D. e K. Binder: *A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics*. Cambridge University Press, 2021, ISBN 9781108490146. <https://books.google.com.br/books?id=xW-EzQEACAAJ>. Citado na página 11.
- [5] Newman, M.E.J. e G.T. Barkema: *Monte Carlo Methods in Statistical Physics*. Clarendon Press, 1999, ISBN 9780198517979. <https://books.google.com.br/books?id=J5aLdDN4uFwC>. Citado na página 11.
- [6] Goldstein, H. e C.P. Poole: *Classical Mechanics*. Addison-Wesley series in physics. Addison-Wesley Publishing Company, 1980, ISBN 9780201029185. <https://books.google.com.br/books?id=9M8QAQAAIAAJ>. Citado na página 11.
- [7] Sakurai, J.J. e J. Napolitano: *Modern Quantum Mechanics*. . Addison-Wesley, 2011, ISBN 9780805382914. <https://books.google.com.br/books?id=N4I-AQAACAAJ>. Citado na página 11.
- [8] Onsager, Lars: *Crystal statistics. I. A two-dimensional model with an order-disorder transition*. Physical Review, 65(3-4):117, 1944. Citado 3 vezes nas páginas 12, 17 e 24.
- [9] Mermin, N. D. e H. Wagner: *Absence of Ferromagnetism or Antiferromagnetism in One- or Two-Dimensional Isotropic Heisenberg Models*. Phys. Rev. Lett., 17:1133–1136, Nov 1966. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.17.1133>. Citado 2 vezes nas páginas 12 e 23.
- [10] Mól, L.A.S: *Transições de fase em modelos magnéticos bi-dimensionais com interações dipolares*. Tese de Doutorado, Universidade Federal de Minas Gerais, 2009. Citado 3 vezes nas páginas 13, 21 e 36.

- [11] Fisher, M.E.: *The Nature of Critical Points*, capítulo 2, páginas 25,26. University of Colorado Press, 1965. <https://books.google.com.br/books?id=cBisnQEACAAJ>. Citado 3 vezes nas páginas 13, 19 e 38.
- [12] Aharoni, A.: *Introduction to the Theory of Ferromagnetism*, capítulo 3, páginas 36–43. International Series of Monographs on Physics. Clarendon Press, 2000, ISBN 9780198508090. <https://books.google.com.br/books?id=Ru-z9b3WcfMC>. Citado na página 14.
- [13] Rigue, Josué Neroti: *Transições de fase em modelos magnéticos bi-dimensionais com interações dipolares*. Tese de Doutorado, Universidade Federal de Santa Maria, 2014. Citado na página 14.
- [14] Callen, H.B.: *Thermodynamics and an Introduction to Thermostatistics*. Wiley, 1985, ISBN 9780471862567. [https://books.google.com.br/books?id=m\\_39DwAAQBAJ](https://books.google.com.br/books?id=m_39DwAAQBAJ). Citado 4 vezes nas páginas 14, 18, 24 e 29.
- [15] Riley, K.F., M.P. Hobson e S.J. Bence: *Mathematical Methods for Physics and Engineering: A Comprehensive Guide*. Cambridge University Press, 2006, ISBN 9781139450997. <https://books.google.com.br/books?id=Mq1nLEKhNcsC>. Citado na página 15.
- [16] Ising, Ernst: *Beitrag zur theorie des ferromagnetismus*. Zeitschrift für Physik, 31(1):253–258, 1925. Citado na página 17.
- [17] Serena, P. A., N. Garcí'a e A. Levanyuk: *Monte Carlo calculations on the two-dimensional anisotropic Heisenberg model*. Phys. Rev. B, 47:5027–5036, Mar 1993. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.47.5027>. Citado 4 vezes nas páginas 17, 23, 50 e 52.
- [18] Binder, K. e D. P. Landau: *Critical properties of the two-dimensional anisotropic Heisenberg model*. Phys. Rev. B, 13:1140–1155, Feb 1976. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.13.1140>. Citado 2 vezes nas páginas 17 e 23.
- [19] Cuccoli, Alessandro, Valerio Tognetti e Ruggero Vaia: *Two-dimensional XXZ model on a square lattice: A Monte Carlo simulation*. Phys. Rev. B, 52:10221–10231, Oct 1995. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.52.10221>. Citado 2 vezes nas páginas 17 e 23.
- [20] Jaeger, Gregg: *The Ehrenfest Classification of Phase Transitions: Introduction and Evolution*. Archive for History of Exact Sciences, 53:51–81, maio 1998. Citado na página 18.

- [21] Rocha, J.C.S.: *Diagrama de Fase do Modelo de Heisenberg antiferromagnético anisotrópico tri-dimensional*. Tese de Mestrado, Universidade Federal de Minas Gerais, 2007. Citado 2 vezes nas páginas 19 e 22.
- [22] Invernizzi, Michele, Omar Valsson e Michele Parrinello: *Coarse graining from variationally enhanced sampling applied to the Ginzburg–Landau model*. Proceedings of the National Academy of Sciences, 114(13):3370–3374, 2017, ISSN 0027-8424. <https://www.pnas.org/content/114/13/3370>. Citado na página 20.
- [23] Guggenheim, E. A.: *The Principle of Corresponding States*. The Journal of Chemical Physics, 13(7):253–261, 1945. <https://doi.org/10.1063/1.1724033>. Citado 2 vezes nas páginas 20 e 21.
- [24] Stanley, H.E.: *Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena*. International series of monographs on physics. Oxford University Press, 1987, ISBN 9780195053166. [https://books.google.com.br/books?id=XK\\_vAAAAMAAJ](https://books.google.com.br/books?id=XK_vAAAAMAAJ). Citado na página 22.
- [25] Ferrenberg, Alan M., Jiahao Xu e David P. Landau: *Pushing the limits of Monte Carlo simulations for the three-dimensional Ising model*. Phys. Rev. E, 97:043301, Apr 2018. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.97.043301>. Citado na página 22.
- [26] Lancaster, T. e S.J. Blundell: *Quantum Field Theory for the Gifted Amateur*, capítulo 26. OUP Oxford, 2014, ISBN 9780191510939. <https://books.google.com.br/books?id=nIk6AwAAQBAJ>. Citado na página 23.
- [27] Kosterlitz, J M e D J Thouless: *Ordering, metastability and phase transitions in two-dimensional systems*. Journal of Physics C: Solid State Physics, 6(7):1181–1203, apr 1973. <https://doi.org/10.1088/0022-3719/6/7/010>. Citado na página 23.
- [28] Kosterlitz, J M: *The critical properties of the two-dimensional xy model*. Journal of Physics C: Solid State Physics, 7(6):1046–1060, mar 1974. <https://doi.org/10.1088/0022-3719/7/6/005>. Citado na página 23.
- [29] Salinas, S.R.A.: *Introdução a Física Estatística Vol. 09*, páginas 341–344. EDUSP, 1997, ISBN 9788531403866. <https://books.google.com.br/books?id=cAlP3sc0K44C>. Citado na página 25.
- [30] Newman, M.E.J. e G.T. Barkema: *Monte Carlo Methods in Statistical Physics*, páginas 232–235. Clarendon Press, 1999, ISBN 9780198517979. <https://books.google.com.br/books?id=J5aLdDN4uFwC>. Citado na página 28.

- [31] Metropolis, Nicholas, Arianna W. Rosenbluth, Marshall N. Rosenbluth, Augusta H. Teller e Edward Teller: *Equation of State Calculations by Fast Computing Machines*. The Journal of Chemical Physics, 21(6):1087–1092, 1953. <https://doi.org/10.1063/1.1699114>. Citado 2 vezes nas páginas 29 e 30.
- [32] Wolff, Ulli: *Collective Monte Carlo Updating for Spin Systems*. Phys. Rev. Lett., 62:361–364, Jan 1989. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.62.361>. Citado 2 vezes nas páginas 29 e 32.
- [33] Creutz, Michael: *Overrelaxation and Monte Carlo simulation*. Phys. Rev. D, 36:515–519, Jul 1987. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevD.36.515>. Citado na página 29.
- [34] Ferrenberg, Alan M. e Robert H. Swendsen: *Optimized Monte Carlo data analysis*. Phys. Rev. Lett., 63:1195–1198, Sep 1989. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.63.1195>. Citado 2 vezes nas páginas 29 e 36.
- [35] Costa, B.V., L.A.S. Mól e J.C.S. Rocha: *Energy probability distribution zeros: A route to study phase transitions*. Computer Physics Communications, 216:77–83, 2017, ISSN 0010-4655. <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0010465517300796>. Citado 3 vezes nas páginas 29, 38 e 39.
- [36] Gubernatis, J., N. Kawashima e P. Werner: *Quantum Monte Carlo Methods: Algorithms for Lattice Models*, páginas 24,25. Cambridge University Press, 2016, ISBN 9781316483121. <https://books.google.com.br/books?id=KKMtDAAAQBAJ>. Citado na página 30.
- [37] Newman, M.E.J. e G.T. Barkema: *Monte Carlo Methods in Statistical Physics*, páginas 93–96,131. Clarendon Press, 1999, ISBN 9780198517979. <https://books.google.com.br/books?id=J5aLdDN4uFwC>. Citado na página 33.
- [38] Landau, D. e K. Binder: *A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics*, capítulo 7. Cambridge University Press, 2021, ISBN 9781108490146. <https://books.google.com.br/books?id=xW-EzQEACAAJ>. Citado na página 34.
- [39] Newman, M.E.J. e G.T. Barkema: *Monte Carlo Methods in Statistical Physics*, páginas 222–224. Clarendon Press, 1999, ISBN 9780198517979. <https://books.google.com.br/books?id=J5aLdDN4uFwC>. Citado na página 37.
- [40] Yang, C. N. e T. D. Lee: *Statistical Theory of Equations of State and Phase Transitions. I. Theory of Condensation*. Phys. Rev., 87:404–409, Aug 1952. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.87.404>. Citado na página 38.



- 
- [41] Salinas, S.R.A.: *Introdução a Física Estatística Vol. 09*, páginas 174–176. EDUSP, 1997, ISBN 9788531403866. <https://books.google.com.br/books?id=cA1P3sc0K44C>. Citado na página 38.
- [42] Bini, Dario A., Fiorentino Giuseppe Design analysis e implementation of a multiprecision polynomial rootfinder. *Numerical Algorithms* 23.2-3 (2000): 127-173. <https://numpi.dm.unipi.it/software/mpsolve>. Citado na página 46.
- [43] Bini, Dario A., Leonardo. Solving secular Robol, polynomial equations: A multiprecision algorithm. *Journal of Computational e Applied Mathematics* 272 (2014): 276-292. <https://numpi.dm.unipi.it/software/mpsolve>. Citado na página 46.