

UNIVERSIDADE FEDERAL DE MINAS GERAIS
Instituto de Ciências Exatas
Programa de Pós-Graduação em Física

Arlton Raimundo Souza Macêdo

**TRANSIÇÃO DE FASE E UNIVERSALIDADE
DOS MODELOS BLUME-CAPEL E BAXTER-WU
BIDIMENSIONAIS ATRAVÉS DAS
DISTRIBUIÇÕES DE PROBABILIDADE DA
ENERGIA E MAGNETIZAÇÕES**

Belo Horizonte
2024

Arilton Raimundo Souza Macêdo

**TRANSIÇÃO DE FASE E UNIVERSALIDADE
DOS MODELOS BLUME-CAPEL E BAXTER-WU
BIDIMENSIONAIS ATRAVÉS DAS
DISTRIBUIÇÕES DE PROBABILIDADE DA
ENERGIA E MAGNETIZAÇÕES**

Tese 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 Doutor em Ciências.

Orientador: João Antônio Plascak

Belo Horizonte
2024

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP)

M141t Macêdo, Arilton Raimundo Souza.

Transição de fase e universalidade dos modelos Blume-Capel e Baxter-Wu bidimensionais através das distribuições de probabilidade da energia e magnetizações / Arilton Raimundo Souza Macêdo. – 2024.
127 f. : il.

Orientador: João Antônio Plascak.

Tese (doutorado) – Universidade Federal de Minas Gerais,
Departamento de Física.
Bibliografia: f. 83-88.

1. Método de Monte Carlo. 2. Probabilidade. 3. Transição de fase. I. Título.
II. Plascak, João Antônio. III. Universidade Federal de Minas Gerais,
Departamento de Física.

CDU – 519.245 (043)



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

FOLHA DE APROVAÇÃO

A presente tese, intitulada "**Transição de fase e universalidade dos modelos Blume-Capel e Baxter-Wu bidimensionais através das distribuições de probabilidade da energia e magnetizações**" de autoria de **ARILTON RAIMUNDO SOUZA MACÊDO** submetida à Comissão Examinadora, abaixo-assinada, foi aprovada para obtenção do grau de **DOUTOR EM CIÊNCIAS**, em dois de agosto de 2024.

Belo Horizonte, 02 de agosto de 2024.

Prof. João Antônio Plascak
Orientador do estudante
Departamento de Física/UFMG

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

Prof. Emmanuel Araújo Pereira
Departamento de Física/UFMG

Profa. Shan-Ho Tsai
University of Georgia Athens

Prof. José Cândido Xavier
Instituto de Física/UFU



Documento assinado eletronicamente por **Emmanuel Araujo Pereira, Membro de comissão**, em 02/08/2024, às 14:18, 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 **Shan-Ho Tsai, Usuário Externo**, em 02/08/2024, às 14:29, 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 02/08/2024, às 14:48, 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 **Jose Candido Xavier, Usuário Externo**, em 02/08/2024, às 16:31, 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 **Lucas Alvares da Silva Mol, Professor do Magistério Superior**, em 11/08/2024, às 20:11, 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, informando o código verificador **3431361** e o código CRC **E820D550**.

Em memória de Maria da Graça Macêdo Menezes.

AGRADECIMENTOS

Este foi um período de grande desenvolvimento e crescimento pessoal. Este trabalho não teria sido possível sem a ajuda e apoio de muitas pessoas.

Agradeço ao meu orientador Prof. Dr. João Antônio Plascak por me receber como aluno de doutorado. Obrigado por confiar no meu trabalho e dedicação, pelas ótimas discussões e ensinamentos ao longo do percurso.

Muito obrigado aos membros do Programa de Pós-graduação em Física e funcionários da UFMG pelo suporte, em especial aos professores do programa. Seus ensinamentos foram de fundamental importância para minha formação. Aos membros do laboratório do grupo de Física Estatística, em especial ao Prof. Dr. Gerald Weber pela ajuda e suporte. Às secretárias Ana Luiza e Marília, pelo pronto atendimento sempre que solicitado.

À Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES), pelo apoio financeiro.

Aos colegas do doutorado, que me receberam muito bem e muito me ajudaram nos primeiros dias em que cheguei em Belo Horizonte. Ao colega Tiago Venzel cuja boa vontade e ajuda foram fundamentais especialmente no início do doutorado.

Quero agradecer a todos aqueles que compõe o IFMA-Campus Imperatriz, em especial aos colegas do colegiado do curso de Física que permitiram e apoiaram a realização desta pós-graduação.

Agradeço aos membros da banca pelo interesse e disponibilidade.

Por fim a minha família e amigos pessoais pelo apoio e incentivos. Ao meu pai José Raimundo Almeida Macêdo e minha mãe Maria da Conceição Souza. À minha prima Roseana Macêdo Menezes que foi minha primeira professora.

RESUMO

O modelo Blume-Capel na rede quadrada e o modelo Baxter-Wu na rede triangular foram estudados através de extensivas simulações de Monte Carlo usando o algoritmo de Metropolis de inversão simples de spin. Ambos modelos foram tratados com spin $S = 1$ e $S = 3/2$ na presença de interações de campo cristalino. A temperatura de transição e o expoente crítico do comprimento de correlação foram calculados, como função do campo cristalino, utilizando o método recentemente desenvolvido denominado zeros da distribuição de probabilidade da energia. A importante questão da classe de universalidade ao longo da linha de transição de segunda ordem foi solucionada por meio das correspondentes distribuições de probabilidade da energia e magnetizações. Os argumentos de mistura de campos revelaram-se bastante importantes para evidenciar possíveis mudanças na classe de universalidade dos modelos conforme o campo cristalino varia. A técnica de histograma simples foi utilizada para obter dados simulacionais próximo das transições de segunda ordem e dos pontos multicríticos. Como esperado, o modelo Blume-Capel tem transições de primeira e segunda ordem, onde o ponto tricrítico ocorre para spin $S = 1$, enquanto um ponto crítico terminal duplo está presente para o spin $S = 3/2$. Embora a topologia do diagrama de fase do modelo Baxter-Wu de spin $S = 1$ seja similar ao do modelo Blume-Capel, com o ponto tricrítico sendo substituído pelo ponto pentacrítico, o modelo Baxter-Wu apresenta expoentes críticos que se alteram ao longo da linha tetracrítica com o aumento do campo cristalino. Por outro lado, o modelo Baxter-Wu de spin $S = 3/2$ exibe um diagrama de fase completamente diferente daquele obtido pelo Blume-Capel, com a presença de um ponto pentacrítico e um ponto tetracrítico terminal. Os presentes dados também mostram que, apesar da mudança nas distribuições de probabilidade à medida que o campo cristalino varia, os modelos com diferentes valores de spins pertencem à mesma classe de universalidade.

Palavras-chave: modelos Blume-Capel e Baxter-Wu; Monte Carlo; zeros da distribuição da energia; distribuições universais de probabilidade; pontos multicríticos.

ABSTRACT

The Blume-Capel model on a square lattice and the Baxter-Wu model on a triangular lattice have been studied through extensive Monte Carlo simulations using the single spin update according to the Metropolis algorithm. Both models have been treated with spin $S = 1$ and spin $S = 3/2$ in the presence of crystal field interactions. The transition temperature and correlation length critical exponent have been computed, as a function of the crystal field interaction, by employing the recent developed method of the zeros of the energy probability distribution. The important question of the universality class along the second-order transition lines could be resolved by looking at the corresponding universal probability distributions of the energy and magnetizations. Mixing field arguments turned out to be quite important to decide the possible change in the universality class of the models as the crystal field varies. Single histograms techniques have also been utilized in order to obtain simulational data close to the second-order transitions and multicritical points. As expected, the Blume-Capel model has first- and second-order transitions, where a tricritical point occurs for spin $S = 1$, while an isolated double-critical-endpoint is present for spin $S = 3/2$. Although the topology of the phase diagram of the Baxter-Wu model for spin $S = 1$ is similar to that of the Blume-Capel model, with the tricritical point being replaced by a pentacritical point, the Baxter-Wu model has critical exponents that change along the tetracritical line as the crystal field is increased. On the other hand, the Baxter-Wu model with spin $S = 3/2$ has a phase diagram that is completely different from the one obtained for the Blume-Capel, with the presence of a pentacritical point and a tetracritical endpoint. The present data also show that, despite the change of the probability distributions as the crystal field varies, the models with different spin values belong to the same universality class.

Keywords: Blume-Capel and Baxter-Wu models; Monte Carlo; zeros of the energy distribution; universal probability distributions; multicritical points.

SUMÁRIO

1. <i>Introdução</i>	12
1.1 Modelo Ising e Blume-Capel	15
1.2 Modelo Baxter-Wu	20
1.3 Objetivo desse trabalho	23
1.4 Plano da tese	23
2. <i>Metodologia</i>	24
2.1 Método Monte Carlo (MC)	24
2.2 Método do Histograma Simples	26
2.3 Leis de Potência e Universalidade	28
2.4 Leis de escala	29
2.5 Zeros da distribuição de probabilidade da energia	31
2.6 Distribuição de probabilidade universal	33
2.6.1 Distribuição da energia no caso simétrico	34
2.6.2 Distribuição da magnetização	35
2.6.3 Abordagem de mistura de campos	37
3. <i>Modelo Blume-Capel</i>	40
3.1 Simulações de Monte Carlo	40
3.2 Resultados para o expoente crítico ν e temperatura crítica T_c utilizando-se os zeros DPE	41
3.3 Distribuição de probabilidade universal do modelo Blume-Capel	47
3.4 Mistura de campos no modelo Blume-Capel	51
3.4.1 BC spin $S = 1$	51
3.4.2 BC spin $S = 3/2$	55
3.5 Diagrama de fase do modelo Blume-Capel	55
3.6 Conclusões	59
4. <i>Modelo Baxter-Wu</i>	61
4.1 Simulações de Monte Carlo	61
4.2 Resultados para o expoente crítico ν e temperatura crítica T_c utilizando-se os zeros DPE	62
4.3 Distribuição de probabilidade universal do modelo Baxter-Wu	68
4.4 Conclusões	78
5. <i>Conclusão Geral</i>	81

Anexos	89
<i>A. Anexo A – Artigo publicado na revista Physical Review E</i>	90
<i>B. Anexo B – Artigo publicado na revista Journal of Statistical Mechanics</i>	102

1 Introdução

Os diferentes estados de equilíbrio em que a matéria pode ser encontrada são denominados de fases. As fases da matéria não são distintas uma das outras por causa de seus constituintes. Isso porque, água líquida, gelo e vapor de água, três exemplos comuns de fases da matéria, são todos constituídas da mesma molécula. O que as diferencia são as diferentes formas em que as moléculas podem se arranjar. Em princípio, podemos alterar os arranjos moleculares e, conseqüentemente o comportamento, por meio de mudanças na temperatura ou pressão às quais estão submetidos. Portanto, a transição de fase de um sistema físico corresponde a uma mudança quantitativa de seu estado de equilíbrio provocado pela variação de algum parâmetro de controle como a temperatura, pressão, potencial químico ou o campo magnético externo. Em tais transições de fase os observáveis físicos, como calor específico, susceptibilidade, etc., apresentam descontinuidade ou singularidades como função do parâmetro de controle. Além disso, no ponto de transição, os potenciais termodinâmicos, característicos do sistema, tornam-se não analíticos. Portanto, uma transição de fase é caracterizada por uma singularidade na energia livre e em suas derivadas em função dos parâmetros de controle [1–3].

Quando há coexistência de fases com propriedades distintas, pode ocorrer uma transição de fase descontínua ou de primeira ordem. Essa denominação advém do fato de ocorrer uma descontinuidade na primeira derivada da energia livre, ou seja, a inclinação da mesma é descontínua na transição. Como a entropia é uma das primeiras derivadas da energia livre, e portanto, descontínua, a sua variação corresponde a um calor latente. Dessa forma, essas transições estão geralmente associadas a um calor latente, sendo possível também a existência de estados metaestáveis.

Quando as transições não estão associadas a coexistência de fases, mas sim a singularidades em outras grandezas termodinâmicas, ocorrem as chamadas transições de fase contínuas ou de segunda ordem. Nesse caso, a primeira derivada da energia livre é contínua, mas há uma divergência nas segundas derivadas, como a susceptibilidade ou a compressibilidade, tornando o sistema altamente correlacionado.

Uma transição de fase ocorre em um ponto, linha ou superfície bem delineados no espaço de fase, espaço esse que é definido, nesse caso, pelas variáveis termodinâmicas adequadas ao sistema, como pressão e temperatura no caso de um fluido, ou campo externo e temperatura no caso de sistemas magnéticos. A Fig. 1.1 (a) mostra o diagrama de fase de um fluido simples no plano pressão-temperatura ($p - T$). Dependendo da pressão e temperatura, o sistema pode existir nas fases sólida, líquida ou gasosa. As linhas que separam as regiões em que cada estado é estável são denominadas de linhas de coexistência entre as fases. Atravessando qualquer linha de coexistência, como a líquido-gás, ocorre uma transição de fase de primeira ordem. Essa linha de coexistência líquido-gás termina no ponto crítico (T_c, p_c), onde ocorre uma transição de fase de segunda ordem ou contínua, na qual as duas fases tornam-se indistinguíveis e temos um fluido crítico. A existência de um ponto crítico no caso do fluido indica que se pode converter líquido em gás continuamente, sem cruzar a linha de transição, como indicado pelo caminho tracejado na Fig. 1.1 (a). A linha de coexistência sólido-gás termina no ponto triplo, onde as três fases coexistem. Não há evidências de que a linha de coexistência sólido-líquida termine em um ponto crítico, permanecendo de primeira ordem e se estendendo para temperaturas

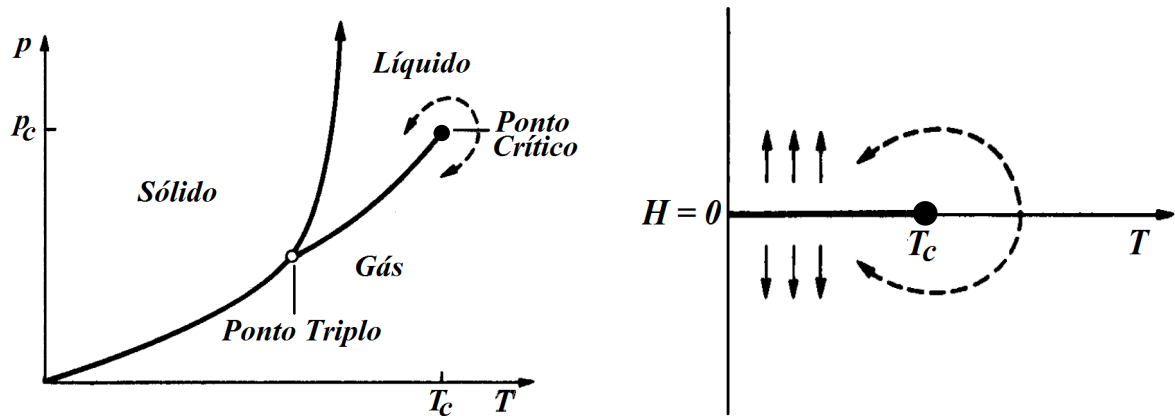


Fig. 1.1: (a) Diagrama de fase de um fluido simples no plano pressão p versus temperatura T . As linhas indicam transições de primeira ordem. O círculo vazio representa o ponto triplo e o círculo cheio o ponto crítico localizado em T_c e p_c . (b) Diagrama de fase de uma substância ferromagnética simples no plano campo externo H versus temperatura T . A linha horizontal mais grossa representa a transição de primeira ordem entre as duas fases ordenadas (indicadas pelas setas ao longo do campo magnético). Em ambas figuras, a linha tracejada indica um caminho sem ocorrer transição de fase. Figuras adaptadas de [1].

e pressões arbitrariamente altas.

Um comportamento análogo ocorre nas transições de fase magnéticas. O diagrama de fase de uma substância ferromagnética simples é apresentado na Fig. 1.1 (b). Se a temperatura for suficientemente baixa, $T < T_c$, o sistema terá a coexistência de duas fases, uma ferromagnética em que todos os spins apontam na direção positiva do campo, e outra em que os spins apontam na direção negativa do campo quando o mesmo é invertido. A campo magnético nulo estas duas fases coexistem. Similarmente ao caso da linha de coexistência líquido-gás, existe uma linha de transição de primeira ordem terminando em um ponto crítico, onde o sistema sofre uma transição de fase de segunda ordem para a fase paramagnética desordenada.

Para descrever uma transição de fase é conveniente definir uma quantidade associada às simetrias do sistema denominada de parâmetro de ordem. No caso magnético, o parâmetro de ordem é a magnetização, que é essencialmente a soma dos momentos de dipolo magnéticos da rede por unidade de volume. Então, enquanto a fase ferromagnética tem magnetização diferente de zero, no caso paramagnético a mesma é nula. Os momentos de dipolo magnéticos tendem a se orientar de forma aleatória por causa do aumento da energia térmica, de modo que a fase paramagnética apresenta simetria de rotação. Como a magnetização aponta em uma direção específica, na transição de fase ocorre uma quebra espontânea de simetria.

Simetrias e quebra espontânea de simetrias fornecem uma forma bastante eficaz de distinguir diferentes fases da matéria. Afinal, após a quebra de simetria, o sistema se encontra em uma fase completamente diferente da anterior. Mas esse critério não fornece uma análise completa, pois existem sistemas cujas fases e transições de fase não podem ser entendidos em termos da quebra espontânea de simetria. Um exemplo ocorre na transição líquido-gás, pois nesse caso ambas as fases tem simetria de translação contínua.

O parâmetro de ordem na transição líquido-gás é a diferença entre as densidades de cada fase. Como pode-se notar na Fig. 1.2 (a), percorrendo a linha de coexistência líquido-gás, conforme a temperatura aumenta, a diferença entre a densidade do líquido e

do gás diminui continuamente para zero. Portanto, no ponto crítico, o parâmetro de ordem torna-se nulo, sendo possível transitar entre as fases líquida e gasosa continuamente acima desse ponto. As linhas ρ_L e ρ_G na Fig. 1.2 (a) formam a chamada *curva de coexistência*, de modo que na região entre elas tem-se a coexistência das fases líquida e gasosa.

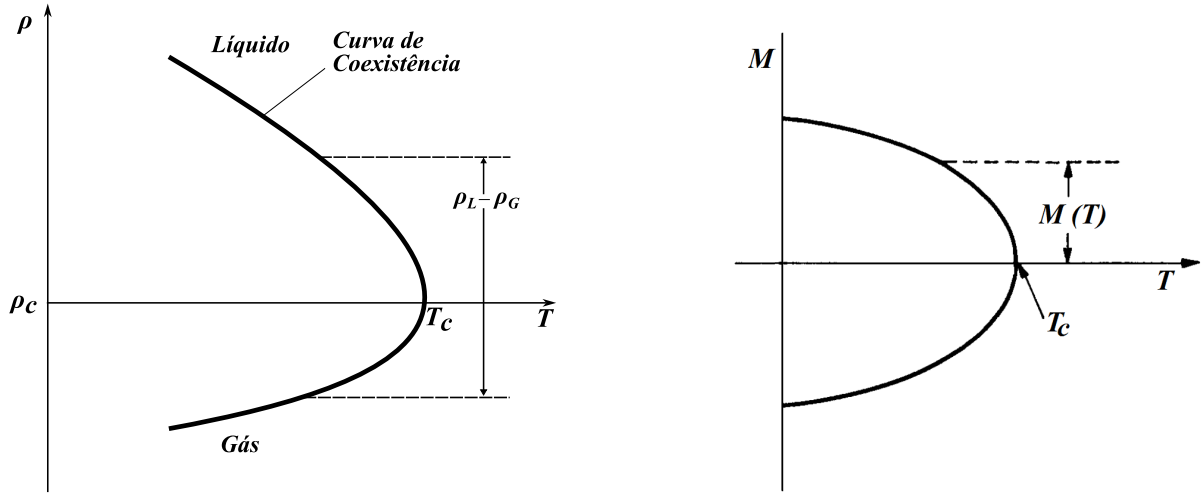


Fig. 1.2: (a) Densidade do líquido ρ_L e do gás ρ_G em função da temperatura T para um fluido simples. (b) Magnetização M , a campo nulo, em função da temperatura para uma substância ferromagnética. Figuras adaptadas de [1] e [3].

No caso magnético, a magnetização varia com a temperatura ao longo da curva de coexistência, em $H = 0$, como indicada na Fig. 1.2 (b). No ponto crítico a magnetização se torna nula, assim como no caso do parâmetro de ordem do fluido. Comparando os dois diagramas da Fig. 1.2 é possível perceber que o caso ferromagnético apresenta um comportamento do parâmetro de ordem mais simétrico do que o do caso do fluido.

A Fig. 1.3 (a) mostra o diagrama de fase no plano $\rho - p$, sendo ρ a densidade do fluido, por meio do qual podemos analisar as isotermas em torno do ponto crítico. Em altas temperaturas as isotermas se aproximam de retas, em acordo com a equação dos gases ideais. Mas conforme a temperatura diminui as isotermas se deformam devido a interação entre as moléculas. Pode-se notar também que a inclinação das isotermas, $\partial p / \partial \rho$, torna-se nula próximo da temperatura crítica. Isso mostra que a compressibilidade isotérmica, $k_T = (\partial \rho / \partial p)_T / \rho$, diverge para o infinito próximo do ponto crítico. Essa divergência na compressibilidade está associada a grandes flutuações da densidade, o que provoca um efeito denominado de opalescência crítica. Abaixo do ponto crítico ocorre a separação das fases com diferentes densidades além de regiões de coexistência.

Um comportamento similar ocorre nas isotermas no caso magnético em torno da temperatura crítica, Fig. 1.3 (b). Próximo da temperatura nula existe uma magnetização espontânea mesmo na ausência de um campo magnético externo. À medida que a temperatura aumenta a magnetização diminui até que se anula no ponto crítico. Nesse ponto, as isotermas apresentam uma inclinação nula, $\partial H / \partial M = 0$. Portanto, a susceptibilidade magnética isotérmica, $\chi_T = (\partial M / \partial H)_{H=0}$, apresenta uma divergência no ponto crítico provocada por altas flutuações da magnetização do sistema. Para temperaturas maiores que a crítica já não há uma magnetização espontânea.

No ponto crítico de um fluido ocorrem flutuações de densidade em todas as escalas de comprimento possíveis. Se a luz visível incidir sobre o fluido próximo do seu ponto crítico acontecerá um alto espalhamento em todos os comprimentos de onda e o fluido terá

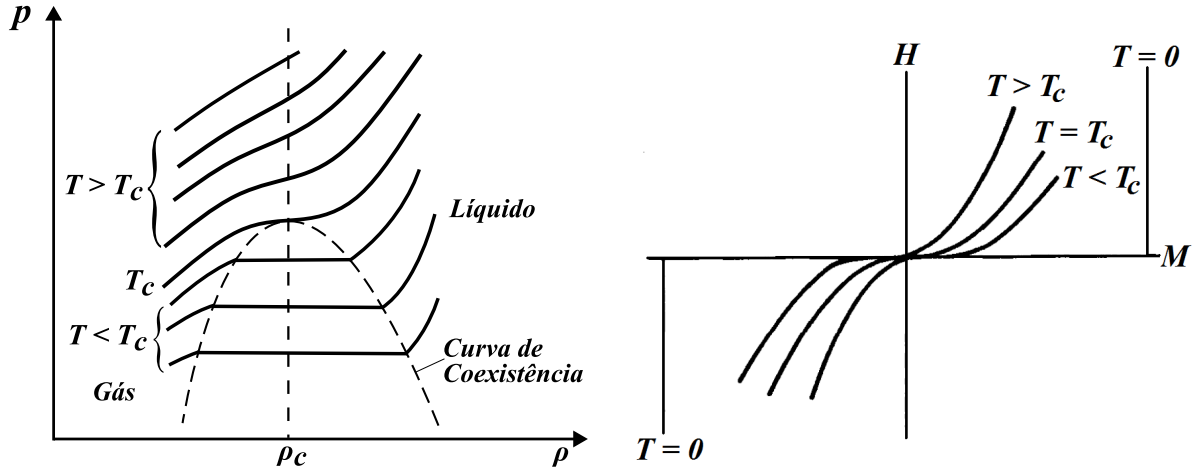


Fig. 1.3: (a) Isothermas (linhas cheias) em torno de T_c para um fluido simples no plano pressão p versus densidade ρ . A linha tracejada vertical indica a densidade crítica ρ_c , enquanto a curva tracejada delimita a região de coexistência líquido-gás. (b) Isothermas (linhas cheias) em torno de T_c para uma substância ferromagnética no plano campo externo H versus magnetização M . Figuras adaptadas de [1].

uma aparência branca tornando-se opaco. Essa é uma das características mais marcantes do ponto crítico denominada de opalescência crítica. A opalescência crítica foi relatada originalmente por Charles Cagniard de la Tour em 1823 [4], mas foi melhor esclarecida por Thomas Andrews em 1869 através de experimentos com dióxido de carbono [5].

As altas flutuações na magnetização de sistemas magnéticos ou na densidade de sistemas fluidos indicam que no ponto crítico existem regiões que vão desde dimensões moleculares até o tamanho do sistema. No caso dos fluidos, gotas de líquido misturadas com bolhas de gás em todos os tamanhos possíveis, assim como no sistema magnético com regiões de fase ferromagnéticas e paramagnéticas em todas as escalas. Essa ausência de escala de comprimento é uma das principais características dos sistemas críticos e foi de fundamental importância para K. G. Wilson formular a teoria de Grupo de Renormalização [6, 7].

1.1 Modelo Ising e Blume-Capel

No começo do século XX ocorreu um grande avanço no estudo e entendimento das transições de fase em sistemas magnéticos, sob o ponto de vista teórico, devido principalmente ao surgimento de modelos simples de spin. Um dos modelos mais importantes no desenvolvimento do conhecimento sobre transições de fase denomina-se modelo Ising. Esse modelo foi proposto por Wilhelm Lenz em 1920 para seu então aluno de doutorado Ernst Ising. Ising resolveu o caso unidimensional e verificou que não existe magnetização espontânea ou transição de fase em temperaturas finitas [8]. O nome “Modelo Ising” foi proposto por R. Peierls em 1936 [9] em uma publicação na qual ele demonstra que uma transição de fase em uma temperatura finita poderia ocorrer no caso bidimensional e em dimensões superiores. A propriedade mais interessante desse modelo foi verificada por Onsager em 1944, quando publicou a solução exata do modelo Ising bidimensional na ausência de campo externo [10], e mostrou a existência de uma transição de fase de segunda ordem na temperatura $k_B T_c / J = 2 / \ln(\sqrt{2} + 1) = 2,269185\dots$ (sendo k_B a constante de Boltzmann e J a interação de troca). Tal descoberta foi a base da teoria

moderna de transição de fase, o que provocou um grande crescimento dos estudos teóricos, experimentais e mais recentemente computacionais nessa área.

Embora seja objeto de extensivos estudos ao longo de quase um século, o modelo Ising ainda apresenta alguns desafios. Não há resultados exatos para o caso bidimensional na presença de um campo magnético externo. Além disso, a solução analítica para o modelo tridimensional continua sendo um grande desafio, mesmo para o caso mais simples sem campo externo. Dessa forma, em muitas situações, é mais viável estudar o modelo por meio de métodos numéricos como simulações de Monte Carlo. Outro aspecto importante é que a universalidade de aplicação do modelo Ising não se restringe a fenômenos puramente físicos. Além de ser importante na descrição de transições de fase clássicas e quânticas, tanto teóricas quanto experimentais [11, 12], ligas binárias, modelos de gás em rede e sistemas complexos, modelos tipo Ising são também capazes de reproduzir, por exemplo, até mesmo o comportamento complexo do mercado financeiro e econômico [13], sistemas biológicos [14] e o comportamento social [15]. Isso mostra que esse modelo permite uma genuína pesquisa interdisciplinar em física, econofísica e também em outras áreas da ciência.

No modelo Ising cada spin interage com seus primeiros vizinhos da rede através de uma interação de troca, J , que favorece o alinhamento paralelo quando J é positivo. O Hamiltoniano é dado por

$$H_I = -J \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j + H \sum_{i=1}^N \sigma_i, \quad (1.1)$$

onde a notação $\langle ij \rangle$ indica que a soma é feita sobre os primeiros vizinhos nos sítios i e j , $\sigma_i = \pm 1$ são variáveis clássicas de spin e H é o campo magnético aplicado. Em campos magnéticos nulos, esse Hamiltoniano é invariante sob inversão de todos os spins da rede, sendo o estado fundamental duplamente degenerado. Há um estado fundamental ferro-magnético com magnetização positiva e outro com magnetização negativa, como indicado previamente na Fig. 1.1(b). Conforme a temperatura aumenta, o alinhamento dos spins diminui até que o sistema sofre uma transição de fase de segunda ordem para a fase para-magnética desordenada com magnetização nula no ponto crítico. Um campo magnético externo quebra essa degenerescência e destrói a transição, de modo que a magnetização estará preferencialmente na direção e sentido do campo.

Outro modelo de spins na rede que já foi amplamente estudado em mecânica estatística e matéria condensada, tanto por sua simplicidade quanto pelo interesse teórico em seu diagrama de fase, é denominado de modelo Blume-Capel (BC). O mesmo foi proposto de forma independente por Blume [16] e Capel [17–19] em 1966 e corresponde a uma generalização do modelo Ising para spins maiores que meio, além de ser possível considerar a interação do campo cristalino Δ . Dessa forma, o Hamiltoniano, na ausência de campo magnético, pode ser expresso por

$$H_{BC} = -J \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j + \Delta \sum_{i=1}^N \sigma_i^2, \quad (1.2)$$

onde $\sigma_i = \pm 1$ são as variáveis de spin como no modelo Ising de spin $S = 1/2$, $\sigma_i = \pm 1, 0$ para o spin $S = 1$, $\sigma_i = \pm 1/2, \pm 3/2$ para spin $S = 3/2$, ou, em geral, $\sigma_i = 0, \pm 1, \dots, \pm S$ para S inteiro, e $\sigma_i = \pm 1/2, \pm 3/2, \dots, \pm S$, para S semi-inteiro. Naturalmente, o último termo na Eq. (1.2) é apenas uma constante no caso do spin $S = 1/2$. Geralmente, no caso de $S = 1/2$, ao invés de se considerar $\sigma_i = \pm 1/2$, é mais prático usar $\sigma_i = \pm 1$,

simplesmente acarretando numa reescala na interação de troca de $J/4$. Esse modelo já foi aplicado em diversos sistemas físicos diferentes, tais como fluidos de multicomponentes, ligas ternárias, misturas de $^3\text{He} - ^4\text{He}$ [20] e para compreender as propriedades de ferrimagnetos [21].

Foi possível obter a solução exata do modelo BC unidimensional através da técnica de matriz de transferência, mas não foi verificada uma transição de fase em temperaturas finitas, independente dos valores de spin ou campo cristalino. Contudo, existem soluções aproximadas para dimensões maiores. Dentre os métodos aplicados ao modelo Blume-Capel destacam-se, entre outros, aproximações de campo médio [22], grupo de renormalização [23], simulações de Monte Carlo [24, 25], método Wang-Landau [26–29], teoria de campo efetivo [30], método multicanônico e métodos híbridos [31, 32].

Embora não exista solução exata para o modelo bidimensional, algumas características gerais dos diagramas de fase podem ser obtidas em alguns limites particulares. Quando $\Delta = 0$, o modelo BC se reduz ao modelo Ising de spin S , e apresenta uma transição de fase de segunda ordem. Para $\Delta \rightarrow -\infty$, o estado mais provável é aquele ocupado pelas mais altas componentes de spin, ou seja, $\sigma_i = \pm S$, de modo que obtemos novamente o modelo Ising com componentes de spin $\pm S$ ao invés de $\pm 1/2$. Por outro lado, quando $\Delta \rightarrow \infty$, o estado mais provável é aquele ocupado pelas componentes de spin menores, no caso $\sigma_i = 0$ para S inteiro e $\sigma_i = \pm 1/2$ para S semi-inteiro.

Propriedades gerais desse modelo podem ser obtidas através dos métodos descritos acima. Por exemplo, o diagrama de fase para $S = 1$ está esquematicamente representado na Fig. 1.4. Existem três fases diferentes, duas ferromagnéticas com magnetização m^+ e m^- e uma paramagnética com magnetização nula, representado por zeros e correspondente a $m = 0$. Linhas cheias são linhas de transição de segunda ordem, já as linhas tracejadas e tracejadas-pontilhadas são linhas de transição de primeira ordem. No plano $H = 0$, as duas fases ferromagnéticas de magnetização opostas coexistem em uma superfície de primeira ordem S_2^0 . Em altas temperaturas, essa superfície é limitada superiormente por uma linha crítica que corresponde às transições de segunda ordem entre as fases ferromagnéticas e a paramagnética desordenada. À medida que a temperatura diminui com o aumento do campo cristalino, as transições de segunda ordem se alteram para de primeira ordem exatamente no ponto tricrítico (PTC), onde as três fases se tornam idênticas no encontro das três linhas críticas, dado pelo triângulo vazio. A localização desse ponto tricrítico já é conhecida com alta precisão através de vários métodos [27, 29, 31, 32]. A linha tracejada, ainda no plano $H = 0$, corresponde a uma linha de pontos triplos, onde as três fases coexistem. Essa linha termina, para $T = 0$, em um ponto triplo, dado pelo triângulo cheio localizado em $\Delta = dJ$. Em campos cristalinos maiores que $\Delta = dJ$, o sistema permanece na fase paramagnética.

Se um campo magnético uniforme for aplicado ao sistema, as duas fases ferromagnéticas serão desacopladas. Em baixas temperaturas, a linha de transição de primeira ordem dá origem a duas superfícies simétricas de primeira ordem S_2^+ e S_2^- para campos magnéticos positivos e negativos, respectivamente, que tendem ao infinito em baixas temperaturas e nas quais as fases ferromagnéticas e paramagnética coexistem. Essas superfícies são delimitadas inferiormente por uma linha de coexistência entre a fase ferromagnética e a paramagnética, que termina no ponto triplo, e superiormente por uma linha crítica.

No caso do modelo BC de spin $S = 3/2$ existem quatro fases ferromagnéticas diferentes correspondente às magnetizações m_1^+ e m_1^- , que em $T = 0$ possuem todos os spins nos estados $\pm 3/2$, respectivamente, e m_2^+ e m_2^- , possuindo em $T = 0$ todos os spins nos estados $\pm 1/2$, respectivamente, como pode ser notado na Fig. 1.5. Para campos crista-

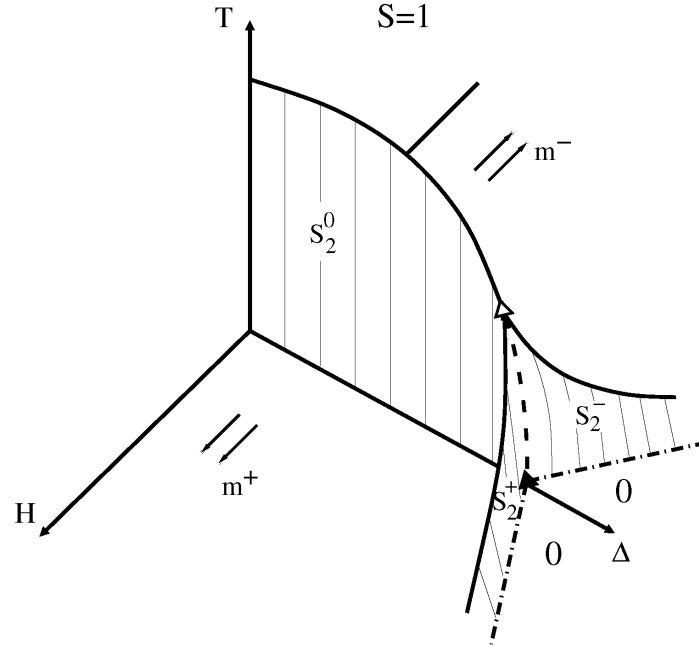


Fig. 1.4: Diagrama de fase do modelo Blume-Capel de spin $S = 1$ no espaço formado pela temperatura T , campo magnético H , e campo cristalino Δ . Existem três fases, duas ferromagnéticas de magnetizações m^+ e m^- e uma paramagnética indicada por zeros. Para $T < T_c$ e $\Delta < d$, no plano $H = 0$, ocorre uma superfície S_2^0 de coexistência entre as fases ferromagnéticas. A linha tracejada que se inicia no ponto triplo, dado pelo triângulo cheio em $\Delta = dJ$, e termina no ponto tricrítico, indicado pelo triângulo vazio, corresponde a coexistência das três fases. Essa linha de pontos triplos demarca também o início de duas superfícies de coexistência, para $H \neq 0$, S_2^+ e S_2^- entre as fases ferromagnéticas e a paramagnética. No ponto triplo também inicia uma linha de coexistência entre as fases ferromagnéticas e a paramagnética, indicada pela linha tracejada-pontilhada. Figura adaptada de [33].

linos pequenos e negativos, no plano $H = 0$, as duas fases de magnetizações m_1^+ e m_1^- coexistem na superfície de primeira ordem S_2^0 . Em temperaturas não nulas, tal superfície é limitada superiormente por uma linha de transição de fase de segunda ordem entre as fases ferromagnéticas e a paramagnética desordenada. Essa linha crítica e a superfície S_2^0 persistem mesmo para altos valores de campos cristalinos e temperaturas mais baixas, porém a coexistência das fases se altera para aquelas de magnetização m_2^+ e m_2^- . Logo abaixo da linha crítica, mas ainda na superfície S_2^0 , ocorrem transições de fase de primeira ordem descritas por uma linha tracejada e corresponde a coexistência entre as quatro fases ordenadas. Essa linha de pontos quádruplos se inicia no ponto $\Delta = dJ$, denominado de ponto quádruplo, indicado por um quadrado fechado, e que termina no ponto crítico terminal duplo (CTD) [25], indicado por um quadrado vazio.

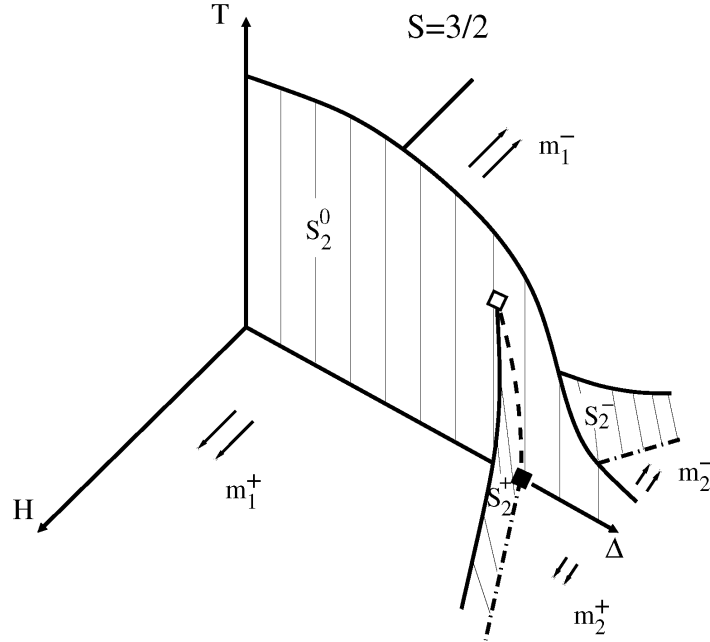


Fig. 1.5: Diagrama de fase do modelo Blume-Capel de spin $S = 3/2$ no espaço formado pela temperatura T , campo magnético H , e campo cristalino Δ . Existem cinco fases, quatro ferromagnéticas de magnetizações m_1^+ , m_1^- , m_2^+ e m_2^- e uma paramagnética desordenada. Para $T < T_c$ e $\Delta < d$, no plano $H = 0$, ocorre uma superfície S_2^0 de coexistência entre as fases ferromagnéticas de magnetização m_1^+ , m_1^- , já para $\Delta > dJ$ coexistem as fases m_2^+ e m_2^- . Essas fases ferromagnéticas são separadas por uma linha tracejada que se inicia no ponto quádruplo, em $\Delta = d$, indicado pelo quadrado cheio, e termina no ponto crítico terminal duplo (CTD), dado pelo quadrado vazio. As superfícies S_2^+ e S_2^- são equivalentes às do caso $S = 1$, mas com coexistência entre as fases ferromagnéticas. Figura adaptada de [33].

A aplicação de um campo magnético uniforme irá separar as fases ferromagnéticas originando as asas simétricas de primeira ordem S_2^+ e S_2^- dependendo do sinal do campo e que tendem ao infinito em baixas temperaturas. As fases ferromagnéticas com m_1^+ e m_2^+ coexistem na superfície S_2^+ e as fases com m_1^- e m_2^- coexistem na superfície S_2^- . Essas superfícies são delimitadas inferiormente por duas linhas de coexistência de fase, indicadas por um traço e um ponto, que terminam no ponto quádruplo e superiormente por duas linhas críticas que terminam no ponto crítico terminal duplo.

Embora não se tenha, na literatura, aproximações mais confiáveis que campo médio, pode-se generalizar os resultados obtidos nos diagramas acima para valores maiores de spin: (i) para S inteiro, $S-1$ linhas de transição de primeira ordem brotam do ponto $T = 0$ e $\Delta = dJ$ e terminam, cada uma, em pontos críticos terminais duplos independentes; (ii) para S semi-inteiro, do mesmo modo, $S - 1/2$ linhas de transição de primeira ordem brotam do ponto $T = 0$ e $\Delta = dJ$ e terminam, cada uma, em pontos críticos terminais duplos independentes.

1.2 Modelo Baxter-Wu

No início da década de 70, Wood e Griffiths [34] propuseram um modelo de spin $S = 1/2$ com interação entre tripletos de spins que não exibia a usual simetria de inversão presente em muitos sistemas magnéticos. O modelo é definido em uma rede triangular com interações entre spins sobre os triângulos elementares, conforme Fig. 1.6 (a). O correspondente Hamiltoniano pode ser escrito como

$$H_{BW} = -J \sum_{\langle ijk \rangle} \sigma_i \sigma_j \sigma_k, \quad (1.3)$$

onde J é a interação de troca positiva, a soma se estende sobre todos os triângulos elementares $\langle ijk \rangle$ da rede com N sítios e $\sigma_i = \pm 1$ são as variáveis de spin tipo Ising. Note que invés de usar $\sigma_i = \pm 1/2$, por simplicidade, vamos considerar $\sigma_i = \pm 1$. Essa escolha implica em uma reescala na interação de troca de $J/8$.

A rede triangular do modelo pode ser dividida em três subredes, como apresentado na Fig. 1.6, indicadas pelos triângulos menores, os quadrados e os círculos. O estado fundamental do modelo é quadruplamente degenerado: há um estado ferromagnético com todos os spins apontando pra cima, e três estados ferrimagnéticos com dois spins para baixo em duas subredes e um spin para cima na terceira, como ilustrado na Fig. 1.6 (b).

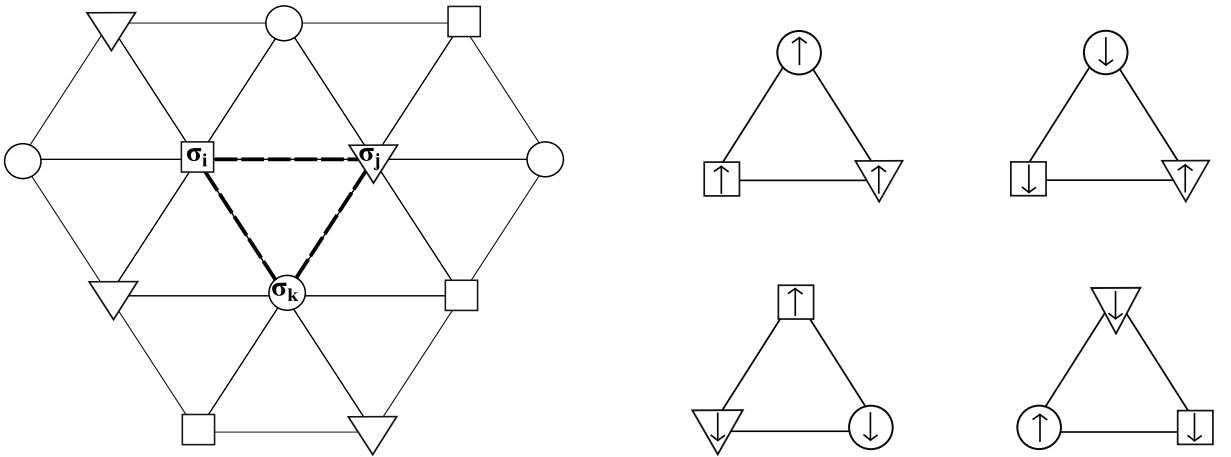


Fig. 1.6: (a) Esboço da rede cristalina triangular, destacando a interação de tripletos estendida sobre os triângulos elementares da rede. (b) Arranjos elementares dos quatro estados fundamentais do modelo BW. As subredes estão indicadas pelos triângulos menores, os quadrados e os círculos. As setas indicam o ordenamento dos spins no estado fundamental em cada subrede.

Pouco depois da introdução do Hamiltoniano dado pela Eq. (1.3), Baxter e Wu [35–37] apresentaram uma solução exata. Desde então, esse Hamiltoniano é denominado de

modelo Baxter-Wu (BW) e vem sendo não apenas extensivamente estudado e generalizado sob o ponto de vista teórico, mas também aplicado em alguns sistemas reais tais como átomos de cripton adsorvidos em submonocamadas em superfícies de grafites basais [38], bem como usadas para estudar a dinâmica do equilíbrio social [39] e o problema de satisfatibilidade da ciência da computação [40] no campo de redes complexas.

Baxter e Wu mostraram que o sistema sofre uma transição de fase de segunda ordem na mesma temperatura crítica do modelo Ising bidimensional $k_B T_c/J = 2/\ln(\sqrt{2} + 1) = 2,269185\dots$, com expoentes críticos $\alpha = \nu = 2/3$ e $\gamma = 7/6$. Em seguida, foi verificado que esse comportamento crítico corresponde a uma teoria de campo conforme com carga central $c = 1$ [41,42]. Devido ao fato de o modelo Baxter-Wu e o modelo de Potts de 4-estados apresentarem expoentes críticos idênticos, além de possuírem a mesma degenerescência do estado fundamental, é esperado que o comportamento crítico de ambos modelos devem pertencer à mesma classe de universalidade [43]. Entretanto, os mesmos mostram diferentes correções de escala: o modelo de Potts de 4-estados apresenta correções logarítmicas com o tamanho do sistema [44], enquanto o modelo Baxter-Wu tem correções de leis de potência com o expoente de correção de escala $w = 2$ [41,42].

Uma generalização direta do modelo Baxter-Wu consiste em considerar valores de spins maiores que meio e incluir um termo de interação do campo cristalino Δ , de modo que o novo Hamiltoniano fica

$$H_{BW} = -J \sum_{\langle ijk \rangle} \sigma_i \sigma_j \sigma_k + \Delta \sum_{i=1}^N \sigma_i^2, \quad (1.4)$$

onde agora, além de considerar as variáveis de spin com valores $\sigma_i = \pm 1$ como no modelo original, pode-se ter $\sigma_i = \pm 1, 0$ para o spin $S = 1$, $\sigma_i = \pm 1/2, \pm 3/2$ para spin $S = 3/2$, e assim sucessivamente para altos valores de spin. Naturalmente, o último termo na equação acima é apenas uma constante no caso do spin $S = 1/2$.

Não há resultados exatos para o Hamiltoniano dado pela Eq. (1.4), exceto nos limites: (i) $\Delta \rightarrow -\infty$, onde o modelo corresponde ao equivalente caso de dois estados com os spins ocupando apenas seus valores de componentes mais alta e o modelo puro de spin $S = 1/2$ é recuperado (mas, por exemplo, no caso do modelo de spin $S = 3/2$ a temperatura de transição é dada por $k_B T_c/J = (3/2)^2 \times 2,269185\dots$); (ii) $\Delta \rightarrow +\infty$, em que o modelo corresponde a outro caso de dois estados equivalente com spins ocupando apenas estados $\pm 1/2$ para spins semi-inteiros (no modelo de spin $S = 3/2$ a temperatura de transição agora é dada por $k_B T_c/J = (1/2)^2 \times 2,269185\dots$) e, para spins inteiros, todos os spins estão no estado zero; (iii) $\Delta/J = z/2$, com z o número de coordenação da rede, onde, em $T = 0$, há cinco diferentes fases coexistindo para o spin $S = 1$ e oito diferentes fases coexistindo para o spin $S = 3/2$ [45]. Mais fases coexistindo estão presentes no estado fundamental para valores de spins mais altos.

O comportamento da transição de fase não está tão claro para valores intermediários de campo cristalino, principalmente em relação a dois aspectos: a existência (ou não) de pontos multicríticos separando as linhas de transição de primeira ordem daquela de segunda ordem, assim como a questão da universalidade da transição de segunda ordem quando se altera o campo cristalino.

Em relação ao primeiro aspecto acima, e no caso do spin $S = 1$, Nienhuis et al. [46], fazendo uma analogia entre o BW e o modelo de Potts de 4-estados diluído, indicaram que o diagrama de fase geral iria exibir uma linha de transição de fase contínua que se conecta a um regime de transição de primeira ordem através de um ponto multicrítico. No entanto,

Kinzel et al. [47], usando um método de escala de tamanho finito, supuseram que uma transição contínua poderia ocorrer apenas para $\Delta \rightarrow -\infty$ (o modelo BW puro). Trabalhos mais recentes usando, por exemplo, simulações de Monte Carlo e invariância conforme, realmente favoreceram a existência de um ponto multicrítico em valores finitos de Δ para o spin $S = 1$ [45, 48–51], sendo o diagrama parecido com o do modelo BC ilustrado na Fig. 1.4 para $H = 0$. Entretanto, ao longo da linha de transição de primeira ordem três fases ferrimagnéticas e uma ferromagnética coexistem com a fase paramagnética, formando uma linha de pontos quártuplos que termina no ponto pentacrítico onde todas as cinco fases se tornam idênticas. A partir desse ponto forma-se uma linha de pontos tetracríticos que corresponde às transições de segunda ordem. No entanto, a localização precisa desse ponto pentacrítico não está bem estabelecida de acordo com diferentes abordagens anteriores.

Adicionalmente à questão da localização do ponto pentacrítico, a universalidade ao longo da região de segunda ordem não está bem estabelecida. Enquanto alguns resultados anteriores baseados em matriz de transferência e invariância conforme sugerissem uma variação contínua dos expoentes críticos com o campo cristalino ao longo da linha de segunda ordem [48], resultados mais recentes relatam uma correspondência entre o comportamento crítico observado no modelo Baxter-Wu com o do modelo de Potts de 4-estados [45]. Alguns autores já propuseram o cenário de uma transição de ordem misturada com propriedades de ambas primeira e segunda ordem [52]. Recentemente, no entanto, evidências de transições contínuas na classe de universalidade do modelo de Potts no regime de $\Delta < 0$ foram obtidas através de simulações multicanônicas e de Wang-Landau [53, 54], e mais recentemente uma combinação de simulações multicanônicas e zeros da distribuição de probabilidade da energia [55]. Contudo, o problema da universalidade permanece para valores de campo cristalino $\Delta \gtrsim 0$.

A topologia do diagrama de fase está ainda menos clara para o modelo de spin $S = 3/2$. O único resultado do qual estamos cientes advém da escala de tamanho finito e invariância conforme que sugerem a existência, ao longo da linha de segunda ordem e próximo da região onde $\Delta/J \sim z/2$, de um pequeno seguimento de linha de primeira ordem com cinco fases coexistindo, isto é, uma linha quártupla [45]. À esquerda dessa linha quártupla temos um ponto pentacrítico, e à direita um ponto tetracrítico terminal. A partir desse ponto tetracrítico terminal, uma linha óctupla em baixas temperaturas se estende até o ponto $T = 0$ e $\Delta/J = 3,25$. Nesse caso, o diagrama se torna bem diferente do obtido para o model BC em $H = 0$.

O segundo aspecto acima, relacionado à classe de universalidade da linha de transição de segunda ordem, também foi abordado para ambos valores de spin. Dos argumentos de grupo de renormalização espera-se que a linha de transição de segunda ordem pertença à mesma classe de universalidade do modelo com spin $S = 1/2$. De fato, isso foi claramente observado simplesmente comparando os expoentes críticos, para spin $S = 1$ [45, 54, 55] e também para $S = 3/2$ [45], principalmente quando se consideram valores negativos de campo cristalino. Entretanto, para valores positivos de campo cristalino, e próximo dos pontos multicríticos, os expoentes são, dentro das incertezas, bastante diferentes do esperado. Portanto, vale a pena verificar se há uma espécie de mudança inesperada de classe de universalidade nessa região, ou a proximidade do ponto multicrítico resulta em efeitos de tamanho finito mais fortes que, em certo sentido, ofuscaram o comportamento crítico.

1.3 Objetivo desse trabalho

Como pode-se notar até agora, os modelos Ising e Blume-Capel apresentam diagramas de fase bem definidos quantitativamente, com pontos críticos e multicríticos localizados com alta precisão tanto por métodos numéricos quanto de forma exata. Por isso, esses modelos serão ideais para utilizarmos e testarmos uma técnica nova e atual denominada de zeros da distribuição de probabilidade da energia (zeros DPE) [56–58] na obtenção da transição e dos expoentes críticos. Essa técnica se mostrou muito eficaz no estudo da criticalidade de vários modelos de spin, muitos dos quais com diagramas de fases bem complicados. Inicialmente, usaremos o método Monte Carlo e o algoritmo de Metropolis [59,60] para construir uma densidade de probabilidade aproximada da energia dos modelos. Uma vez obtida a distribuição de probabilidade, usaremos os zeros DPE assim como argumentos de teorias de escala de tamanho finito para obter a temperatura crítica e o expoente crítico do comprimento de correlação. A classe de universalidade dos modelos será analisada por meio do comportamento das distribuições de probabilidade universais da magnetização e da energia [61–67], já em regiões mais complicadas, onde há maior correção de escala, usaremos a técnica de mistura de campos [68].

Com relação ao modelo BW, os problemas centrais para spins maiores que meio consistem em estabelecer rigorosamente seu diagrama de fase e na determinação da sua classe de universalidade. Os zeros DPE serão especialmente importantes nesse caso, isso porque o método não necessita de nenhum conhecimento prévio do parâmetro de ordem do sistema. Na verdade, estudos de MC no BW mostram que os resultados dependem muito da escolha que se faz de seu parâmetro de ordem (note pela Fig. 1.6 que temos nesse caso três subredes diferentes). Como o esquema de se obter os zeros DPE não envolve o conhecimento prévio de qualquer comportamento termodinâmico específico, acreditamos que esse método seja bastante adequado para o estudo desse modelo sem a chamada simetria *up-down*. A questão da determinação da classe de universalidade ao longo da linha de transição de segunda ordem será explorada por meio das distribuições de probabilidade universal da magnetização (total e das sub-redes) e da energia. Embora essas funções já foram obtidas em alguns casos particulares do modelo [69–72], características específicas dessas distribuições de probabilidade universal ainda estão faltando nesse modelo BW mais geral. Além disso, veremos que a abordagem de mistura de campos será necessária a ser considerada devido à inclinação finita que ocorre na linha de transição em função do campo cristalino.

1.4 Plano da tese

O plano dessa tese é como segue. No próximo capítulo, as técnicas utilizadas serão apresentadas, tais como: detalhes das simulações de Monte Carlo utilizando o algoritmo de Metropolis; obtenção do histograma da energia para os zeros da DPE; obtenção das distribuições universais de probabilidades da energia e magnetizações; e a técnica de mistura de campos. As relações de escala de tamanho finito serão apresentadas em cada processo utilizado. Os resultados para o modelo de BC serão apresentados no Capítulo 3 e os correspondentes ao modelo BW no capítulo 4. O último capítulo é dedicado a conclusões e comentários adicionais.

2 Metodologia

Neste capítulo são apresentadas, de forma sucinta, as técnicas simulacionais utilizadas no estudo da criticalidade dos modelos BC e BW. A base simulacional utiliza o algoritmo de Metropolis com mudanças de spin único, aliado aos zeros DPE e técnicas de histogramas simples. A base teórica provém da teoria de escala de tamanho finito, juntamente com a ideia de universalidade apresentadas pelas distribuições de probalidades da energia e magnetizações.

2.1 Método Monte Carlo (MC)

Em 1902, Gibbs mostrou que a probabilidade de ocupação do microestado μ de um sistema em equilíbrio térmico com um reservatório a temperatura T é dada por

$$p_\mu = \frac{1}{Z} e^{-\beta E_\mu}, \quad (2.1)$$

onde E_μ é a energia do microestado μ , $\beta = 1/k_B T$, sendo k_B a constante de Boltzmann, e Z é função de partição cujo valor é dado por

$$Z = \sum_{\mu} e^{-\beta E_\mu}, \quad (2.2)$$

que corresponde a soma sobre todos os possíveis microestados do sistema.

O valor esperado $\langle \mathcal{A} \rangle$ de qualquer observável $\mathcal{A}$ do sistema pode ser avaliado de acordo com

$$\langle \mathcal{A} \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\mu} \mathcal{A}_\mu e^{-\beta E_\mu}. \quad (2.3)$$

Nesse caso, todas as configurações possíveis devem ser levadas em consideração. No entanto, avaliar todos os microestados é, na maioria dos casos, impraticável em sistemas com muitos graus de liberdade. Podemos lidar com esse problema calculando o valor esperado não para todos os estados, mas apenas para aqueles com as M configurações mais importantes a uma dada temperatura. Se essas configurações mais importantes são amostradas de uma certa distribuição de probabilidade p_μ , então o valor esperado passa a ser determinado por

$$\mathcal{A}_M = \frac{\sum_{i=1}^M \mathcal{A}_{\mu_i} p_{\mu_i}^{-1} e^{-\beta E_{\mu_i}}}{\sum_{i=1}^M p_{\mu_i}^{-1} e^{-\beta E_{\mu_i}}}. \quad (2.4)$$

Conforme o número de estados escolhidos aumenta, essa medida se torna mais precisa, e no limite $M \rightarrow \infty$ teremos $\mathcal{A}_M = \langle \mathcal{A} \rangle$.

É possível encontrar os estados cujas contribuições são mais significativas para a soma dada pela Eq. (2.4) e obter uma ótima estimativa para $\langle \mathcal{A} \rangle$ com um número de termos M reduzido. Essa é a essência do método Monte Carlo (MC) [73, 74] e a técnica usada para obter os estados mais representativos daqueles possíveis é denominada de amostragem por importância.

De modo geral, a amostragem por importância pode ser feita através de qualquer distribuição de probabilidade, mas a escolha mais conveniente é o fator de Boltzmann dado pela Eq. (2.1). Isso implica na seguinte estimativa

$$\mathcal{A}_M = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M \mathcal{A}_{\mu_i}. \quad (2.5)$$

Um procedimento eficaz na amostragem por importância das configurações consiste no método Monte Carlo através das cadeias de Markov. A ideia constitui-se em gerar uma sequência estocástica de estados $\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_i, \mu_{i+1}, \dots, \mu_M$ ($M \gg 1$) em que o sistema se move do estado μ_i para o próximo estado μ_{i+1} de acordo com a probabilidade de transição $W(\mu_i \rightarrow \mu_{i+1})$ que não depende dos demais estados. O conjunto de estados aleatórios assim obtido é denominado de cadeia de Markov.

No que segue, será considerado o par de estados μ e ν , de modo que $W(\mu \rightarrow \nu)$ será a probabilidade de transição sujeita à condição de normalização

$$\sum_{\mu} W(\mu \rightarrow \nu) = 1. \quad (2.6)$$

Para M suficientemente grande, seria possível escolher W tal que uma configuração μ gerada no processo markoviano tenha probabilidade dada pelo desejado fator de Boltzmann.

A fim de garantir uma boa estimativa para a média térmica, a cadeia de Markov deve ser tal que seja possível alcançar um estado qualquer a partir de qualquer estado por uma sequência finita de transições. Essa condição é conhecida como ergodicidade. Uma forma de garantir a ergodicidade consiste em estabelecer que todas as probabilidades sejam não nulas, para que qualquer estado do sistema possa ser realmente atingido nesse processo.

A distribuição de Boltzmann será obtida quando a cadeia de Markov tornar-se estacionária, o que pode ser assegurado pela condição de balanço detalhado. Isso pode ser verificado considerando que a evolução da cadeia de Markov é descrita por uma distribuição de probabilidade dependente do tempo que segue a equação mestra

$$\frac{dp_{\mu}(t)}{dt} = \sum_{\mu} [p_{\nu} W(\nu \rightarrow \mu) - p_{\mu} W(\mu \rightarrow \nu)], \quad (2.7)$$

onde p_{μ} representa a probabilidade de encontrar o sistema no estado μ no tempo t e W é a taxa de transição entre os estados correspondentes. Para tempos suficientemente longos, pode-se verificar que a taxa de transição de ir para o estado μ será igual a taxa de transição de sair do mesmo, ou seja, a distribuição de probabilidade torna-se constante no tempo, assim, a distribuição estacionária desejada será igual à de equilíbrio. Isso acontece quando

$$\sum_{\mu} p_{eq}(E_{\nu}) W(\nu \rightarrow \mu) = \sum_{\mu} p_{eq}(E_{\mu}) W(\mu \rightarrow \nu), \quad (2.8)$$

e uma possível forma de satisfazer essa condição consiste em fazer

$$p_{eq}(E_{\nu}) W(\nu \rightarrow \mu) = p_{eq}(E_{\mu}) W(\mu \rightarrow \nu), \quad (2.9)$$

que é denominada de balanço detalhado. Essa é uma condição suficiente para que as probabilidades sejam consistentes com a distribuição estacionária. Escolhendo p_{eq} como a distribuição de Boltzmann, teremos

$$\frac{W(\mu \rightarrow \nu)}{W(\nu \rightarrow \mu)} = \frac{\exp(-\beta E_{\nu})}{\exp(-\beta E_{\mu})} = \exp[-\beta (E_{\nu} - E_{\mu})]. \quad (2.10)$$

Dessa forma, as transições que diminuem a energia são mais prováveis que aquelas que a aumentam. Resta agora desenvolver um algoritmo capaz de gerar os estados de forma mais otimizada possível.

Transições entre estados μ e ν cujas probabilidades respeitam a condição do balanço detalhado são geradas pelo algoritmo de Metropolis. Esse algoritmo foi proposto em 1953 por Metropolis e colaboradores [60] e tornou-se um dos mais usados no método MC. Esse método, usando o algoritmo de Metropolis, pode ser ilustrado em uma rede de N sítios, cada um ocupado por um spin. Então, dado um estado μ em algum passo da cadeia de Markov, propõe-se um novo estado ν que difere do anterior apenas pela mudança do estado de um spin de algum sítio da rede. Uma forma de maximizar essa taxa de transição e produzir um algoritmo mais eficiente, consiste em atribuir o maior valor possível a uma das probabilidades e ajustar a outra de acordo com a equação acima. Para tanto, suponha que o estado ν tenha energia maior que μ , ou seja, $E_\nu > E_\mu$. Então, a maior das duas taxas será $W(\nu \rightarrow \mu)$, que pode ser igual a um, e para satisfazer a Eq. (2.10), $W(\mu \rightarrow \nu)$ deve ser igual a $e^{-\beta(E_\nu - E_\mu)}$. Dessa forma

$$W(\mu \rightarrow \nu) = \begin{cases} e^{-\beta(E_\nu - E_\mu)} & , \text{ se } E_\nu - E_\mu > 0 \\ 1 & , \text{ se } E_\nu - E_\mu \leq 0. \end{cases} \quad (2.11)$$

Ou seja, se for proposto um movimento geral $\mu \rightarrow \nu$ em que a energia aumente, as vezes esse movimento será aceito e as vezes não, dependendo da probabilidade; mas se a energia permanecer a mesma ou diminuir, o movimento sempre será aceito.

Na prática, as simulações de MC através do algoritmo de Metropolis são implementadas conforme o seguinte esquema.

1. Gera-se um estado inicial μ_i que pode ser aleatório ou não.
2. Escolhe-se um sítio j da rede com igual probabilidade.
3. Escolhe-se um novo estado para o spin desse sítio.
4. Calcula-se a diferença ΔE de energia associada com a mudança desse spin.
5. Gera-se um número aleatório $r \in [0, 1)$ de uma distribuição uniforme.
6. Se $\Delta E \leq 0$ ou $r < e^{-\beta \Delta E}$, aceita-se a mudança e obtém-se $\mu_{i+1} \neq \mu_i$. Caso contrário, rejeita-se a mudança ($\mu_{i+1} = \mu_i$).
7. Repete-se os passos de 2 a 6.

Como as configurações μ_{i+1} e μ_i são, dessa forma, ainda muito parecidas, define-se um passo de MC (MCS) por spin quando a rede toda é sequencialmente varrida da forma acima, ou quando sorteia-se, aleatoriamente, N sítios da rede. Geralmente, após um passo de MC são guardadas as configurações para as realizações das médias desejadas.

2.2 Método do Histograma Simples

O método do histograma simples é uma técnica que permite extrapolar os resultados de uma simulação para uma temperatura diferente, mas próxima daquela simulada. Com

isso, não será necessário repetir a simulação em cada temperatura para obter as propriedades estatísticas do sistema, o que caracteriza um considerável ganho computacional. O método é devido a Valleau e Card [75], porém, uma versão mais moderna, devido a Ferrenberg e Swendsen [76], é mais utilizada atualmente.

Conforme descrito na seção anterior, uma simulação de Monte Carlo é a realização de uma cadeia de Markov cujos estados com energia E são gerados através da distribuição de Boltzmann

$$p_{\beta_0}(E) = \frac{g(E)}{\mathcal{Z}(\beta_0)} e^{-\beta_0 E}, \quad (2.12)$$

onde $g(E)$ é o número de estados (ou degenerescência) com energia E , $\beta_0 = 1/k_B T_0$ é o inverso da temperatura em que a simulação foi realizada, sendo a função de partição agora dada por

$$\mathcal{Z}(\beta_0) = \sum_E g(E) e^{-\beta_0 E}. \quad (2.13)$$

Podemos usar o conjunto de estados gerados para estimar a distribuição de probabilidade de equilíbrio através da frequência de ocorrências dos estados com energia E , o que se denomina histograma da energia, $H(E)$, sendo dado por

$$\frac{H(E)}{N_{\text{MCS}}} \approx p_{\beta_0}(E), \quad (2.14)$$

em que N_{MCS} é o número de passos de Monte Carlo.

Igualando esse resultado com a Eq. (2.12), pode-se escrever a densidade de estados como

$$g(E) \approx \frac{H(E) \mathcal{Z}(\beta_0)}{N_{\text{MCS}}} e^{\beta_0 E}. \quad (2.15)$$

Notando que $g(E)$ não depende da temperatura, a distribuição de probabilidade a uma temperatura diferente, T , pode ser obtida com a mesma densidade de estados

$$p_{\beta}(E) = \frac{g(E)}{\mathcal{Z}(\beta)} e^{-\beta E}, \quad (2.16)$$

e usando a Eq. (2.15), podemos reescrever a distribuição de probabilidades como

$$p_{\beta}(E) = \frac{H(E) e^{-\Delta\beta E}}{\sum_E H(E) e^{-\Delta\beta E}}, \quad (2.17)$$

onde $\Delta\beta = \beta - \beta_0$ e uma normalização da probabilidade foi imposta para eliminar a razão desconhecida $\mathcal{Z}(\beta_0)/\mathcal{Z}(\beta)$. Dessa forma, a nova distribuição de probabilidade pode ser usada para calcular o valor médio de qualquer quantidade $\mathcal{A}(E)$ através de

$$\langle \mathcal{A} \rangle_{\beta} = \frac{\sum_E \mathcal{A}(E) H(E) e^{-\Delta\beta E}}{\sum_E H(E) e^{-\Delta\beta E}}. \quad (2.18)$$

Isso significa que podemos usar o mesmo $H(E)$, calculado em T_0 , para obter a distribuição de probabilidade e, de uma maneira bem simples, os valores médios das grandezas termodinâmicas em uma temperatura diferente, T .

Embora o método do histograma seja muito eficiente e, aliado às simulações de Monte Carlo, permita uma descrição precisa do comportamento crítico, o mesmo será válido apenas em temperaturas próximas daquela simulada. Além disso, pode apresentar erros adicionais àqueles intrínsecos às simulações originais.

2.3 Leis de Potência e Universalidade

Como mencionado na Introdução, no ponto crítico ocorre a formação de configurações de spins similarmente orientados em várias escalas de tamanho. Dessa forma, o sistema apresenta invariância por escala no ponto crítico, um comportamento diretamente ligado a leis de potência. Portanto, espera-se que a forma das divergências apresentadas pela compressibilidade, susceptibilidade e outras quantidades termodinâmicas seja do tipo leis de potências. Com o intuito de melhor analisar essas singularidades, define-se convenientemente a temperatura reduzida t

$$t \equiv \frac{T - T_c}{T_c}, \quad (2.19)$$

que é, na verdade, uma simples medida do desvio da temperatura crítica, T_c . Dessa forma, o comportamento dos observáveis termodinâmicos pode ser expresso, próximos do ponto crítico, conforme

$$\mathcal{A}(t) \sim |t|^\zeta, \quad (2.20)$$

cujo expoente crítico associado ao observável $\mathcal{A}$ é expresso como

$$\zeta = \lim_{t \rightarrow 0} \frac{\ln |\mathcal{A}(t)|}{\ln t}. \quad (2.21)$$

Dessa forma, na escala log-log a lei de potência é dada por uma reta cuja inclinação é o expoente crítico.

Conforme indicado na Fig. 1.3 (a), para fluidos, e na Fig. 1.3 (b), para sistemas magnéticos, a inclinação das isotermas são proporcionais ao inverso da compressibilidade isotérmica e ao inverso da susceptibilidade isotérmica, respectivamente, de modo que ambas quantidades divergem para o infinito à medida que se aproximam do ponto crítico. Como o comportamento é o mesmo se essa aproximação ocorre a partir de temperaturas mais baixas ou mais altas, o expoente γ fica definido por

$$k_T(t) \sim |t|^{-\gamma} \quad \text{e} \quad \chi_T(t, H = 0) \sim |t|^{-\gamma} \quad (2.22)$$

para fluidos e para o caso magnético, respectivamente.

O calor específico, $c_* = \frac{1}{N} [\partial U / \partial T]_*$, onde $*$ representa o volume V , a pressão ou o campo externo H , e N o número de partículas do sistema, pode divergir com a aproximação de T_c , o que leva ao expoente crítico α através de

$$c_{V,p}(t) \sim |t|^{-\alpha} \quad \text{e} \quad c_H(t, H = 0) \sim |t|^{-\alpha} \quad (2.23)$$

para fluidos e para sistemas magnéticos, respectivamente.

Ao longo da isoterma crítica, $T = T_c$, os parâmetros de ordem são funções contínuas dos campos aplicados, da pressão em fluidos e do campo magnético em sistemas magnéticos, o que define o expoente crítico δ ,

$$\Delta\rho(t = 0) \sim \Delta p^{1/\delta} \quad \text{e} \quad M(t = 0, H) \sim H^{1/\delta}, \quad (2.24)$$

com $\Delta p = p - p_c$. Além disso, são funções contínuas da temperatura, e à medida que se aproximam do ponto crítico temos

$$\Delta\rho(t) \sim |t|^\beta \quad \text{e} \quad M(t, H = 0) \sim |t|^\beta, \quad (2.25)$$

onde $\Delta\rho = \rho_L - \rho_G$ e β é o expoente crítico correspondente a cada parâmetro de ordem.

O comprimento de correlação é uma medida da distância característica na qual o comportamento de dois elementos do sistema estão correlacionados. Nas proximidades do ponto crítico o sistema se torna altamente correlacionado e o comprimento de correlação cresce e diverge para infinito seguindo uma lei de potência conforme

$$\xi(t, H = 0) \sim |t|^{-\nu}, \quad (2.26)$$

onde ν é o expoente crítico do comprimento de correlação.

Além da física, as leis de potência aparecem amplamente em biologia, ciências da terra, economia e finanças e ciências sociais [77]. São descritas por leis de potência, por exemplo, a distribuição do tamanho das cidades, magnitude de terremotos, número de citação de artigos, incêndios florestais, palavras em um texto, diâmetro das crateras lunares, etc.

As primeiras tentativas de formular uma descrição matemática dos fenômenos críticos incluem a teoria de van der Waals em 1873 [78] para explicar mudanças de fase em fluidos, a teoria de campo molecular de Weiss em 1907 [79] para explicar a transição de fase magnética, e a teoria de Landau de 1937 [80], esta última mais geral e fenomenológica, na qual muitos sistemas físicos poderiam ser tratados. Todas essas teorias são hoje conhecidas como teorias de campo médio. Do ponto de vista qualitativo, essas teorias tiveram um grande sucesso, pois conseguiram descrever características importantes das transições de fase de fluidos e ferromagnetos, como a existência do ponto crítico, por exemplo. Mas falharam do ponto de vista quantitativo, uma vez que fornecem os valores errados para os expoentes críticos. Para o expoente crítico da magnetização do modelo Ising bidimensional, por exemplo, as teorias clássicas fornecem $\beta = 1/2$, para o expoente associado à susceptibilidade $\gamma = 1$ e para o expoente do comprimento correlação $\nu = 1/2$, enquanto os valores dos expoentes críticos advindos da solução de Onsager [10] para o modelo Ising bidimensional são $\beta = 1/8$, $\gamma = 7/4$ e $\nu = 1$.

Além disso, na teoria do campo médio os expoentes críticos tem o mesmo valor em qualquer dimensão, como ocorre nos modelos Ising bi e tridimensional, por exemplo. Mas, na verdade, a dimensão espacial tem grande influência na determinação do expoente crítico. Já outros fatores, como a estrutura da rede, não são igualmente importantes. No modelo Ising, por exemplo, não importa se a rede é quadrada, triangular, ou hexagonal, os expoentes críticos são os mesmos. De fato, comportamento crítico de ferromagnetos reais independe da grande variedade de estruturas cristalinas que apresentam.

Ficou claro que existe uma grande similaridade entre as propriedades críticas de fluidos simples e ferromagnetos. Além de toda essa semelhança, constatou-se que fluidos simples tem os mesmos expoentes críticos do modelo Ising tridimensional. Essa similaridade é apenas um exemplo correspondente a uma hipótese mais geral denominada universalidade do ponto crítico. De acordo com essa hipótese, existem apenas algumas quantidades que são importantes para determinar o comportamento crítico dos sistemas: (i) a dimensão do espaço; (ii) a dimensão do parâmetro de ordem; (iii) o alcance das interações e também as simetrias do hamiltoniano. Todos os sistemas que apresentam esses mesmos parâmetros devem ter os mesmos expoentes críticos e são ditos como pertencentes à mesma classe de universalidade. Por isso, os fluidos simples pertencem à mesma classe de universalidade do modelo Ising tridimensional, que inclui também misturas binárias e certas ligas metálicas.

2.4 Leis de escala

O caráter de leis de potências apresentado pelas quantidades termodinâmicas pode ser mais formalmente deduzido por meio da hipótese de escala. Para isso, faz-se necessário

dividir a energia livre por sítio em duas partes: uma regular, $g_r(T, H)$, que não se altera significativamente à medida que o sistema se aproxima do ponto crítico e de uma parte singular, $g_s(t, H)$, que apresenta o importante comportamento singular do sistema próximo do ponto crítico. Assim, a energia livre no caso magnético, que é o mais simples, pode ser escrita como

$$g(T, H) = g_r(T, H) + g_s(t, H), \quad (2.27)$$

onde t é a temperatura reduzida e H é o campo magnético.

A hipótese de escala afirma que próximo do ponto crítico a parte singular da energia livre é uma função homogênea generalizada, ou seja, existem dois parâmetros, a_H e a_t , tal que para qualquer valor de λ positivo, $g_s(t, H)$ deve obedecer a relação

$$g_s(t, H) = \lambda g_s(\lambda^{a_t} t, \lambda^{a_H} H). \quad (2.28)$$

Dessa forma, os resultados da hipótese de escala serão consequências das propriedades das funções homogêneas generalizadas. Especialmente, como as transformadas de Legendre são funções homogêneas generalizadas, todos os potenciais termodinâmicos também o são, assim como as suas derivadas [81].

Pode-se mostrar que é possível exprimir todos os expoentes críticos em termos dos parâmetros a_t e a_H , embora nenhum desses possam ser determinados pela hipótese de escala. No entanto, como todos os expoentes críticos podem ser expressos em termos de apenas dois parâmetros de escala, então, se dois desses expoentes críticos são determinados, consequentemente todos os outros podem ser especificados.

Derivando $g_s(t, H)$ em relação a H e escolhendo $\lambda = |t|^{-1/a_t}$ e comparando com a Eq. (2.24), ou escolhendo $\lambda = H^{-1/a_H}$ e comparando com a Eq. (2.25), nos leva às respectivas relações

$$\beta = -\frac{a_H + 1}{a_t} \quad \text{e} \quad \delta = -\frac{a_H}{a_H + 1}. \quad (2.29)$$

Derivando agora duas vezes em relação a H e a t , escolhendo $\lambda = |t|^{-1/a_t}$, e comparando com as Eqs. (2.22) e (2.23), respectivamente,

$$\gamma = \frac{2a_H + 1}{a_t} \quad \text{e} \quad \alpha = \frac{2a_t + 1}{a_t}. \quad (2.30)$$

Resolvendo para a_H e a_t , é possível relacionar os diferentes expoentes críticos entre si, o que nos leva às denominadas relações de escala

$$\begin{aligned} \alpha + 2\beta + \gamma &= 2, \\ \alpha + \beta(\delta + 1) &= 2, \\ \beta(\delta - 1) &= \gamma, \end{aligned} \quad (2.31)$$

que são as igualdades de Rushbrooke, Griffiths e Widom, respectivamente.

Esses expoentes críticos podem ser determinados de forma exata em alguns modelos, através de experimentos, ou por meio de simulações de Monte Carlo em sistemas finitos. Neste último caso, faz-se necessário analisar o comportamento do sistema com a variação do tamanho linear do mesmo.

Enquanto no sistema de tamanho infinito, ou seja, no limite termodinâmico, o comprimento de correlação diverge no ponto crítico, como indicado na Eq. (2.26), em sistema de tamanho finito, como os usados em simulações computacionais, o mesmo é limitado pelo tamanho L do sistema. Então, próximo do ponto crítico, o comprimento de correlação

pode ser substituído pelo tamanho linear do sistema. Esse comportamento dos sistemas finitos próximo do ponto crítico é descrito pela teoria de escala de tamanho finito proposta por Fisher em 1971 [82].

Através dessa abordagem, as propriedades críticas do sistema no limite termodinâmico podem ser extraídas das propriedades dos sistemas finitos substituindo a parte singular da energia livre por uma relação de escala com a seguinte forma [83–85],

$$g_s(T, L) = L^{(\alpha-2)/\nu} \mathbf{g}_s(tL^{1/\nu}, HL^{(\gamma+\beta)/\nu}), \quad (2.32)$$

onde os expoentes críticos são aqueles correspondentes ao sistema infinito e H é o campo magnético. As correspondentes leis de escala para as quantidades termodinâmicas de interesse podem ser determinadas dessa expressão, por exemplo

$$\begin{aligned} M(t, H=0) &= L^{-\beta/\nu} M_o(x_t), \\ \chi(t, H=0) &= L^{\gamma/\nu} \chi_o(x_t), \\ c_H(t, H=0) &= L^{\alpha/\nu} c_o(x_t), \end{aligned} \quad (2.33)$$

onde $x_t = tL^{1/\nu}$ e $M_o(x_t)$, $\chi_o(x_t)$ e $C_o(x_t)$ são as funções de escala.

Para um dado L (grande), o máximo das funções de escalas ocorrem em um certo x_c . Localizando a temperatura pseudocrítica T_c^L correspondente a esse máximo, pode-se obter a temperatura de transição com precisão por meio de [59]

$$T_c^L = T_c + AL^{-1/\nu}, \quad (2.34)$$

onde T_c é a temperatura de transição do sistema infinito, A é uma constante não universal, e ν é o expoente crítico do comprimento de correlação.

Nas simulações de MC, obtém-se uma temperatura pseudocrítica T_c^L para cada tamanho de rede, que pode depender da grandeza termodinâmica considerada. Mas, à medida que se aumenta o tamanho das redes, os valores de T_c^L tendem a se aproximar daqueles de T_c . Ao usar redes menores, correções de escala de tamanho finito também devem ser levadas em consideração. Isso pode ser obtido da Eq. (2.34) considerando [59]

$$T_c^L = T_c + AL^{-1/\nu}(1 + A'L^{-w}), \quad (2.35)$$

onde A' é uma constante não universal e w é o expoente de correção de escala.

Além de fornecer uma relação entre os vários expoentes críticos, a hipótese de escala também mostra a existência de curvas universais em que as funções de escala devem colapsar. Ou seja, um gráfico de determinada função de escala versus a variável de escala $x_t = tL^{1/\nu}$ para todo o intervalo de L e T mostrará um colapso de todas as curvas evidenciando o caráter universal das mesmas. Isso significa que sistemas que possuem os mesmos expoentes críticos e funções de escalas devem pertencer à mesma classe de universalidade [81].

2.5 Zeros da distribuição de probabilidade da energia

Os zeros da distribuição de probabilidade da energia (zeros DPE) [56–58] é um método usado para estudar transições de fase e que é similar, em princípio, aos zeros de Fisher

da função de partição [86]. No entanto, os zeros DPE apresentam algumas vantagens em relação ao procedimento de Fisher, principalmente no que diz respeito ao uso de simulações de Monte Carlo. Adicionalmente, os zeros DPE mostram-se eficientes não apenas no estudo de transições de fase em sistemas magnéticos, mas também em outros modelos como em homopolímeros monoméricos [56–58].

A função de partição dada pela Eq. (2.13) pode ser reescrita para um sistema com níveis discretos de energia como

$$\mathcal{Z} = \sum_E g(E) e^{-\beta E} = e^{-\beta \epsilon_0} \sum_{n=1}^{\mathcal{N}} g_n e^{-\beta n \epsilon} = e^{-\beta \epsilon_0} \sum_{n=1}^{\mathcal{N}} g_n z^n, \quad (2.36)$$

onde $g_n = g(E)$, $z = e^{-\beta \epsilon}$ e assumiu-se que $E = E_n = \epsilon_0 + n\epsilon$, sendo ϵ_0 a energia do estado fundamental, ϵ a diferença entre os níveis de energia e $n = 0, 1, 2, \dots, \mathcal{N}$.

Para sistemas magnéticos em redes finitas, sabemos que $\mathcal{N}$ também é finito. Isso implica que os zeros da função de partição $\mathcal{Z} = \mathcal{Z}(z) = 0$, quando vista como um polinômio na variável z , são números complexos que ocorrem aos pares conjugados, já que g_n é sempre positivo. No entanto, Fisher mostrou que [86], no limite termodinâmico $\mathcal{N} \rightarrow \infty$, uma raiz $z_c = e^{-\beta_c \epsilon}$, no eixo real, localiza a transição de fase do sistema na temperatura $\beta_c = 1/k_B T_c$. Para redes finitas, pode-se procurar pelo zero dominante, onde dominante aqui significa o zero mais próximo do eixo real.

A soma do meio da Eq. (2.36) pode ser reescrita em uma forma mais conveniente multiplicando-a por $1 = e^{-\beta_0 E} e^{\beta_0 E}$, onde β_0 é dada por alguma temperatura de referência T_0 . Dessa forma, obtemos

$$\mathcal{Z} = e^{-\Delta \beta \epsilon_0} \sum_{n=1}^{\mathcal{N}} h_{\beta_0}(n) x^n, \quad (2.37)$$

em que $\Delta \beta = \beta - \beta_0$, $h_{\beta_0}(n) = g_n e^{-\beta_0 E}$ e $x = e^{-\Delta \beta \epsilon}$. O conjunto de zeros $\{x_i\}$ da equação acima é simplesmente o conjunto de zeros de Fisher $\{z_i\}$ renormalizados resultantes da Eq. (2.36), pois temos $x = e^{-\beta \epsilon} / e^{-\beta_0 \epsilon} = z / e^{-\beta_0 \epsilon}$. Alguns dos benefícios da Eq. (2.37) sobre a Eq. (2.36) (onde em (2.36) é necessário calcular toda a densidade de estados) são dados abaixo.

Primeiramente, $h_{\beta_0}(n) = g_n e^{-\beta_0 E}$ é simplesmente o histograma da energia não normalizada na temperatura T_0 , que pode ser facilmente calculado das simulações de Monte Carlo. Consequentemente, os zeros dados pela Eq. (2.37) são os correspondentes zeros da distribuição de probabilidade da energia. Como as caldas da distribuição de probabilidade da energia são menos populadas, um corte δ pode ser feito desprezando todos os coeficientes $h_{\beta_0}(n) \leq \delta$, o que irá reduzir significativamente o grau do polinômio, principalmente quando se trata de redes finitas grandes. Adicionalmente, pode-se normalizar os coeficientes do polinômio fazendo $h_{\beta_0}(n)/h_{\beta_0}(max)$, onde $h_{\beta_0}(max)$ é o valor máximo do histograma, de modo que evitamos lidar com coeficientes polinomiais muito grandes e complicados.

Em segundo lugar, para $\beta_0 = \beta_c$, o zero correspondendo a uma transição de fase, para um sistema infinito, é $x_c(1, 0)$. Isso significa que para redes finitas de tamanho L , o zero dominante x_c^L deve estar próximo do ponto $(1, 0)$. Esse ponto é, na verdade, o mesmo para qualquer tamanho de rede ou qualquer modelo, o que torna o processo de localizar o zero dominante numericamente muito mais fácil.

Finalmente, o grau de liberdade extra, introduzido pela temperatura de referência T_0 (ou, equivalentemente, β_0), permite encontrar iterativamente o zero dominante x_c^L , para um tamanho de rede L , através do seguinte algoritmo [56–58]:

1. Escolhe-se uma temperatura β_0^j e constrói-se um histograma $h_{\beta_0^j}$ ($j = 0$ seria um primeiro chute);
2. Calcula-se todos os zeros do polinômio com coeficientes dados por $h_{\beta_0^j}$;
3. Encontra-se o zero dominante x_c^j :
 - (a) se x_c^j está, com certo critério, próximo o suficiente do ponto $(1,0)$, faz-se $x_c^L = x_c^j$ e pare;
 - (b) se não, faça

$$\beta_0^{j+1} = -\epsilon^{-1} \ln [\Re(x_c^j)] + \beta_0^j \quad (2.38)$$

e volte ao item 1.

No final desse processo, temos não apenas a raiz complexa x_c^L , mas também $\beta_0^L = \beta_c^L = \beta_c$, a temperatura pseudocrítica desejada. Esse processo é repetido para vários valores finitos de rede L .

A relação de escala de tamanho finito para a temperatura pseudocrítica T_c^L , como uma função do tamanho da rede L (grande) é dada ou pela Eq. (2.34) ou pela Eq. (2.35), dependendo dos efeitos de tamanho finito no sistema. Como x_c^L está relacionado ao ponto de transição, espera-se também que

$$x_c^L = x_c + BL^{-1/\nu}, \quad (2.39)$$

sendo B outra constante não universal. Nesse sentido, a parte real $\Re(x_c^L) \sim 1$, e a parte imaginária $\Im(x_c^L)$ tendem a zero, escalando com $-1/\nu$ como [56]

$$\Im(x_c^L) = CL^{-1/\nu}. \quad (2.40)$$

2.6 Distribuição de probabilidade universal

A classe de universalidade de um sistema é determinada por seus expoentes críticos, por isso, todos os sistemas que apresentam os mesmos expoentes críticos pertencem a mesma classe de universalidade. No entanto, esse não é o único critério. Outro critério importante consiste em obter a função distribuição de probabilidade (FDP) de alguma variável termodinâmica, como a energia e a magnetização, calculadas no ponto de transição. A FDP acaba sendo uma quantidade bastante útil nesse sentido, pois é, de fato, uma característica da classe de universalidade correspondente. A utilidade das FDPs, principalmente quando usamos simulações computacionais, pode ser resumida pelos seguintes argumentos: (i) as mesmas podem ser obtidas diretamente das simulações de Monte Carlo; (ii) quando obtém-se uma localização precisa do ponto de transição, pode-se determinar a classe de universalidade simplesmente comparando as FDPs; (iii) as FDPs podem ser estendidas para casos assimétricos, onde efeitos de misturas de campos são importantes e necessários para construir as variáveis de escala extensivas relevantes; (iv) é importante ressaltar que a FDP, no ponto de transição, carrega mais informações sobre a classe de universalidade que apenas o conhecimento dos principais expoentes críticos (por exemplo, expoentes de correção de escala estão envolvidos ao comparar FDPs em redes de tamanho finito [61–63]).

Inicialmente, usou-se a magnetização, ou parâmetro de ordem, no estudo envolvendo o cálculo de FDPs em modelos tipo Ising [61–66, 68]. No entanto, devido a assimetria dos

campos de escala intensivos dos modelos estudados, a maioria dos trabalhos anteriores precisaram lidar com efeitos da mistura de campos, uma condição fundamental para obter, de forma correta, o ponto multicrítico que separa as linhas de transição de primeira daquela de segunda ordem. Como a FDP da magnetização já foi usada e extensivamente descrita anteriormente, vamos descrever o método tendo como exemplo a FDP da energia, uma vez que será, como veremos depois, uma função mais robusta que a magnetização em si para o modelo BW (naturalmente, para uma comparação, iremos computar a FDP da magnetização, uma vez que ambas as abordagens são, na verdade, similares).

Como na Ref. [68] iremos discutir primeiro o caso simétrico, e depois o caso assimétrico com procedimento de mistura de campos. Simétrico aqui significa que a linha de transição de primeira ordem é paralela a um dos eixos de campo termodinâmico.

2.6.1 Distribuição da energia no caso simétrico

Em analogia à hipótese de escala de tamanho finito, no ponto de transição, a FDP da energia deve escalar com tamanho de sistemas finitos L (grandes) como

$$\begin{aligned} P_L(e - e_0) &= bL^u P^* [bL^v (e - e_0)], \\ P_L(\epsilon) &= bL^u P^* (bL^v \epsilon), \end{aligned} \quad (2.41)$$

onde e é a densidade de energia (como será definido abaixo, e é proporcional a energia por sítio), $e_0 = \langle e \rangle$ é o valor médio da densidade de energia, b é uma constante métrica não universal, $u = v = (1 - \alpha)/\nu$ [72], com α o expoente crítico do calor específico, e P^* a função universal desejada. Nas equações acima, e é uma variável contínua e P e P^* são funções que foram convenientemente deslocadas da origem definindo $\epsilon = e - e_0$.

Essas funções de escalas são características da classe de universalidade do sistema, ou seja, modelos pertencentes à mesma classe de universalidade compartilham das mesmas funções de escala. Então, para analisarmos a classe de universalidade dos modelos precisamos, inicialmente, obter a FDP a partir das simulações de Monte Carlo executadas na temperatura de transição (ou próximo da temperatura crítica se tivermos apenas uma boa estimativa para a mesma). Isso pode ser feito uma vez que as simulações fornecem uma série de valores discretos das energias E_i , onde $1 \leq i \leq N_{MCS}$ e N_{MCS} é o número total de MCS por spin. Quando o Hamiltoniano tem valores contínuos, uma discretização pode ser feita considerando intervalos regulares de energia. Desses dados, a probabilidade $\mathcal{P}_L(E_i)$ para uma dada energia discreta E_i pode ser dada por

$$\mathcal{P}_L(E_i) = H(E_i) / N_{MCS}, \quad (2.42)$$

onde $H(E_i)$ é o número de ocorrências (histograma) da energia E_i na simulação.

Como já discutido anteriormente, $H(E_i)$ também foi usada para obter os zeros da FDP. No entanto, como para a FDP universal precisamos apenas de uma simulação na temperatura já calculada, podemos realizar essa simulação com um N_{MCS} o mais longo possível, principalmente para redes maiores, para obter valores de energia bem distribuídos (ou as magnetizações, quando for o caso), e permitindo ainda a utilização, sempre que necessário, de técnicas de repesagem de histograma simples em um amplo intervalo de parâmetros que estão próximos do ponto de transição.

Uma vez que $\sum_{E_i} H(E_i) = N_{MCS}$, a probabilidade fica normalizada

$$\sum_{E_i} \mathcal{P}_L(E_i) = 1, \quad (2.43)$$

além disso,

$$E_0 = \langle E \rangle = \left(\sum_{E_i} E_i \right) / N_{MCS} = \sum_{E_i} \mathcal{P}_L(E_i) E_i. \quad (2.44)$$

Para os presentes modelos bidimensionais, as energias E_i se mantêm na faixa de valores $[-2L^2S^n, +2L^2S^n]$ (onde n é igual a 2 para os modelos Ising e BC e igual a 3 para o modelo BW) e ficam espaçados por ΔE ($\Delta E = 4$ para $S = 1/2$ e $\Delta E = 1$ para $S = 1$ e $3/2$). Definindo a densidade de energia como $e_i = E_i/2L^2S^n$, podemos ver que $-1 \leq e_i \leq 1$ e teremos, da Eq. (2.43)

$$\sum_{E_i} \mathcal{P}_L(E_i) = \sum_{e_i=-1}^{e_i=+1} \frac{\mathcal{P}_L(e_i)}{\Delta E/2L^2S^n} \Delta E/2L^2S^n = \int_{-1}^{+1} \frac{\mathcal{P}_L(e)}{\Delta E/2L^2S^n} de = 1, \quad (2.45)$$

onde, para valores grandes de L , $de = \Delta E/2L^2S^n \ll 1$ e $e_i = e$ torna-se uma variável contínua. Da Eq. (2.45)

$$P_L(e) = \frac{\mathcal{P}_L(e)}{\Delta E/2L^2S^n}. \quad (2.46)$$

$P_L(\epsilon)$ é facilmente obtida simplesmente considerando $\epsilon = e - e_0$, de modo que $P_L(\epsilon)$ e $P_L(e)$ ficam normalizadas pois $de = d\epsilon$.

A condição de normalização em $P_L(\epsilon)$ implica que

$$\int P_L(\epsilon) d\epsilon = \int bL^u P_L^*(bL^u \epsilon) d\epsilon = \int P_L^*(\epsilon^*) d\epsilon^* = 1 \quad (2.47)$$

o que significa que $P_L^*(\epsilon^*)$, com $\epsilon^* = bL^u \epsilon$ (lembrando que $u = v$), já está normalizada.

As correspondentes variâncias das distribuições denominadas de σ e σ^{*2} estão relacionadas através de

$$\begin{aligned} \sigma^2 &= \int \epsilon^2 P_L(\epsilon) d\epsilon = \int bL^u \epsilon^2 P^*(bL^u \epsilon) d\epsilon \\ &= b^{-2} L^{-2u} \int \epsilon^{*2} P^*(\epsilon^*) d\epsilon^* = b^{-2} L^{-2u} \sigma^{*2}. \end{aligned} \quad (2.48)$$

Se normalizarmos a variância da FDP universal, $\sigma^{*2} = 1$, teremos $bL^u = 1/\sigma$ e

$$P^*(\epsilon/\sigma) = \sigma P_L(\epsilon). \quad (2.49)$$

Fica claro agora o quanto o procedimento acima é conveniente: das simulações de Monte Carlo, podemos medir $P_L(\epsilon)$ e σ e podemos calcular a FDP universal P^* da Eq. (2.49) sem a necessidade do expoente u .

2.6.2 Distribuição da magnetização

A função distribuição de probabilidade do parâmetro de ordem é uma ferramenta poderosa para estudar vários sistemas de interesse, no caso de sistemas magnéticos, a magnetização total M_L^k para cada configuração k em um sistema finito de dimensão linear L é dada por

$$M_L^k = \sum_{i=1}^N S_i. \quad (2.50)$$

Entretanto, como o modelo Baxter-Wu possui três subredes diferentes, além dessa magnetização total, pode-se também medir a magnetização de cada subrede $M_L^{k,j}$, com $j = 1, 2, 3$, i.e.

$$M_L^{k,j} = \sum_{i=1}^{N/3} S_i^j, \quad (2.51)$$

onde a soma em i varre a subrede j .

A probabilidade $P_L(M_i)$ de ter a magnetização M_i na simulação (para $-SN \leq M_i \leq SN$) corresponde ao número de ocorrências de M_i dividido por N_{MCS} , e similarmente para cada sub-rede. Usando essa probabilidade pode-se calcular o valor médio de M_i

$$\langle M_i \rangle = \sum_i M_i P_L(M_i) = \sum_i \sum_{j=1}^3 M_i^j P_L(M_i), \quad (2.52)$$

cujas condições de normalização é dada por,

$$\sum_i P_L(M_i) = 1. \quad (2.53)$$

Reescrevendo essa equação como

$$\sum_i \frac{P_L(M_i)}{\Delta M} \Delta M = 1, \quad (2.54)$$

onde $\Delta M = 1$ é uma variação discreta da magnetização para os modelos BC e BW de spin $S = 1$ e $3/2$ (ocorre o mesmo para o caso $S = 1/2$, mas pode-se ter $\Delta M = 2$ se $\sigma_i = \pm 1$). Definindo $m_i = M_i/SN$, pode-se ter uma série discreta de valores não inteiros $-1 \leq m_i \leq 1$, de modo que a equação acima pode ser escrita como

$$\sum_{m_i=-1}^{m_i=1} \frac{P_L(m_i)}{\Delta M/SN} \frac{\Delta M}{SN} = \sum_{m_i=-1}^{m_i=1} \frac{P_L(m_i)}{\Delta M/SN} dm_i = 1. \quad (2.55)$$

Agora, para um sistema grande, a quantidade $dm_i = \frac{\Delta M}{SN}$ é muito pequena e a magnetização m_i pode ser considerada como uma variável contínua de modo que a soma pode ser substituída por uma integral

$$\int_{-1}^1 P_L(m) dm = 1, \quad (2.56)$$

onde

$$P_L(m) = \frac{P_L(m_i)}{\Delta M/SN}, \quad (2.57)$$

que é a expressão desejada para a distribuição de probabilidade contínua. Para as subredes, temos de fazer $N \rightarrow N/3$ e $m \rightarrow m^j$ nessas expressões.

Essa distribuição de probabilidade satisfaz a relação de escala [68]

$$P_L(m) = bL^{\beta/\nu} P_L^*(bL^{\beta/\nu} m) = bL^{\beta/\nu} P_L^*(m^*), \quad (2.58)$$

onde $m^* = bL^{\beta/\nu} m$. A condição de normalização

$$\int P_L(m) dm = 1 = \int bL^{\beta/\nu} P_L^*(m^*) dm = \int P_L^*(m^*) dm \quad (2.59)$$

implica que $P_L^*(m^*)$ já está normalizada. Por outro lado, a variância é dada por

$$\begin{aligned}\sigma^2 &= \int m^2 P_L(m) dm = \int m^2 P_L^*(m^*) dm^* \\ &= \frac{1}{b^2 L^{2\beta/\nu}} \int m^{*2} P_L^*(m^*) dm^* = \frac{\sigma^{*2}}{b^2 L^{2\beta/\nu}}.\end{aligned}\quad (2.60)$$

Assim, normalizando a variância para $\sigma^{*2} = 1$, teremos $bL^{\beta/\nu} = 1/\sigma$ and $m^* = m/\sigma$ e podemos nos livrar do expoente de escala

$$P_L^*(m/\sigma) = \sigma P_L(m), \quad (2.61)$$

onde m , $P_L(m)$ e σ são medidas nas simulações de MC. Dessa forma, obtemos a função universal normalizada P^* com variância unitária. Similarmente, podemos medir a magnetização, m^j , distribuição de probabilidade, $P_L(m^j)$, e variância, σ^j , para cada sub-rede.

2.6.3 Abordagem de mistura de campos

No processo de obter a FDP universal descrita na seção anterior, estava implícito que o ponto de transição localizava-se em $T = T_c$ e no campo nulo (seja o campo externo ou o campo cristalino nos presentes modelos). Para os hamiltonianos de BC e BW podemos ver que há basicamente dois campos termodinâmicos, a temperatura T e o campo cristalino Δ . Assim, de acordo com as ideias de renormalização, os campos de escala naturais devem ser

$$t = T - T_c, \quad (2.62)$$

$$d = \Delta - \Delta_c. \quad (2.63)$$

Entretanto, a temperatura de transição é uma função do campo cristalino, $T_c = T_c(\Delta)$ ou, da mesma forma, $\Delta_c = \Delta_c(T)$, o que torna essa linha de transição não simétrica no plano do diagrama T versus Δ , no sentido de não ser paralelo a nenhum dos eixos dos campos. Como foi proposto por Rehr e Mermin [87], no contexto do ponto crítico do fluido, campos mais apropriados podem ser considerados onde a assimetria está presente. Isso é feito definindo novas direções de mistura de campos τ e δ dados por (embora δ já tenha sido utilizado acima para o expoente crítico do campo, vamos usar a mesma notação para uma das direções dos campos de escala misturados - para maiores detalhes veja Ref. [68])

$$\tau = (T - T_c) - s(\Delta - \Delta_c), \quad (2.64)$$

$$\delta = (\Delta - \Delta_c) + r(T - T_c), \quad (2.65)$$

onde s e r são constantes que medem o grau da mistura de campos ($s = r = 0$ leva ao caso simétrico $\tau = t$ e $\delta = d$). Um esquema é apresentado na Figura 2.1. Para maior clareza, somente a linha de primeira ordem, com o ponto crítico do tipo que ocorre em fluidos, está representada. Na presença de uma linha de segunda ordem adicional, esse ponto torna-se multicrítico. Nesse caso tem-se $r = \tan \psi$ e $s = \tanh \theta$.

Os operadores de escala conjugados $\mathcal{E}$ e $\mathcal{Q}$ dos novos campos τ e δ , respectivamente, podem ser obtidos da função de partição dos modelos considerados e das Eqs. (2.64) e (2.65). Os mesmos são dados por [68]

$$\mathcal{Q} = \frac{1}{1 + rs}(Q + sU), \quad (2.66)$$

$$\mathcal{E} = \frac{1}{1 + rs}(U - rQ), \quad (2.67)$$

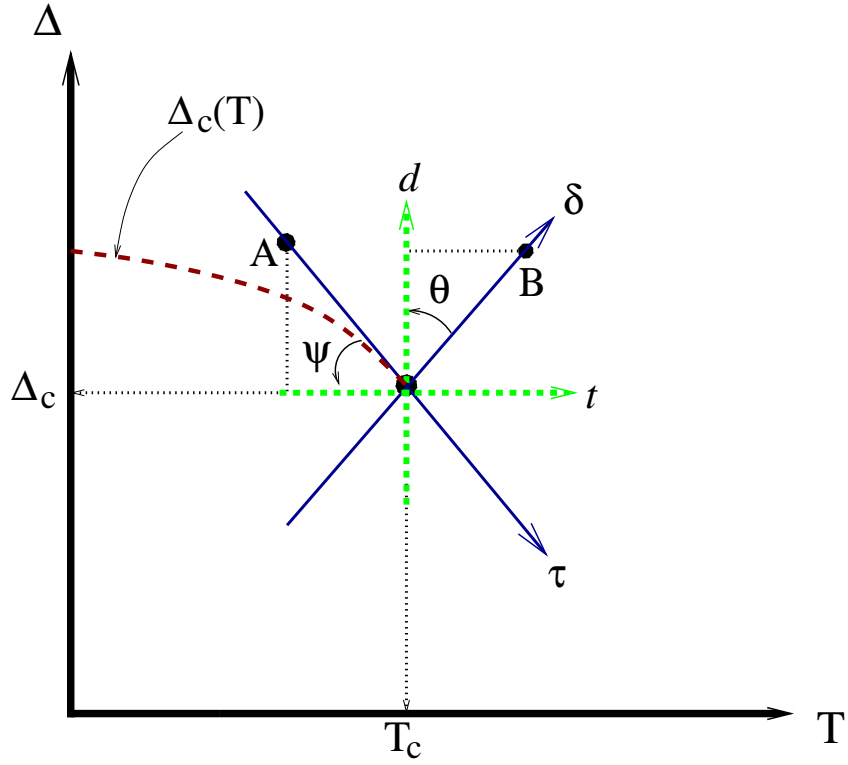


Fig. 2.1: Esquema de linha de transição de primeira ordem $\Delta(T)$ em função de T . O ponto (T_c, Δ_c) é crítico ou, em geral, multictítico, quando se tem uma transição de segunda ordem adicional. t e d são os campos naturais (2.62) e (2.63), e τ e η são as direções dos campos misturados (2.64) e (2.65). Todos os pontos ao longo da direção τ , como A , possuem $\eta = 0$, enquanto pontos como B possuem $\tau = 0$. Figura adaptada de [68].

onde U e Q são os operadores de escala não conjugados dos campos não misturados t e d , respectivamente,

$$U = \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j \quad (\text{BC}), \quad U = \sum_{\langle ijk \rangle} \sigma_i \sigma_j \sigma_k \quad (\text{BW}), \quad Q = \sum_{i=1}^N \sigma_i^2. \quad (2.68)$$

Estamos aqui aplicando o método tendo em vista os modelos BC e BW, entretanto o mesmo pode ser estendido a qualquer modelo com variáveis apropriadas U e Q .

É necessário agora conhecer a distribuição de probabilidade conjunta $P(\mathcal{E}, \mathcal{Q})$, porque é da relação de escala dessa função que pode-se obter a FDP universal desejada levando em consideração os efeitos de mistura de campos [63, 64]. Entretanto, o que temos das simulações de MC dos modelos estudados é a distribuição de probabilidade conjunta $\mathcal{P}_L(U, Q)$ (na verdade, temos valores discretos U_i e Q_i , mas vamos descartar os subíndices para tornar a notação mais fácil). Assim, das Eqs. (2.66), (2.67) e (2.68) teremos

$$\mathcal{P}_L(U, Q) = \frac{1}{1 - r_s} P_L(\mathcal{E}, \mathcal{Q}), \quad (2.69)$$

que fornece uma relação entre as duas funções distribuição de probabilidade.

Uma integração da função $P(\mathcal{E}, \mathcal{Q})$ sobre a variável $\mathcal{E}$ resultará na FDP $P_L(\mathcal{Q})$, que é a FDP apropriada para o presente caso, uma vez que $\mathcal{Q}$ é o operador de escala conjugado do campo δ . Prosseguindo de forma similar ao que foi feito nas subseções anteriores, assumimos o seguinte comportamento de escala

$$P_L(\mathcal{Q}) = b_{\mathcal{D}} L^{y_{\mathcal{Q}}} P^*(b_{\mathcal{Q}} L^{y_{\mathcal{D}}} \mathcal{Q}), \quad (2.70)$$

onde $b_{\mathcal{Q}}$ é outra constante métrica não universal e $y_{\mathcal{Q}}$ é o expoente próprio do operador conjugado $\mathcal{Q}$. Normalizando agora a variância de P^* e usando as Eqs. (2.66), (2.67) e (2.69) chegamos no seguinte resultado (para maiores detalhes veja a Ref. [68])

$$P_L^*[(Q + sU)/\sigma] = \sigma P_L(\mathcal{Q}), \quad (2.71)$$

onde $P_L(\mathcal{Q})$ é exatamente o mesmo que $P_L(U, Q)$ e σ é sua variância.

Note que o resultado final para a FDP universal P^* é independente da variável extensiva $\mathcal{E}$, do pré-fator $1/(1 - rs)$, e do expoente do operador conjugado $y_{\mathcal{Q}}$. É independente também de r porque esse parâmetro está apenas relacionado à inclinação da linha de transição conhecida. A Eq. (2.71) tem, entretanto, um grau de liberdade extra, transmitido pelo parâmetro s , que advém do fato de não exigir que ambos os campos de mistura sejam ortogonais um ao outro. Adicionalmente, uma vez que o valor médio $\langle Q + sU \rangle$ é diferente de zero podemos também transladar essa variável para $Q + sU - \langle Q + sU \rangle$.

3 Modelo Blume-Capel

Como já foi mencionado na Introdução, a aplicação do presente método ao modelo BC, embora seja original, pode ser visto também como um teste para a eficácia das simulações a um sistema bem definido quanto ao seu comportamento crítico. Estaremos interessados, principalmente, em como o uso dos zeros DPE e as distribuições de probabilidade universais da energia e magnetização são capazes de descrever, de maneira apropriada, as temperaturas de transição esperadas, assim como a classe de universalidade desse modelo.

Um outro ponto interessante é a possibilidade de se determinar o ponto tricrítico através do comportamento da linha de segunda ordem. Em estudos anteriores, utilizando-se simulações de MC, misturas de campos foram realizadas ao longo da transição de primeira ordem e, posteriormente, o ponto tricrítico foi determinado no modelo com spin $S = 1$ [65]. Em nosso caso veremos que: (i) a mistura de campos pode ser também realizada ao longo da linha de segunda ordem e; (ii) o uso das funções de distribuições de probabilidade, nesse caso, determinam o ponto tricrítico com precisão razoável e comparável com resultados obtidos na literatura. Por outro lado, no caso do spin $S = 3/2$, o ponto crítico terminal duplo foi obtido somente pelas distribuições de probabilidades universais, uma vez que não se tem uma linha de segunda ordem nessa região.

3.1 Simulações de Monte Carlo

As simulações de MC foram realizadas usando o algoritmo de Metropolis em redes de tamanho linear L com condições de contorno periódicas. O número de passos de Monte Carlo (N_{MCS}) para a termalização e para calcular os valores médios das quantidades termodinâmicas dependem do valor do spin S , do tamanho L da rede, da abordagem utilizada (sejam os zeros da distribuição de probabilidade da energia ou a FDP universal), assim como dos valores do campo cristalino Δ .

Os zeros mais relevantes da distribuição de probabilidade de energia foram calculados usando redes de tamanho linear $L = 16, 25, 32, 48, 64, 80, 100, 128$. No processo de termalização, os primeiros $N_{term} = 10^5$ MCS foram descartados para $L \leq 32$, e $N_{term} = 3 \times 10^5$ MCS para as redes maiores. Os histogramas foram obtidos com um total de $N_{MCS} = 10^8$ MCS, e as correspondentes raízes complexas foram calculadas por meio da biblioteca científica GLS-GNU *Scientific Library* [88]. Notamos que em altos campos cristalinos, os histogramas tendem a apresentar picos com diferentes alturas, principalmente nas redes maiores. Então, com o intuito de obter temperaturas e expoentes críticos mais precisos, aumentamos o número de passos de Monte Carlo gradativamente. Para spin $S = 1$ e $\Delta \geq 1,965$ assim como $S = 3/2$ e $\Delta \geq 1,986$, usamos $N_{MCS} = 2 \times 10^8$ para redes $L \leq 32$, $N_{MCS} = 4 \times 10^8$ para redes 48 e 64 e $N_{MCS} = 8 \times 10^8$ para $L \geq 80$. O critério para interromper o processo de iteração e obter a temperatura da pseudo-transição T_c^L foi escolhido de tal forma que $T_0^{j+1} - T_0^j \leq \mu$, com $\mu = 10^{-4}$. Um resultado equivalente é obtido considerando $|\Re(x_c^L) - 1| \leq \mu$.

Para calcular as barras de erros, foram utilizadas dez simulações independentes de $N_{MCS} = 8 \times 10^8$ com a mesma termalização descrita anteriormente. Os erros foram obtidos a partir do desvio padrão dividido pela raiz quadrada do número de amostras, que neste caso são as dez simulações. Esse procedimento foi realizado no modelo Ising

e no modelo Blume-Capel em $\Delta = -1$. Em ambos modelos os erros calculados ficaram bem pequenos, no caso BC os erros não se alteram significativamente ao longo da linha de transição de segunda ordem e ficam sempre menores que os símbolos usados nos gráficos. Próximo dos pontos multicríticos as barras de erros ficaram maiores, mas permanecem menores que os símbolos usados.

As funções de distribuições de probabilidade universais foram, por sua vez, calculadas nas correspondentes temperaturas de transição utilizando-se as redes maiores com $N_{MCS} = 12 \times 10^8$ após a termalização. Adicionalmente, a técnica de repesagem de histograma simples foi utilizada para se obter as distribuições de probabilidade próximo à temperatura estimada [89].

3.2 Resultados para o expoente crítico ν e temperatura crítica T_c utilizando-se os zeros DPE

A Fig. 3.1 mostra, como um exemplo característico, a distribuição dos zeros DPE no plano complexo para o modelo BC com campo cristalino $\Delta = 0$ na temperatura da pseudo-transição de fase T_c^L . Os gráficos superiores referem-se ao spin $S = 1$ com $L = 80$, enquanto os inferiores correspondem a $S = 3/2$ com $L = 100$. Os gráficos da direita mostram uma ampliação em torno da região do zero dominante. Como pode-se notar, a parte imaginária da raiz dominante $\Im(x_c^L)$ está de fato próxima de zero e sua parte real $\Re(x_c^L)$ próxima de um. Para cada valor de spin S , os mesmos padrões das distribuições dos zeros DPE, ilustrados na Fig. 3.1, são obtidos, não apenas para diferentes tamanhos de redes (com o número de raízes aumentando rapidamente com L) mas também para vários valores de campo cristalino Δ ao longo da linha de segunda ordem.

É possível, dessa forma, obter as temperaturas da pseudo-transição para cada rede finita T_c^L , bem como os respectivos zeros dominantes x_c^L .

O gráfico log-log da parte imaginária $\Im(x_c^L)$ como função do tamanho da rede L , para o modelo BC, está representado na Fig. 3.2 para o spin $S = 1$ e $S = 3/2$ com diferentes valores de campos cristalinos. Para uma comparação, o resultado do spin $S = 1/2$, que equivale ao modelo Ising, também está presente. As linhas, de diferentes formatos e explicitadas na própria figura, são ajustes lineares da Eq. (2.40), com a magnitude da inclinação dando $1/\nu$. É interessante perceber que todas as linhas são praticamente paralelas entre si e ao ajuste do Ising, significando que tem o mesmo expoente $1/\nu$. Os valores numéricos assim obtidos encontram-se na Tabela 3.1 e concordam com a classe de universalidade do modelo Ising conforme o campo cristalino se altera ao longo da linha de transição de segunda ordem. Isso vale para ambos valores de spin S , como esperado. As linhas sombreadas nessa tabela correspondem a transições de primeira ordem e serão discutidas, com mais detalhes, na próxima seção.

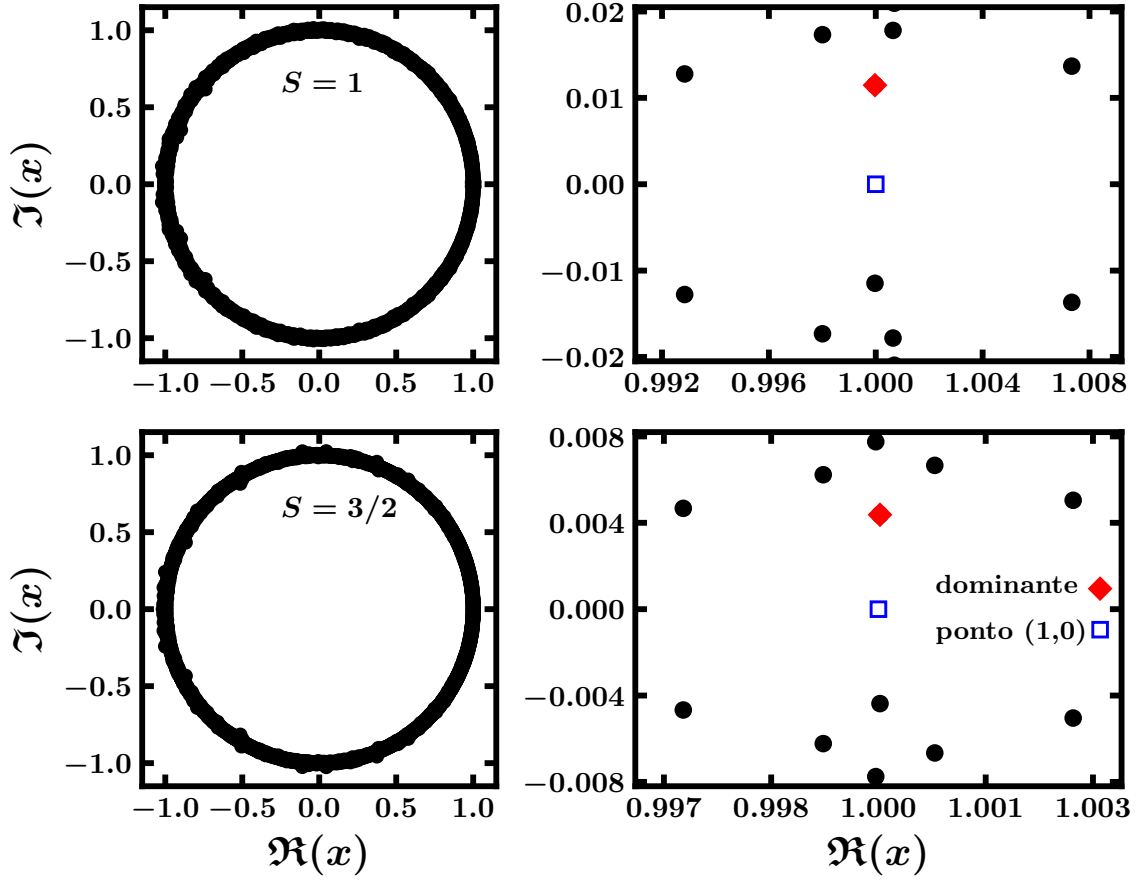


Fig. 3.1: Distribuição dos zeros DPE no plano complexo para o modelo BC com $\Delta = 0$ na temperatura T_c^L . As figuras de cima correspondem ao spin $S = 1$ usando $L = 80$ enquanto as de baixo referem-se ao spin $S = 3/2$ usando $L = 100$. Os gráficos da direita mostram a região próxima do zero dominante, que está indicado por um símbolo de diamante, sendo o quadrado aberto o ponto de referência $(1,0)$ do limite termodinâmico.

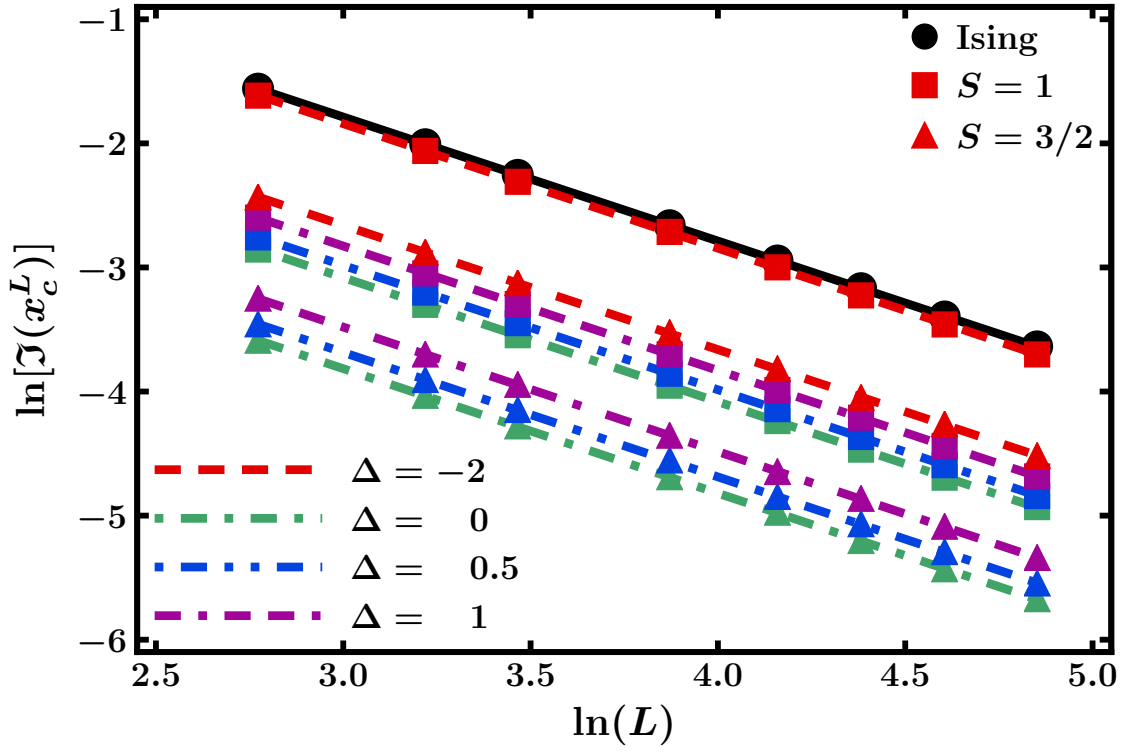


Fig. 3.2: Log-log da parte imaginária $\Im(x_c^L)$ em função de L para o modelo BC com spin $S = 1$ (quadrados) e $S = 3/2$ (triângulos). Para comparação, o resultado para o spin $S = 1/2$, modelo Ising, é também mostrado (círculos). Em ambos casos $S = 1$ e $S = 3/2$ ocorrem: linhas tracejadas para $\Delta = -2$; linhas tracejadas-pontilhadas para $\Delta = 0$; linhas tracejadas-pontilhadas-pontilhadas para $\Delta = 0,5$; e linhas tracejadas-tracejadas-pontilhadas para $\Delta = 1$.

Tab. 3.1: Temperatura de transição, T_c , e inverso do expoente crítico do comprimento de correlação, $1/\nu$, do modelo Ising e Blume-Capel com spins $S = 1$ e $S = 3/2$, para diversos valores de campo cristalino Δ , obtidos das presentes simulações usando os zeros da distribuição de probabilidade da energia. A primeira e a segunda linha correspondem ao resultado exato e ao numérico obtido com os zeros EPD, respectivamente, para o modelo Ising. Para comparação, também estão listados, na quinta e sexta colunas, alguns resultados da temperatura de transição provenientes de trabalhos prévios como expansão em séries [90], invariância conforme [24, 45], e Monte Carlo [25] (neste último, somente para a região de primeira ordem do spin $S = 3/2$). Linhas sombreadas correspondem a possíveis transições de primeira ordem, sendo a vermelha a localização do ponto tricrítico para $S = 1$ e crítico terminal duplo para $S = 3/2$.

Δ	T_c	$T_c(L \geq 24)$	$T_c(L \geq 30)$	T_c^{ES}	T_c^{IC}/T_c^{MC}	$1/\nu$
Ising						
$-\infty$	2,26918...					1,0
$-\infty$	2,2691(1)					0,999(1)
$S = 1$						
-2	1,9996(3)	2,0017(3)	2,0013(3)			1,001(2)
0	1,6937(1)	1,6939(1)	1,6938(1)	1,69378(4)	1,693(3)	1,001(2)
0,5	1,5659(2)	1,5663(1)	1,5662(1)	1,5664(1)	1,564(3)	1,002(2)
1	1,3973(2)	1,3979(1)	1,3977(1)	1,3986(1)	1,398(2)	1,005(2)
1,5	1,1503(2)	1,1514(3)	1,1511(2)	1,1467(1)	1,151(1)	1,009(1)
1,9	0,7650(2)			0,766(1)	0,769(1)	1,023(2)
1,95	0,6575(3)			0,656(4)	0,659(2)	1,034(2)
1,96	0,6281(3)					1,28(2)
1,965	0,6118(2)					1,722(5)
1,966	0,6080(2)					1,809(7)
1,967	0,6043(2)					1,88(1)
1,968	0,6011(3)					1,92(1)
1,969	0,597(2)					1,98(1)
1,970	0,593(3)					2,00(2)
1,972	0,585(3)					2,00(3)
$S = 3/2$						
-2	4,1187(3)	4,1187(2)	4,1187(2)			1,002(2)
0	3,2882(2)	3,2886(1)	3,28846(6)		3,287(2)	1,004(2)
0,5	2,9722(4)	2,9728(2)	2,9727(2)		2,972(3)	1,003(2)
1	2,5733(5)	2,5742(2)	2,5740(3)			1,004(2)
1,5	2,0181(2)	2,0197(4)	2,0192(3)			1,007(2)
1,9	1,2047(1)					1,018(4)
1,95	0,9855(1)					1,043(3)
1,986	0,5989(3)				0,5996(9)	1,711(8)
1,987	0,5886(6)				0,5892(6)	1,971(5)
1,988	0,5797(5)				0,5781(10)	1,982(4)
2	0,621(6)				0,64(7)	1,07(1)
2,5	0,570(2)					1,00(2)
3	0,567(2)					1,00(2)

Com o expoente crítico do comprimento de correlação em mãos, podemos utilizar a Eq. (2.35) para calcular a temperatura de transição T_c no limite termodinâmico. Resultados típicos estão mostrados na Fig. 3.3 para $\Delta = 0$ e $\Delta = 1$, em ambos valores de spin S (acima para $S = 1$ e abaixo para $S = 3/2$). Em cada gráfico existe, de fato, três diferentes ajustes: dois ajustes lineares, assumindo $A' = 0$ e $1/\nu$ da Tabela 3.1, com um ajuste linear usando $L \geq 25$ e outro usando $L \geq 32$; e um ajuste não linear extra com todas as redes, levando em consideração a correção de escala com o valor exato $w = 2$ para a classe de universalidade do modelo Ising. Percebe-se que aumentando os valores de Δ positivo, os dados da temperatura se desviam de linha reta e, como não temos uma forma de medir o expoente de correção de escala, adotamos o seu valor exato. No entanto, todos os resultados para T_c obtidos dos três procedimentos são comparáveis entre si. Nessa tabela temos também alguns resultados obtidos anteriormente por expansões em series [90], invariância conforme [24, 45], e simulações de Monte Carlo [25] (neste último caso somente para a linha de primeira ordem com $S = 3/2$). Uma comparação numérica mostra que a maioria dos resultados obtidos por zeros de DPE, tanto para transições de primeira como segunda ordens, concorda, dentro das barras de erros, com esses valores disponíveis.

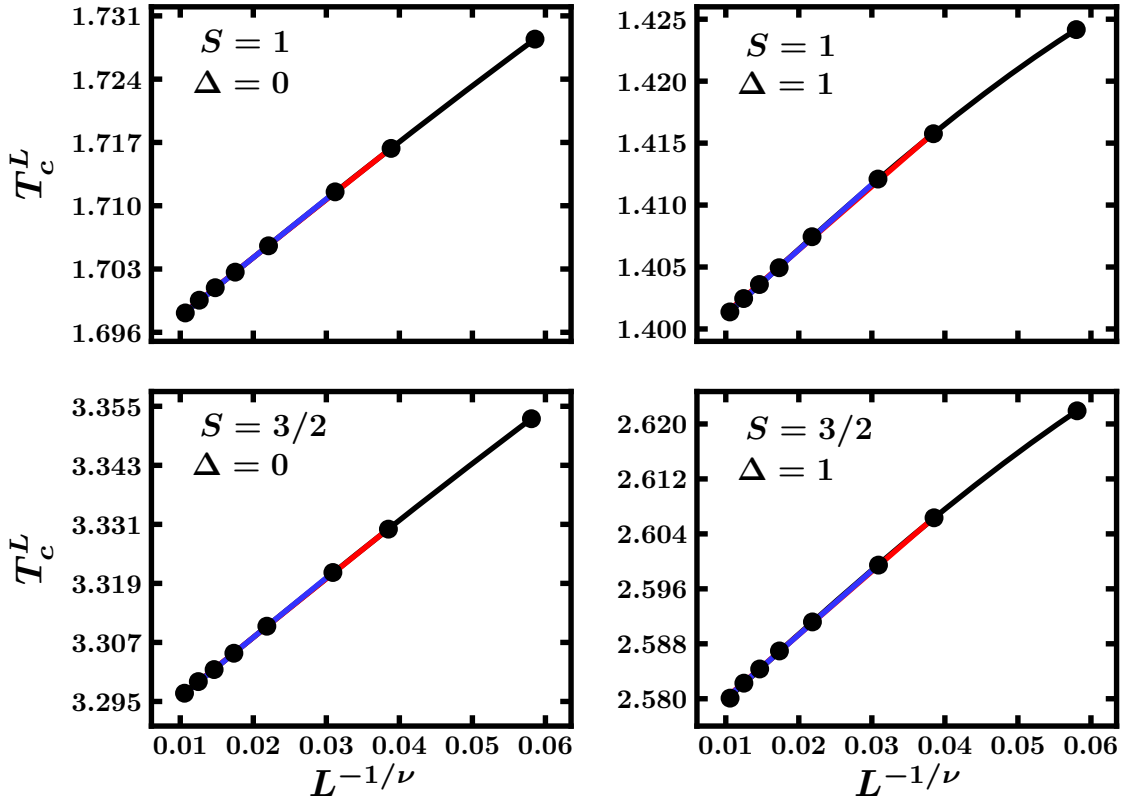


Fig. 3.3: Temperatura da pseudo-transição, T_c^L , em função do tamanho da rede, $L^{-1/\nu}$, com o expoente crítico dado na Tabela 3.1, para o modelo BC de spin $S = 1$ (gráficos superiores) e $S = 3/2$ (gráficos inferiores). Os gráficos da esquerda são para o campo cristalino $\Delta = 0$ e os da direita para $\Delta = 1$. Em cada gráfico existem três linhas praticamente superpostas, cada uma correspondendo aos três diferentes ajustes descritos no texto.

Na Tabela 3.1, a ausência de ajustes lineares com $L \geq 25$ e $L \geq 32$ para valores de $\Delta \geq 1,9$ é devido ao fato dos dados da temperatura se desviarem muito de uma linha reta para as redes menores. Isso pode ser visto, claramente, na Fig. 3.4 para spin $S = 1$

e $S = 3/2$ com $\Delta = 1, 9$ para ambos spins.

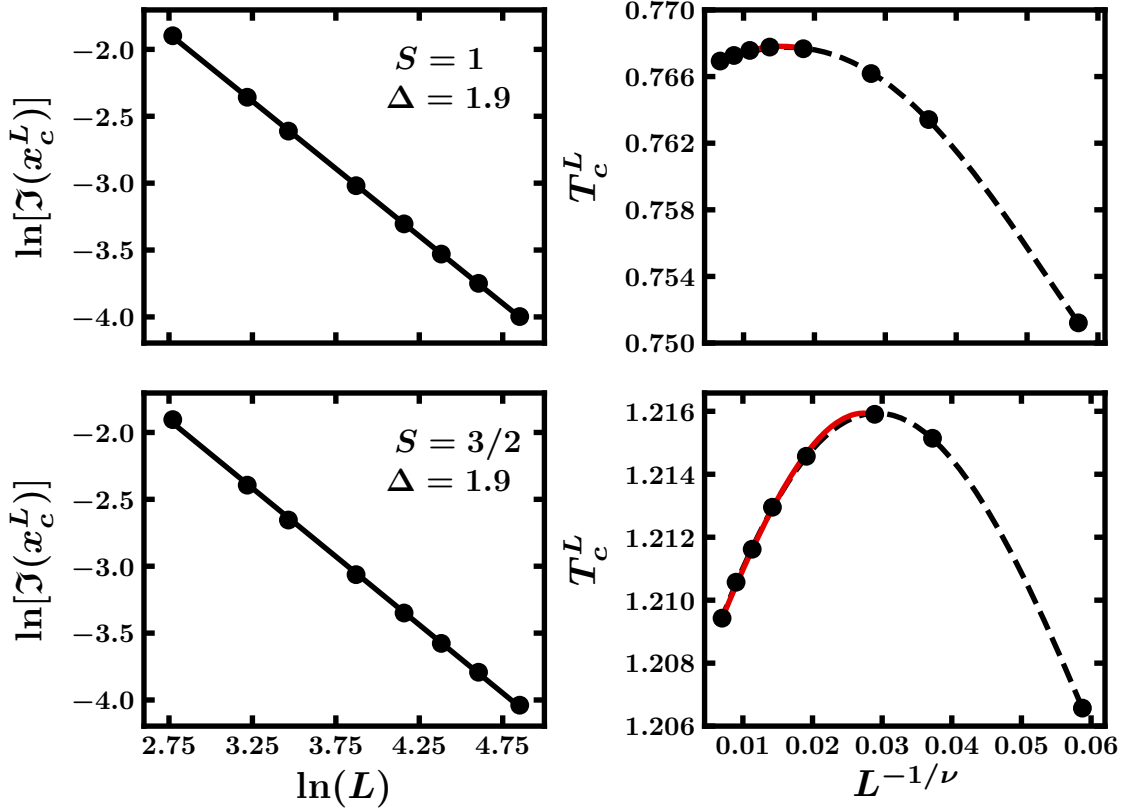


Fig. 3.4: Log-log da parte imaginária, $\Im(x_c^L)$, em função de L , gráficos da esquerda, e temperatura da pseudo-transição, T_c^L , em função do tamanho da rede, $L^{-1/\nu}$, gráficos da direita, para o modelo BC. Os gráficos superiores são para o spin $S = 1$ e os inferiores para o spin $S = 3/2$, ambos no campo cristalino $\Delta = 1, 9$. Nos gráficos da esquerda temos ajustes lineares, enquanto no da direita existem dois ajustes não lineares utilizando a Eq. (3.1), a linha tracejada e a linha contínua com $A'' \neq 0$ and $A'' = 0$, respectivamente.

Embora o comportamento do expoente crítico $1/\nu$ com o tamanho da rede siga ainda uma tendência linear, como visto nos gráficos da esquerda da Fig. 3.4, o mesmo não ocorre com a temperatura. Isso evidencia que as correções de escala na temperatura tornam-se mais importantes à medida que o sistema se aproxima do ponto multicrítico no caso $S = 1$, ou do ponto de inflexão da curva da transição de segunda ordem no caso $S = 3/2$. Além do mais, um ajuste razoável com a equação (2.35) só é possível com $L \geq 48$, para spin $S = 1$, e com $L \geq 32$, para spin $S = 3/2$, utilizando-se o expoente $\omega = 2$. Correções de escala de ordem mais elevadas são necessárias para o comportamento com todas redes utilizadas. Nesse último caso, foi necessário acrescentar um termo de maior ordem na Eq. (2.35), de modo que

$$T_c^L = T_c + AL^{-1/\nu}(1 + A'L^{-w} + A''L^{-w'}), \quad (3.1)$$

onde A'' é uma outra constante não universal e w' é um coeficiente de correção de escala de ordem mais elevada. Como estamos usando o valor exato $w = 2$ para correção de primeira ordem, usamos $w' = 3$ para a correção da próxima ordem, já que temos uma expansão em série da Eq. (2.34). Dessa forma, todos os resultados para a temperatura de transição com $\Delta \geq 1, 9$ foram obtidos com o uso da equação acima.

Devemos salientar que a tendência linear presente nos gráficos da esquerda na Fig. 3.4 é somente visual, pois o valor do expoente crítico $1/\nu$ sofre também variações sensíveis ao se desprezar, sistematicamente, as redes menores. Por isso, os valores de $1/\nu$ da Tabela 3.1 foram obtidos para redes $L \geq 48$ em campos cristalinos $\Delta \geq 1,9$. Esses valores de expoentes críticos mais precisos foram então utilizados nos ajustes para obter a temperatura crítica. Curiosamente, para $\Delta > 2$ e spin $S = 3/2$, o valor de $1/\nu$ não se altera consideravelmente com o tamanho da rede ao longo da linha de segunda ordem.

Nota-se, claramente, na Tabela 3.1 que o expoente $1/\nu$ tem um ligeiro aumento de valor a medida que o campo cristalino aumenta em direção ao ponto tricrítico para $S = 1$ e na linha de primeira ordem para $S = 3/2$, aumento esse tanto mais acentuado quanto mais próximo do ponto multicrítico. Uma análise mais cuidadosa deve ser feita para se saber se esse comportamento significa uma mudança de universalidade real ou simplesmente efeitos de tamanho finito ainda presentes nas redes utilizadas. As distribuições de probabilidades universais podem ser de grande utilidade na elucidação dessa questão.

3.3 Distribuição de probabilidade universal do modelo Blume-Capel

Naturalmente, o conhecimento de apenas um expoente crítico não determina exclusivamente a classe de universalidade do modelo com o qual se está lidando. Na verdade, considerando-se as relações de escala apresentadas no capítulo anterior é preciso conhecer ao menos dois expoentes para obter o comportamento crítico de todo o conjunto. No entanto, a função distribuição de probabilidade por si só pode fornecer a impressão digital do comportamento universal do sistema. Na Fig. 3.5 apresentamos as distribuições de probabilidade da energia e magnetização para spins $S = 1$ e $S = 3/2$, em $\Delta = 0$, $\Delta = 0,5$ e $\Delta = 1$, todas nas temperaturas críticas avaliadas, em comparação com a distribuição obtida para o modelo Ising de spin $S = 1/2$. Em todos os casos, usamos redes de tamanho $L = 128$. No entanto, na escala da Fig. 3.5, os resultados para as redes menores $L = 80$ e 100 parecem sobrepostos, principalmente para as distribuições de energia, mostrando que o regime de redes grandes foi atingido.

Como fica evidente em todos os casos considerados na Figura 3.5, as distribuições de energia convergem para a função universal do Ising, como esperado. Nessa Figura, e nas seguintes, o colapso e quantidade dos dados tornam indistinguíveis os diferentes formatos dos pontos usados nas FDPs para diferentes valores de spin e campos cristalinos. Embora o mesmo ocorra para a função distribuição da magnetização, alguma flutuação pode ser notada em torno dos dois picos simétricos. Essa é uma tendência do algoritmo de Metropolis que, em vez de alternar entre valores positivos e negativos da magnetização, o algoritmo gasta mais tempo em um lado da magnetização para redes suficientemente grandes. Naturalmente, esse problema pode ser contornado usando algoritmos híbridos, como Metropolis aliado com o algoritmo de Wolff, que mostrou melhorar efetivamente as simulações no modelo BC [91]. No entanto, manteremos aqui apenas o algoritmo de Metropolis como forma de comparar com o que foi feito no modelo Baxter-Wu da próxima seção, onde não há ainda um algoritmo híbrido eficiente o suficiente para analisar seu comportamento crítico. Contudo, mesmo usando apenas o algoritmo de Metropolis, pode-se notar que a distribuição de probabilidade da energia é mais robusta em fornecer o comportamento universal do modelo BC. Isso significa que a distribuição de probabilidade da energia pode ser realmente uma quantidade mais adequada para analisar o compor-

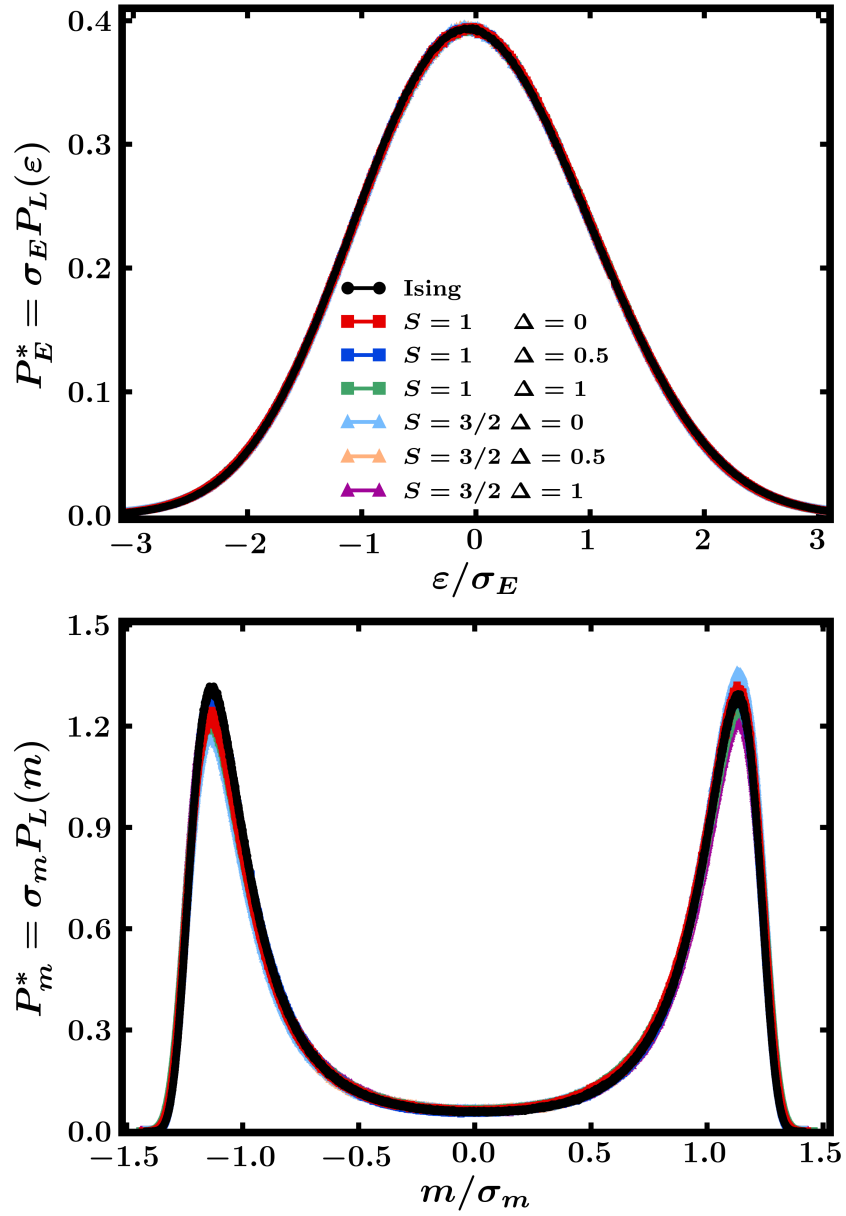


Fig. 3.5: Distribuição de probabilidade universal da energia (gráfico superior) e magnetização (gráfico inferior) do modelo Blume-Capel usando o tamanho de rede $L = 128$. As distribuições são do spin $S = 1$ (quadrados) e $S = 3/2$ (triângulos) e três valores de campos cristalinos $\Delta = 0$, $\Delta = 0,5$ e $\Delta = 1$. Para comparação, a distribuição do modelo Ising também está sendo mostrada (círculos). A legenda do gráfico superior também se aplica ao inferior.

tamento universal de sistemas críticos, e vem sendo, de certa forma, sub-utilizada na literatura. Por essa razão, a seguir, iremos considerar somente a distribuição da energia para caracterizar a classe de universalidade dos modelos.

Para valores negativos de campo cristalino, os mesmos padrões da Figura 3.5 são obtidos para ambos valores de spin. Para valores maiores de Δ , o mesmo padrão é também alcançado, porém somente até valores próximos do ponto tricrítico no caso do modelo BC de spin $S = 1$, e na região de transição de primeira ordem no caso de spin $S = 3/2$, onde fortes efeitos de tamanho finito começam a ocorrer e faz-se necessário uma análise ainda mais cuidadosa. Da Tabela 3.1 pode-se notar que nessa região o valor do expoente crítico do comprimento de correlação tende a se desviar daquele do modelo Ising, indo em direção ao valor 2, característico de transições de primeira ordem.

O gráfico superior da Figura 3.6 mostra o que ocorre para spin $S = 1$ e dois valores de campos cristalinos bem próximos. Enquanto para $\Delta = 1,95$ uma concordância razoável é ainda obtida, um ombro na distribuição aparece para $\Delta = 1,96$, mesmo alterando seu perfil próximo da temperatura crítica por meio da repesagem de histograma simples (como não temos a temperatura de transição exata, foi feita uma variação $\Delta T = -4 \times 10^{-4}$ para igualar sua altura à distribuição do modelo Ising). Mesmo assim, a FDP já está bem diferente daquela do modelo Ising e permanece assim para valores $\Delta > 1,96$.

O mesmo acontece para spin $S = 3/2$ e $\Delta = 1,95$, como pode ser visto do gráfico intermediário da Figura 3.6. Porém, para campos $\Delta = 1,986$ e maiores, a FDP torna-se bem mais diferente da padrão de Ising. Como veremos na próxima seção, essa é realmente um região de transição de primeira ordem, o que de certa forma justifica o aparecimento de dois picos na FDP da energia. Para $\Delta \geq 2$ e $S = 3/2$, o sistema volta a apresentar característica de transições de fase de segunda ordem. Como indicado na Fig. 3.6, gráficos inferiores, embora exista uma pequena diferença entre as PDFs para $\Delta = 2$, em $\Delta = 2,5$ e $\Delta = 3$ é inegável que os modelos tem a mesma classe de universalidade.

Ainda com relação a região com $\Delta \geq 2$ para spin $S = 3/2$ é preciso escolher, como descrito na seção 2.5, uma temperatura inicial como sendo a mais próxima possível da temperatura da pseudo-transição de fase da rede. Isso porque se a temperatura estiver muito acima daquela da pseudo-transição de fase, o sistema não vai convergir para a temperatura correta. Por exemplo, em $\Delta = 2,5$, a temperatura da pseudo-transição de fase para a rede $L = 25$ é de $T = 0,5794$. Verificamos, entretanto, que qualquer simulação realizada em temperaturas $T > 0,8$ não converge para a temperatura crítica dessa rede e, na verdade, a temperatura sempre tende a aumentar. Esse efeito é novamente devido ao fato de o algoritmo de Metropolis ficar preso em alguns estados a ponto de as distribuições da magnetização apresentarem um único pico (espera-se que essas distribuições mostrem dois picos simétricos). Isso ocorre mesmo para redes não muito grandes com altos valores de campo cristalino. Então, uma forma de melhor estimar a temperatura inicial nessa região consiste em realizar várias simulações em temperaturas diferentes até obter uma cuja distribuição da magnetização apresente dois picos.

No geral, os resultados acima sugerem que a partir de $\Delta = 1,96$ para $S = 1$ e $\Delta = 1,986$ para $S = 3/2$, a universalidade do modelo Blume-Capel torna-se diferente daquela do modelo Ising, podendo ainda mudar o caráter da transição. Entretanto, uma análise de mistura de campos ainda faz-se necessária nessa região antes de uma conclusão prematura de não universalidade no modelo.

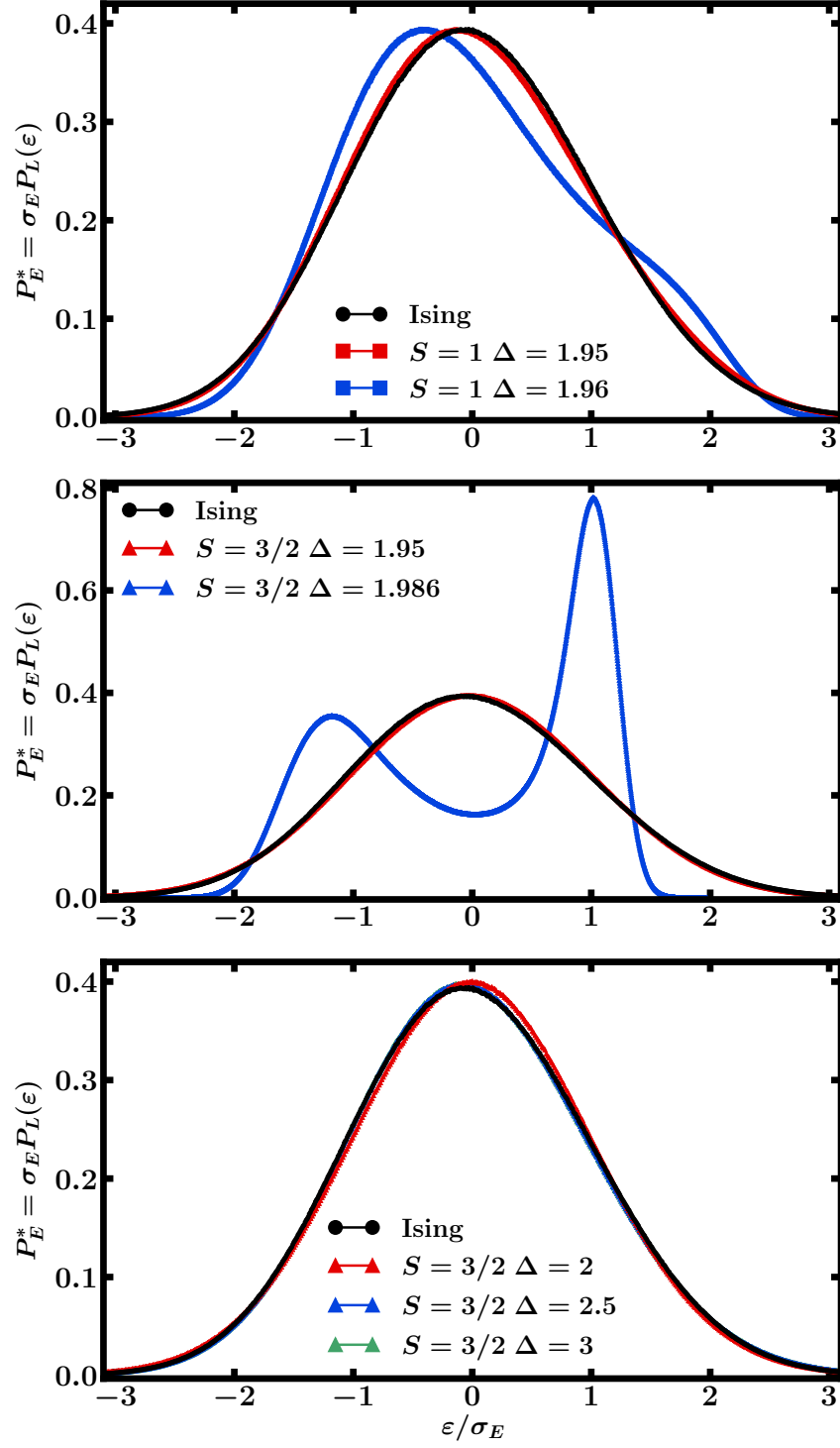


Fig. 3.6: Distribuição de probabilidade universal da energia do modelo Blume-Capel de spin $S = 1$ (quadrados) em $\Delta = 1,95$ e $\Delta = 1,96$, gráficos superiores, e de spin $S = 3/2$ (triângulos) para $\Delta \geq 1,95$, gráficos central e inferior, para a rede $L = 128$. A distribuição do spin $S = 1$ em $\Delta = 1,96$ sofreu uma pequena variação da temperatura crítica obtida de $\Delta T = -4 \times 10^{-4}$ para igualar sua altura à do modelo Ising (círculos).

3.4 Mistura de campos no modelo Blume-Capel

A subseção anterior, referente ao caso simétrico, mostrou que as FDPs para o modelo BC de spin $S = 1$ e $S = 3/2$ se desviam, em altos valores de campos cristalinos, do esperado comportamento universal presente no modelo Ising. No entanto, não está evidente se isso é consequência de efeitos de tamanho finito, ou trata-se de uma mudança da classe de universalidade do modelo. Aqui, o caso simétrico significa que a linha de transição é paralela a um dos eixos termodinâmicos, o que definitivamente não é o caso para altos valores de campo cristalino, como pode ser nitidamente notado nos diagramas de fase esquemáticos das Figs. 1.4 e 1.5. Por essa razão, implementamos a abordagem de mistura de campos para entender melhor as características da transição nessa região.

Como discutido na seção 2.6.3, a escolha natural para um dos novos campos de escala é a direção tangente à linha de transição. Como não há necessidade do outro campo ser perpendicular, pode-se escolher a direção do segundo como aquela que minimiza as correspondentes correções de escala. Essa escolha otimizada reflete-se no parâmetro de mistura extra s .

Como foi constatado na seção anterior, em baixos valores de campos cristalinos, foi possível descrever adequadamente a classe de universalidade do modelo Blume-Capel por meio das FDPs da energia e magnetização. Por isso, vamos descrever os resultados da mistura de campos em altos valores de campo cristalino, especialmente onde as correções de escala tornam-se mais importantes. Aqui, vamos utilizar as mesmas redes da seção anterior para obter as distribuições de probabilidade, ou seja, aquelas que já estão no limite de L grande. Portanto, os resultados da abordagem de mistura de campos desta seção estão todos no limite termodinâmico.

3.4.1 BC spin $S = 1$

Apresentamos, na Figura 3.7, as distribuições de probabilidade das duas variáveis extensivas conjugadas em vários valores de campos cristalinos para o modelo Blume-Capel de spin $S = 1$, comparadas com a FDP da energia do modelo Ising. Para $\Delta = 1, 9$, Figura 3.7 superior, existe um amplo intervalo de valores possíveis de s e r , a saber $0,55 < s < 5$ e $-2 < r < 5$, em que as distribuições coincidem com aquela do modelo Ising. Para $s < 0,55$ e $r < -2$ as distribuições não convergem para a do modelo Ising, já para $(r, s) \geq 5$ as distribuições tornam-se cada vez mais ruidosas. Convém salientar que as distribuições da Figura 3.7 são para os dois operadores de escala conjugados $\mathcal{E}$ e $\mathcal{Q}$ definidos em (2.66) e (2.67), ambos resultando na mesma distribuição universal com diferentes valores de s e r . Essa gama de valores para s e r , nas duas variáveis $\mathcal{E}$ e $\mathcal{Q}$, reflete, na verdade, que temos muitas direções de cruzar a linha de segunda ordem com o sistema apresentando uma transição de segunda ordem. Por exemplo, para uma quantidade F possuindo um expoente crítico ζ , ao cruzar a fronteira de fase segundo a trajetória horizontal em que $T = T_c$ na Figura 3.8 temos

$$F = F_0^\Delta |\Delta - \Delta_c|^{-\zeta}. \quad (3.2)$$

Ao cruzar segundo a trajetória com $\Delta = \Delta_c$ teremos

$$F = F_0^T |T - T_c|^{-\zeta}, \quad (3.3)$$

ou seja, com o mesmo expoente ζ , sendo F_0^Δ e F_0^T constantes não universais. Na verdade, qualquer direção de cruzamento leva ao mesmo expoente, o que reflete na mesma distribuição para ambos operadores e vários valores de parâmetros s e r .

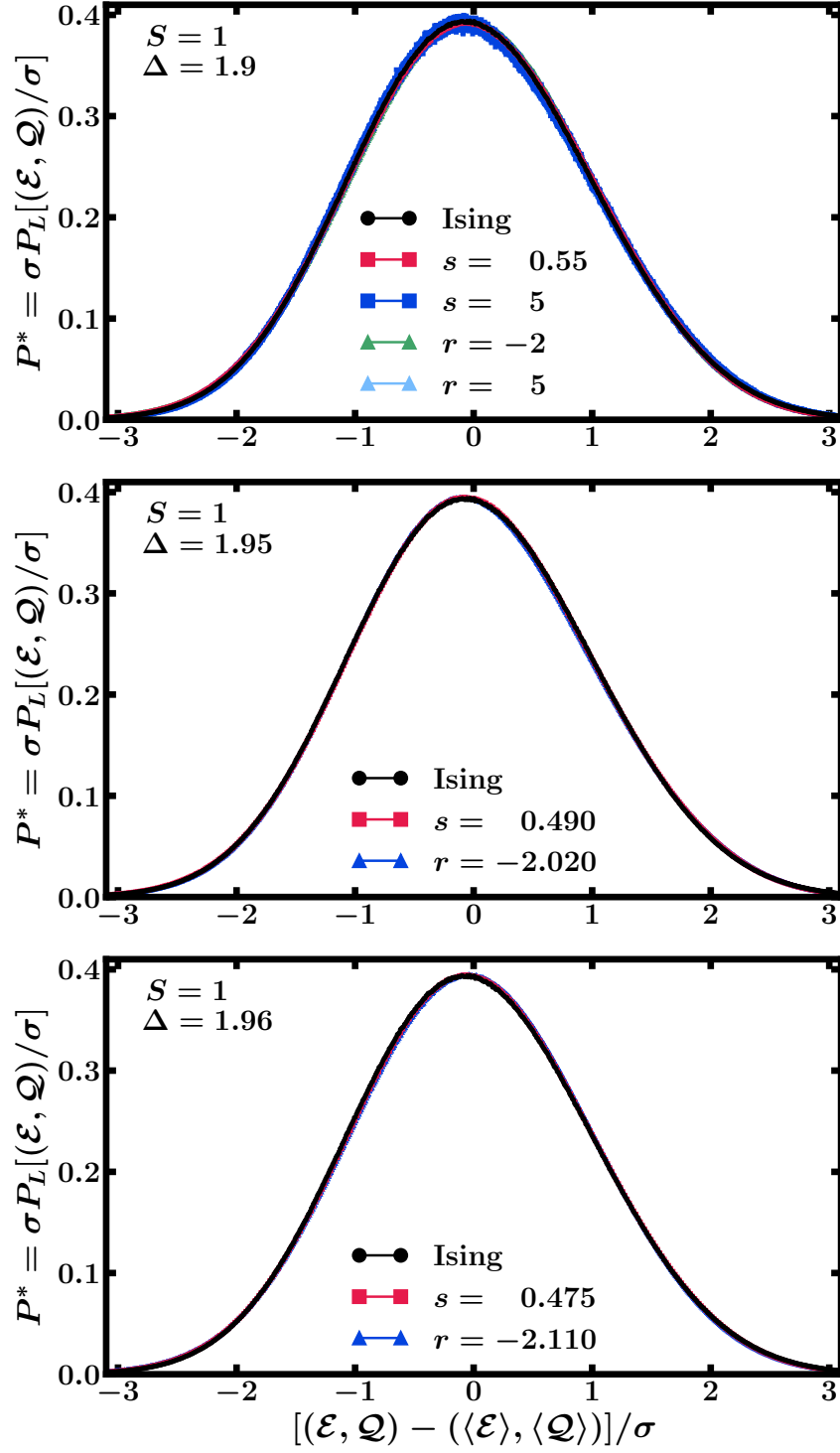


Fig. 3.7: Função distribuição de probabilidade universal das variáveis extensivas conjugadas $\mathcal{E}$ e $\mathcal{Q}$ em determinados valores das variáveis de mistura de campos s (quadrados) e r (triângulos) para o modelo Blume-Capel de spin $S = 1$, nos campos cristalinos $\Delta = 1,9$, gráfico superior, $\Delta = 1,95$, gráfico central, e $\Delta = 1,96$, gráfico inferior. A FDP da energia do modelo Ising (círculos) está presente como referência.

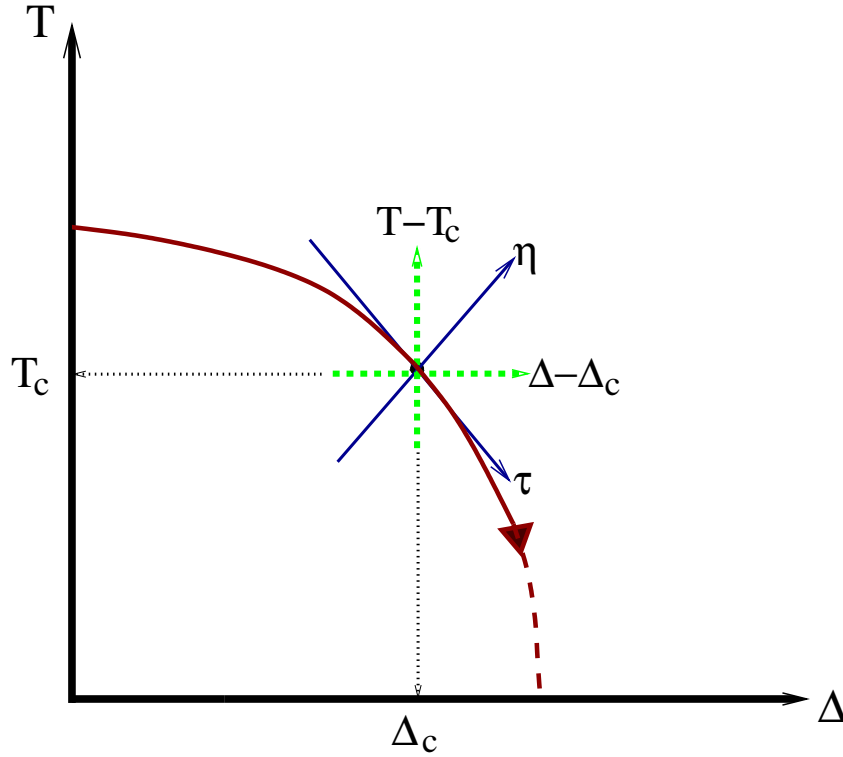


Fig. 3.8: Esquema parecido com o da Figura 2.1 na linha de segunda ordem (linha continua). A linha tracejada é de primeira ordem e o triângulo representa o ponto tricrítico.

O resultado acima é completamente diferente do que se obtém ao longo da linha de transição de primeira ordem. Nesse caso, as distribuições são diferentes e a da variável Q possui dois picos, de forma que quando eles tiverem a mesma altura corresponde exatamente ao ponto de transição de primeira ordem [66].

Esse padrão se repete para valores de campos cristalinos menores e também negativos, com um leve aumento no intervalo de valores dos parâmetros (para $\Delta = 0$ temos $0.25 < s < 5$ e $-4 < r < 4$). Entretanto, ao aumentarmos o valor do campo cristalino, o intervalo de valores possíveis das variáveis de mistura s e r , cuja distribuição reflete a mesma universalidade da do Ising, fica mais restrito, como indicado no gráfico central da Fig. 3.7 para $\Delta = 1,95$ e no inferior para $\Delta = 1,96$. Na verdade, para $\Delta \geq 1,95$ é necessário variar os parâmetros de mistura até encontrar um valor de r e s cuja PDF mais se aproxima daquela do modelo Ising. Adicionalmente, pequenas diferenças entre as mesmas podem ser atenuadas alterando levemente a temperatura ao usar o método dos histogramas simples. Seguindo esse critério, obtemos as distribuições cujos valores otimizados de $s = 0,49$ e $r = 2,02$ para $\Delta = 1,95$ coincidem com a PDF e a classe de universalidade do modelo Ising. Em $\Delta = 1,96$ esses valores otimizados correspondem a $s = 0,475$ e $r = -2,1$.

Da Fig. 3.6, gráfico superior, percebe-se que em $\Delta = 1,96$ a FDP da energia não coincide com a do modelo Ising, mas, como indicado na Fig. 3.7 no gráfico inferior, isso é, de certa forma, corrigido pela mistura de campos. Portanto, podemos dizer que em $\Delta = 1,96$ o modelo Blume-Capel ainda está na mesma classe de universalidade do modelo Ising. Podemos então seguir esse procedimento e testar as FDPs para valores ainda maiores do campo cristalino. Isso é mostrado na Figura 3.9 para $\Delta = 1,969$, $\Delta = 1,97$, e $\Delta = 1,972$, respectivamente nos gráficos superior, central e inferior. Pode-se ver, claramente, que as distribuições começam a se desviar do padrão de Ising em

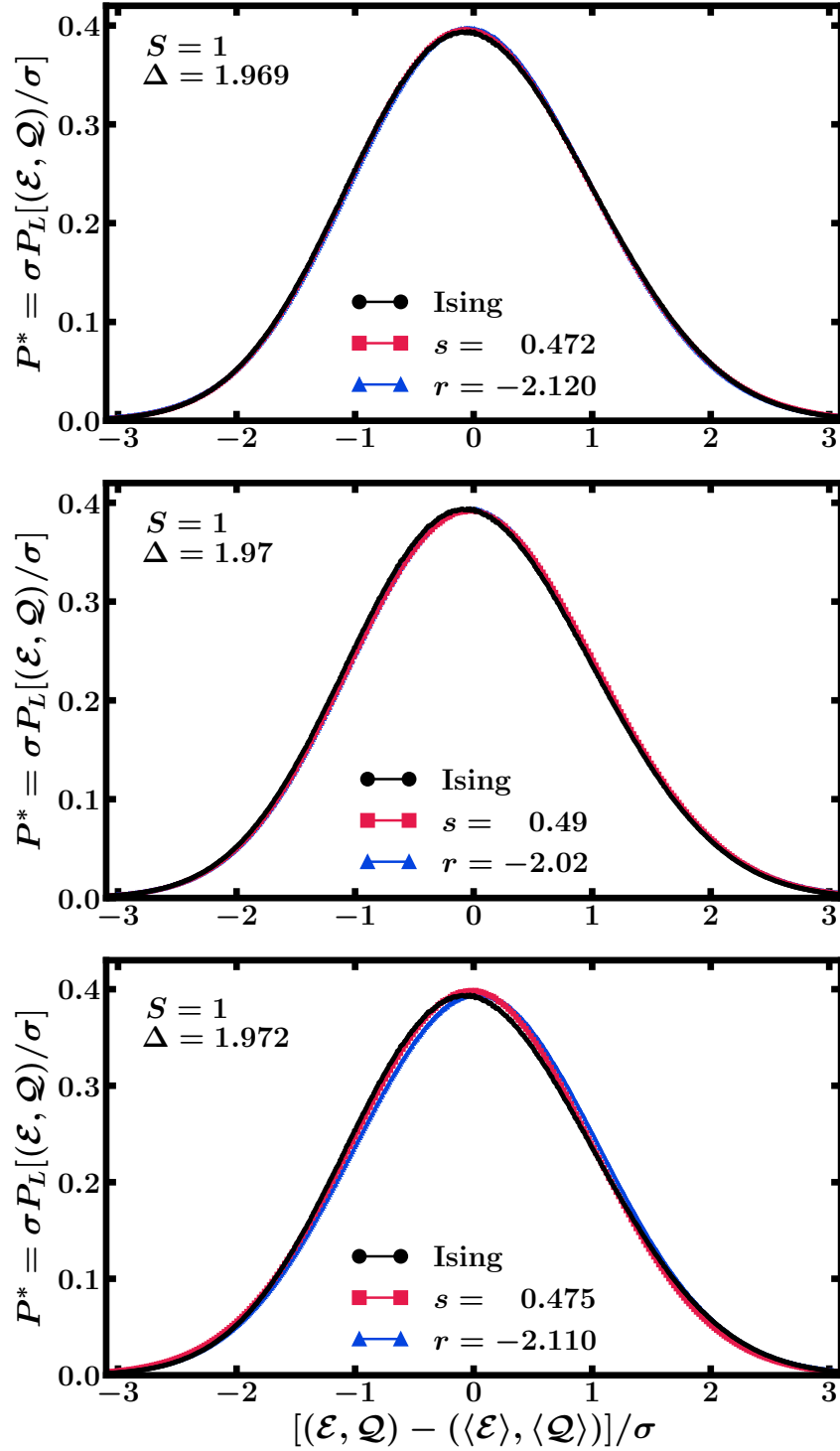


Fig. 3.9: FDP das variáveis extensivas conjugadas $\mathcal{E}$ e $\mathcal{Q}$ em determinados valores das variáveis de mistura de campos r (quadrados) e s (triângulos) para o modelo Blume-Capel de spin $S = 1$ nos campos cristalinos $\Delta = 1,969$, gráfico superior, $\Delta = 1,97$, gráfico central, e $\Delta = 1,972$, gráfico inferior. A FDP da energia do modelo Ising (círculos) está presente como referência.

$\Delta = 1,972$. Estima-se, então, o ponto tricrítico, de acordo com os dados da Figura 3.9, em $\Delta_{PTC} = 1,970(2)$ e $T_{PTC} = 0,5928(3)$. Esses valores devem ser comparados com os obtidos por Monte Carlo utilizando mistura de campos $\Delta_{PTC}^{MC} = 1,9665(3)$ e $T_{PTC}^{MC} = 0,608(1)$ [66], invariância conforme [24] $\Delta_{PTC}^{IC} = 1,965(5)$ e $T_{PTC}^{IC} = 0,609(4)$, método Wang-Landau [29] $\Delta_{PTC}^{WL} = 1,9660(1)$ e $T_{PTC}^{WL} = 0,6080(1)$ e resultados mais recentes usando matriz de transferência $\Delta_{PTC}^{MT} = 1,9658149(2)$ e $T_{PTC}^{MT} = 0,60857756(4)$ [90].

É interessante ainda observar, das Figuras 3.7 e 3.9, que para $\Delta \geq 1,95$, o módulo do produto $r \times s$ encontra-se no intervalo $0,990 - 1,002$, significando que as retas dadas pelas Eqs. (2.64) e (2.65) tendem a se tornar perpendiculares, já que o produto $r \times s \approx 1$ (o valor exato seria 1).

3.4.2 BC spin $S = 3/2$

No caso BC de spin $S = 3/2$ e $\Delta \leq 1,95$, existem várias FDPs com mistura de campos que coincidem com aquela do modelo Ising, conforme Fig. 3.10, gráfico superior. Esse resultado é completamente equivalente ao caso $S = 1$ com $\Delta \leq 1,95$, inclusive para $(r, s) \geq 5$ as distribuições se tornam muito ruidosas também. Da Fig. 3.6, gráfico central, para $S = 3/2$, percebe-se que em $\Delta = 1,986$ a FDP da energia está totalmente diferente da do Ising, mas, nos valores ótimos de $s = 0,49$ e $r = -2,04$, obtemos FDPs com mistura de campos que mantêm a mesma classe de universalidade entre os modelos. Novamente, assim como no caso $S = 1$, as retas dadas pelas Eqs. (2.64) e (2.65) tornam-se perpendiculares para os valores de parâmetro de mistura otimizados quando $\Delta \geq 1,986$. Em $\Delta = 1,988$ as FDPs com mistura de campos apresentam diferenças apreciáveis em relação àquela do modelo Ising, conforme Fig. 3.10, gráfico inferior, onde os valores $s = 0,4905$ e $r = -2,039$ são aqueles cujas distribuições mais se aproximam da FDP do modelo Ising. Portanto, esse é um caso limite em que o modelo BC de spin $S = 3/2$ começa a diferir da classe de universalidade do modelo Ising. Estimamos, então, o ponto crítico terminal duplo (CTD) em $\Delta_{CTD} = 1,987(1)$ e $T_{CTD} = 0,5886(6)$, que deve ser comparado ao de Monte Carlo usando mistura de campos $\Delta_{CTD}^{MC} = 1,98647(5)$ e $T_{CTD}^{MC} = 0,59374(7)$ [25].

Em $\Delta \geq 2$ as FDPs do modelo BC de spin $S = 3/2$, Fig. 3.6, gráfico inferior, sugerem transições de fase de segunda ordem. No entanto, verificamos uma pequena diferença entre as FDPs para $\Delta = 2$. Aplicamos a mistura de campos nesse ponto e, conforme Fig. 3.11, gráfico superior, através de pequenas variações na temperatura, foi possível fazer as FDPs coincidirem para os valores ótimos dos parâmetros de mistura $s = 0,38$ e $r = -2,8$, portanto os modelos mantêm a mesma universalidade nesse valor do campo cristalino. Já para $\Delta = 2,5$ e $\Delta = 3$, as FDPs com mistura de campos convergem para a do modelo Ising em uma ampla faixa de valores de r e s , de modo que os modelos apresentam a mesma classe de universalidade, como pode ser notado na Fig. 3.11, gráficos central e inferior.

3.5 Diagrama de fase do modelo Blume-Capel

O diagrama de fase do modelo Blume-Capel de spin $S = 1$ no limite termodinâmico, com os dados da Tabela 3.1, está representado na Fig. 3.12. As linhas cheias descrevem as transições de segunda ordem, sendo constituída pelos presentes resultados dos zeros DPE em comparação com resultados de expansão em séries e invariância conforme. Não foi

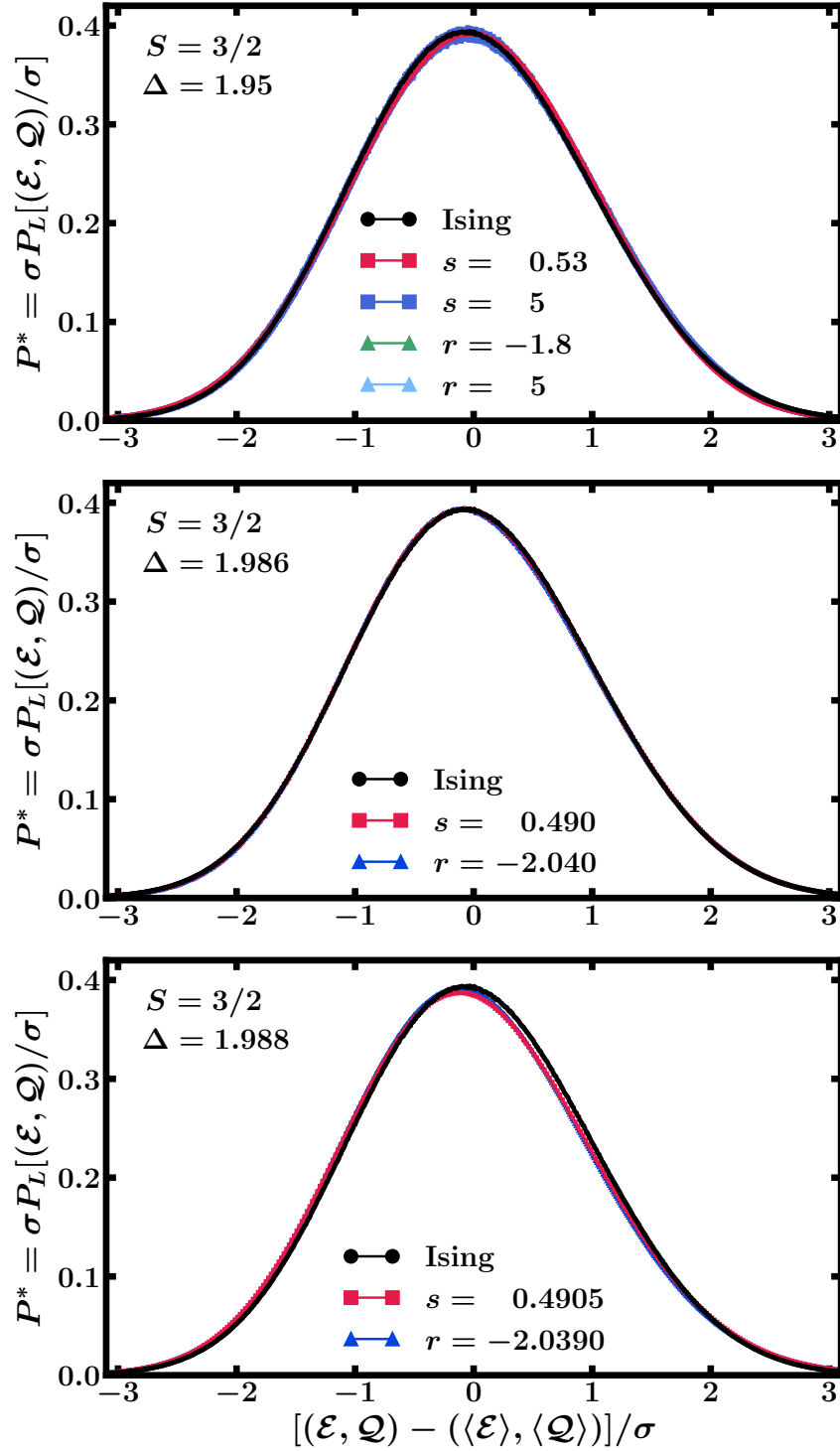


Fig. 3.10: FDP das variáveis extensivas conjugadas $\mathcal{E}$ e $\mathcal{Q}$ em determinados valores das variáveis de mistura de campos r (quadrados) e s (triângulos) para o modelo Blume-Capel de spin $S = 3/2$ nos campos cristalinos $\Delta = 1,95$, gráfico superior, $\Delta = 1,986$, gráfico central, e $\Delta = 1,988$, gráfico inferior. A FDP da energia do modelo Ising (círculos) está presente como referência.

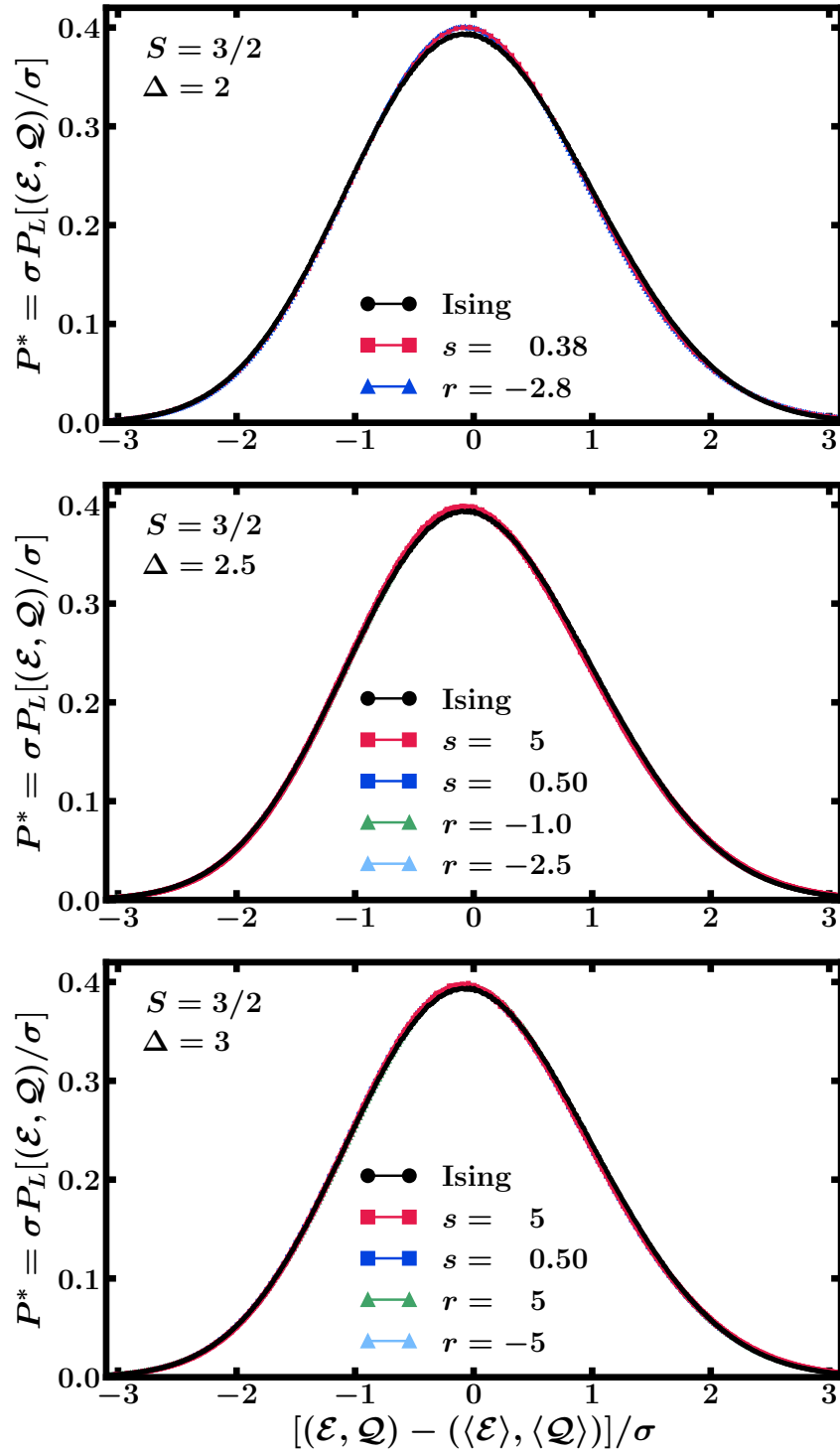


Fig. 3.11: FDP das variáveis extensivas conjugadas $\mathcal{E}$ e $\mathcal{Q}$ em determinados valores das variáveis de mistura de campos r (quadrados) e s (triângulos) para o modelo Blume-Capel de spin $S = 3/2$ nos campos cristalinos $\Delta = 2$, gráfico superior, $\Delta = 2, 5$, gráfico central, e $\Delta = 3$, gráfico inferior. A FDP da energia do modelo Ising (círculos) está presente como referência.

possível obter resultados confiáveis para campos cristalinos $\Delta > 1,972$ porque nessa região as distribuições de probabilidade apresentam muitos ruídos, mesmo para as redes menores. Além disso, nesses altos campos cristalinos e principalmente em redes maiores, a tendência do algoritmo de Metropolis manter o sistema mais tempo em dadas configurações torna-se mais drástica, a ponto de as distribuições de magnetização apresentarem apenas um pico, o que não corresponde ao comportamento do sistema nessa região de transições de fase de primeira ordem.

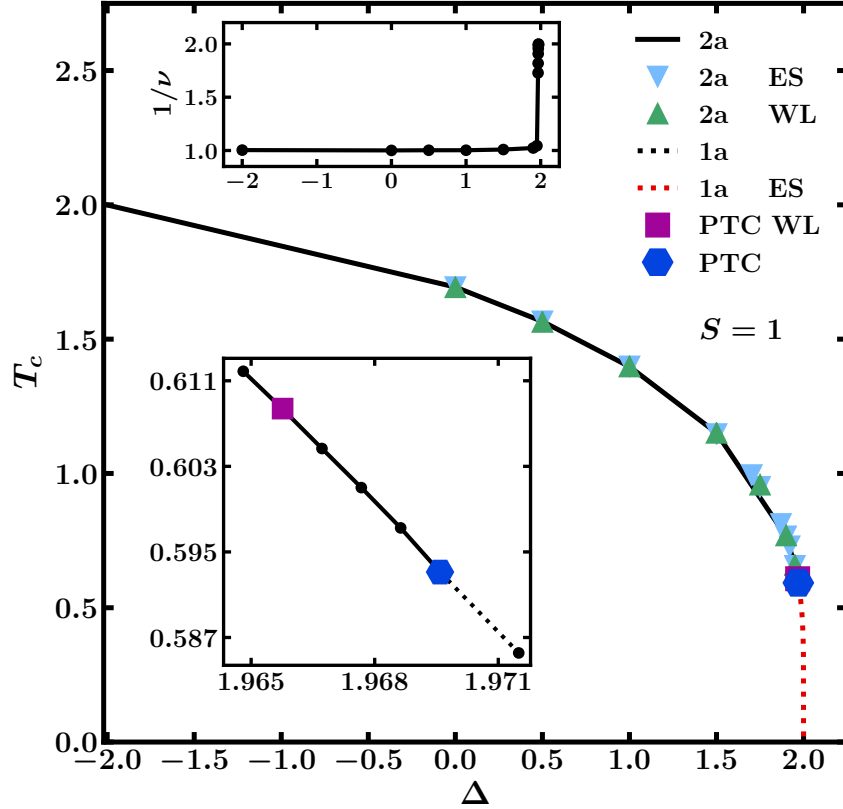
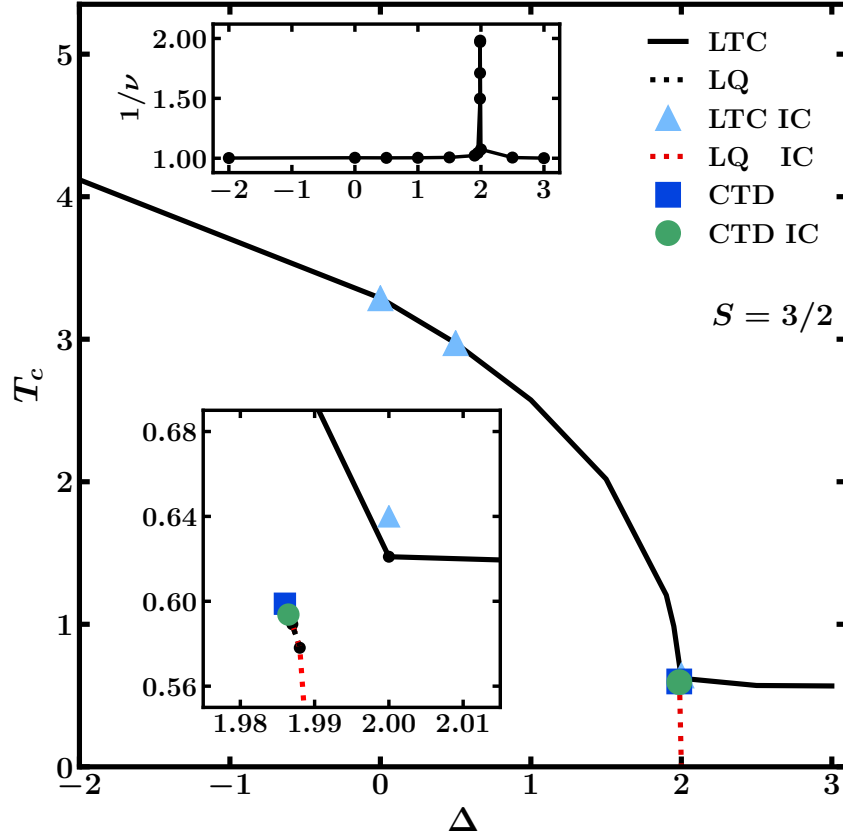


Fig. 3.12: Diagrama de fase do modelo BC de spin $S = 1$ no plano da temperatura reduzida T_c^L e do campo cristalino Δ . A linha cheia representa as transições de segunda ordem e os resultados de expansão em séries (ES) e Wang-Landau (WL) estão presentes para comparação. As linhas tracejadas indicam transições de primeira ordem. O detalhe superior mostra a evolução do expoente crítico com o campo cristalino, já o detalhe inferior mostra a região próxima do ponto tricrítico (PTC).

Da Tabela 3.1 e da Fig. 3.12, detalhe superior, pode-se verificar que os valores de $1/\nu$ possuem uma mudança brusca perto do campo cristalino tricrítico, indo para o valor próximo de 2, que é justamente a dimensão da rede, indicando a presença de uma transição de primeira ordem nessa região. É próximo dessa região que as distribuições de probabilidade com mistura de campos tendem a ficar diferente da FDP da energia do modelo Ising. O detalhe inferior mostra uma ampliação dos dados próximos do ponto tricrítico. Para completar o diagrama, os dados para $\Delta > 1,972$ foram retirados dos resultados da abordagem de expansão em séries [90].

O diagrama de fase correspondente ao modelo BC de spin $S = 3/2$, com dados da Tabela 3.1, está representado na Figura 3.13. A linha cheia, linha de pontos tetracríticos (LTC), obtida dos zeros DPE, representa as transições de segunda ordem, comparadas com alguns resultados de invariância conforme (IC). Não conseguimos obter duas temperaturas

distintas, correspondentes a transições de primeira e segunda ordem, como indicado nos resultados de simulações de Monte Carlo anteriores [25] para a região próximo do ponto crítico terminal duplo (CTD). Por isso, nossos resultados próximos do ponto CTD são apenas para transições de primeira ordem. Essa linha de transição de primeira ordem, linha de pontos quádruplos (LQ), foi completada com dados de invariância conforme. Dos resultados de mistura de campos, pode-se notar que o ponto CTD está na mesma classe de universalidade dos modelos Ising e BC de spin $S = 1$. O detalhe superior mostra a evolução do expoente crítico $1/\nu$ com o campo cristalino Δ , onde é possível observar a formação de um pico bem estreito e próximo de $\Delta = 2$. Já o detalhe inferior mostra uma ampliação em torno do ponto CTD.



3.6 Conclusões

Neste capítulo, utilizamos exaustivas simulações de Monte Carlo em parceria com os zeros da distribuição de probabilidade da energia para estudarmos os modelos Ising e Blume-Capel de spin $S = 1$ e $S = 3/2$, na presença de um campo cristalino, com o objetivo de determinar o comportamento crítico do modelo no limite termodinâmico.

Uma vez que o modelo Ising possui solução exata, decidimos utilizá-lo para testar a eficiência do método dos zeros DPE. De fato, o expoente crítico do comprimento de correlação e temperatura crítica obtidos concordam muito bem com os valores exatos e com resultados advindos de outros métodos da literatura.

As distribuições de probabilidade da energia e magnetização, assim como a abordagem de mistura de campos, permitiram avaliar a classe de universalidade dos modelos no limite termodinâmico e identificar com precisão os pontos multicríticos. Percebemos que as distribuições de probabilidade da energia são mais eficazes na descrição do comportamento universal do modelo do que a distribuição da magnetização. Notamos ainda que as distribuições de probabilidades provenientes da mistura de campos são mais convenientes para descrever a universalidade dos modelos. A universalidade entre o modelo Ising e o modelo BC de spin $S = 1$ e $S = 3/2$ ocorrem em $\Delta \leq 1,972$ e $\Delta \leq 1,987$, respectivamente. Com o aumento do campo cristalino em direção aos pontos multicríticos, as distribuições de probabilidade universais com mistura de campos tendem a ficar restritas aos valores de r e s que respeitam a relação $rs = 1$.

Os expoentes críticos do modelo BC com campo cristalino praticamente não se alteram ao longo da linha de segunda ordem, apenas bem próximo dos pontos multicríticos ocorrem alterações significativas, tendendo a um valor próximo de 2, que é a dimensão da rede. Utilizamos o valor do expoente crítico e o limite da universalidade entre o modelo Ising e o modelo BC de spin $S = 1$, para localizarmos o ponto tricrítico em $\Delta_{PTC} = 1,97(2)$ e $T_{PTC} = 0,5928(3)$, e o ponto terminal duplo do modelo BC de spin $S = 3/2$ em $\Delta_{CTD} = 1,987(1)$ e $T_{CTD} = 0,5886(6)$. Os expoentes do ponto tricrítico do modelo BC são conhecidos de forma exata por Invariância Conforme. O valor do expoente tricrítico do comprimento de correlação exato é dado por $\nu = 5/9$ [59,92]. Uma busca na Tabela 3.1 mostra que esse valor corresponde aproximadamente ao campo cristalino $\Delta = 1,966$, que fica bem próximo do valor obtido neste trabalho, como descrito acima. Esse resultado mostra novamente a eficácia do procedimento de mistura de campos.

Em altos valores de campo cristalino, o algoritmo de Metropolis tende a permanecer mais tempo em alguns estados tornando-o ineficiente em $\Delta > 1,972$ para spin $S = 1$ e no caso $S = 3/2$ em $1,988 < \Delta < 2$, na linha de primeira ordem, assim como $\Delta > 3$, na linha de segunda ordem. Esse problema pode ser melhor analisado usando algoritmos híbridos, como Metropolis associado ao algoritmo de Wolff.

4 Modelo Baxter-Wu

O mesmo procedimento descrito no capítulo anterior para o modelo BC será aplicado ao modelo BW. O interesse principal é obter as temperaturas de transição, bem como a ordem e universalidade das mesmas, usando os zeros DPE e FDP da energia e magnetização. Nesse caso, as distribuições de probabilidades das magnetizações de subrede serão também analisadas.

4.1 Simulações de Monte Carlo

As simulações de MC foram realizadas usando o algoritmo de Metropolis em redes de tamanho linear L com condições de contorno periódicas. Como no modelo BC, o número de passos de Monte Carlo (N_{MCS}) para a termalização e para calcular os valores médios das quantidades termodinâmicas dependem do valor do spin S , do tamanho L da rede, da abordagem utilizada (sejam os zeros da distribuição de probabilidade da energia ou a FDP universal), assim como dos valores do campo cristalino Δ .

Os zeros mais relevantes da distribuição de probabilidade de energia foram calculados usando redes de tamanho linear $L = 18, 24, 30, 45, 60, 75, 96, 120$, todas múltiplos de 3, para acomodar, adequadamente, as três subredes. No processo de termalização, para o caso $S = 1/2$, os primeiros $N_{term} = 10^5$ MCS foram descartados para $L \leq 45$, e $N_{term} = 3 \times 10^5$ MCS para as redes maiores. No caso $S = 1$ e $S = 3/2$ a termalização foi realizada descartando-se os $N_{term} = 3 \times 10^5$ MCS para redes $L \leq 45$ e $L \leq 30$, respectivamente, e $N_{term} = 6 \times 10^5$ MCS para as redes maiores. Os histogramas foram obtidos com um total de $N_{MCS} = 10^8$ MCS, e as correspondentes raízes complexas foram calculadas por meio da biblioteca científica GLS-GNU *Scientific Library* [88]. Assim como no caso BC, em altos campos cristalinos e principalmente nas redes maiores, os histogramas tendem a apresentar picos com diferentes alturas. Para diminuir esse efeito e obter temperaturas e expoentes críticos com maior precisão, aumentamos o número de passos de Monte Carlo gradativamente. Então, para spin $S = 1$ e $\Delta \geq 1,5$ assim como $S = 3/2$ e $\Delta \geq 1,8$, usamos $N_{MCS} = 2 \times 10^8$ para redes $L \leq 30$, $N_{MCS} = 4 \times 10^8$ para redes 45 e 60 e $N_{MCS} = 8 \times 10^8$ para $L \geq 75$. O critério para interromper o processo de iteração e obter a temperatura da pseudo-transição T_c^L foi escolhido de tal forma que $T_0^{j+1} - T_0^j \leq \mu$, com o mesmo $\mu = 10^{-4}$ usado no modelo BC. Um resultado equivalente é também obtido considerando $|\Re(x_c^L) - 1| \leq \mu$.

O cálculo dos erros foi realizado de forma similar aos do modelo BC e os resultados foram bastante parecidos. Ao longo da linha de segunda ordem as barras de erros ficaram menores que os símbolos dos gráficos e aumentaram próximo dos pontos pentacríticos.

As funções de distribuições de probabilidade universais foram, por sua vez, calculadas nas correspondentes temperaturas de transição utilizando-se diferentes tamanhos de redes, com diferentes valores de N_{MCS} após a termalização, para diferentes valores de campos cristalinos. Como nesse caso as distribuições de probabilidades para modelo de spin $S = 1/2$ não estão bem definidas na literatura, simulações com vários tamanhos de rede foram realizadas para se ter uma ideia de como as mesmas se comportam no limite de L muito grande. Para spin $S > 1/2$ somente as redes maiores foram utilizadas. A tabela 4.1 ilustra os valores utilizados na obtenção das FDPs. Adicionalmente, a

técnica de repesagem de histograma simples foi utilizada para se obter as distribuições de probabilidade próximo à temperatura estimada [89].

Tab. 4.1: Numero de passos de MC para termalização, N_{term} , e para obtenção das FDPs, N_{MCS} , para diferentes valores de spin S , tamanhos de rede L , e campos cristalinos Δ . Todas simulações foram realizadas na temperatura crítica. Para spin $S = 1/2$ o campo cristalino é irrelevante.

L	$N_{term} (10^5)$	$N_{MCS} (10^8)$	Δ
$S = 1/2$			
≤ 45	1	1	
60	3	1	
75,96	3	2	
120, 150	3	6	
$S = 1$			
120,150	6	12	-2
120	6	12	≥ -1
150	6	12	≥ -1
$S = 3/2$			
120	6	12	todos

4.2 Resultados para o expoente crítico ν e temperatura crítica T_c utilizando-se os zeros DPE

Iniciamos com o modelo Baxter-Wu de spin $S = 1/2$, porque o mesmo tem solução exata e servirá de teste para aplicarmos o método dos zeros DPE que ainda não foi verificado nesse modelo. A Fig. 4.1 representa resultados para os zeros do sistema com $L = 75$ próximo da temperatura da pseudo-transição de fase T_c^L . O gráfico da esquerda, na Fig. 4.1, mostra uma visão global dos zeros localizados em torno de um círculo de raio unitário e o gráfico da direita exhibe uma ampliação da região próxima do zero dominante. É nitida a posição do zero dominante perto do ponto esperado no limite termodinâmico. Esse mesmo padrão das distribuições dos zeros DPE é observado para os demais valores de spin S , tanto para os diferentes tamanhos de rede quanto para os vários valores de campo cristalino. No entanto, o número de raízes depende fortemente do valor do spin, do tamanho da rede e também do campo cristalino.

A Fig. 4.2 mostra o gráfico log-log da parte imaginária $\Im(x_c^L)$ em função do tamanho da rede L para o modelo BW de spin $S = 1/2$ (símbolos circulares), $S = 1$ (símbolos quadrados) e $S = 3/2$ (símbolos triangulares), esses dois últimos spins para vários valores de campos cristalinos Δ . Um ajuste linear usando a Eq. (2.40) resulta em uma estimativa de $1/\nu = 1,496(1)$ para o expoente crítico do comprimento de correlação do caso spin $S = 1/2$, em muito boa concordância com o resultado exato de $1/\nu = 1,5$ [35–37]. Os demais ajustes lineares para spin $S = 1$ e $S = 3/2$ estão presentes na Fig. 4.2

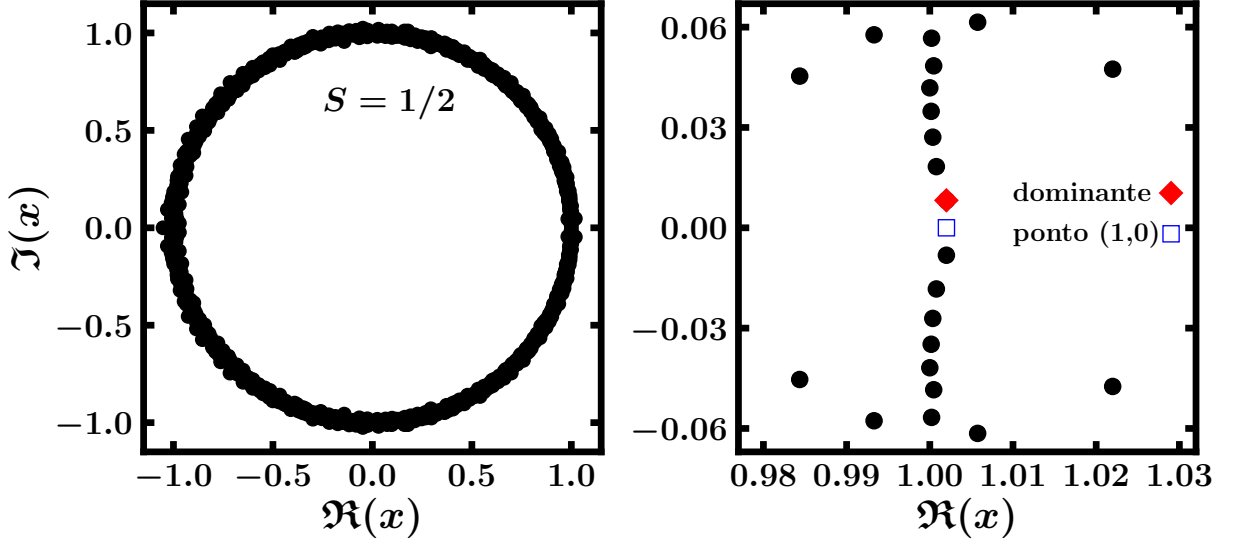


Fig. 4.1: Zeros da EPD no plano complexo para o modelo Baxter-Wu de spin $S = 1/2$ próximo da sua temperatura da pseudo-transição de fase para a rede $L = 75$. O gráfico da esquerda ilustra uma visão global dos zeros em torno de um círculo unitário e o da direita uma ampliação na área do zero dominante próximo de $(1,0)$.

para linhas de diferentes formatos, adicionalmente, os valores de $1/\nu$ estão incluídos na Tabela 4.2. Percebe-se que, ao contrário do que ocorre no modelo BC, o expoente crítico do comprimento de correlação do modelo BW é mais sensível ao aumento do campo cristalino. Fica evidente que todos diferentes ajustes são praticamente paralelos para campos cristalinos negativos e que as inclinações começam a se desviar do caso spin $S = 1/2$ à medida que Δ torna-se positivo e tende em direção ao ponto pentacrítico no caso spin $S = 1$ e do ponto multicrítico no caso spin $S = 3/2$. Similar ao que ocorre no caso BC em altos campos cristalinos, o valor do expoente crítico $1/\nu$ no modelo BW sofre variações com o tamanho das redes, mas nesse caso para campos cristalinos $\Delta \geq 1$. Então, para obter os valores de $1/\nu$ com maior precisão, todos os ajustes que levaram aos expoentes críticos da Tabela 4.2 em $\Delta \geq 1$ foram feitos com redes $L \geq 45$.

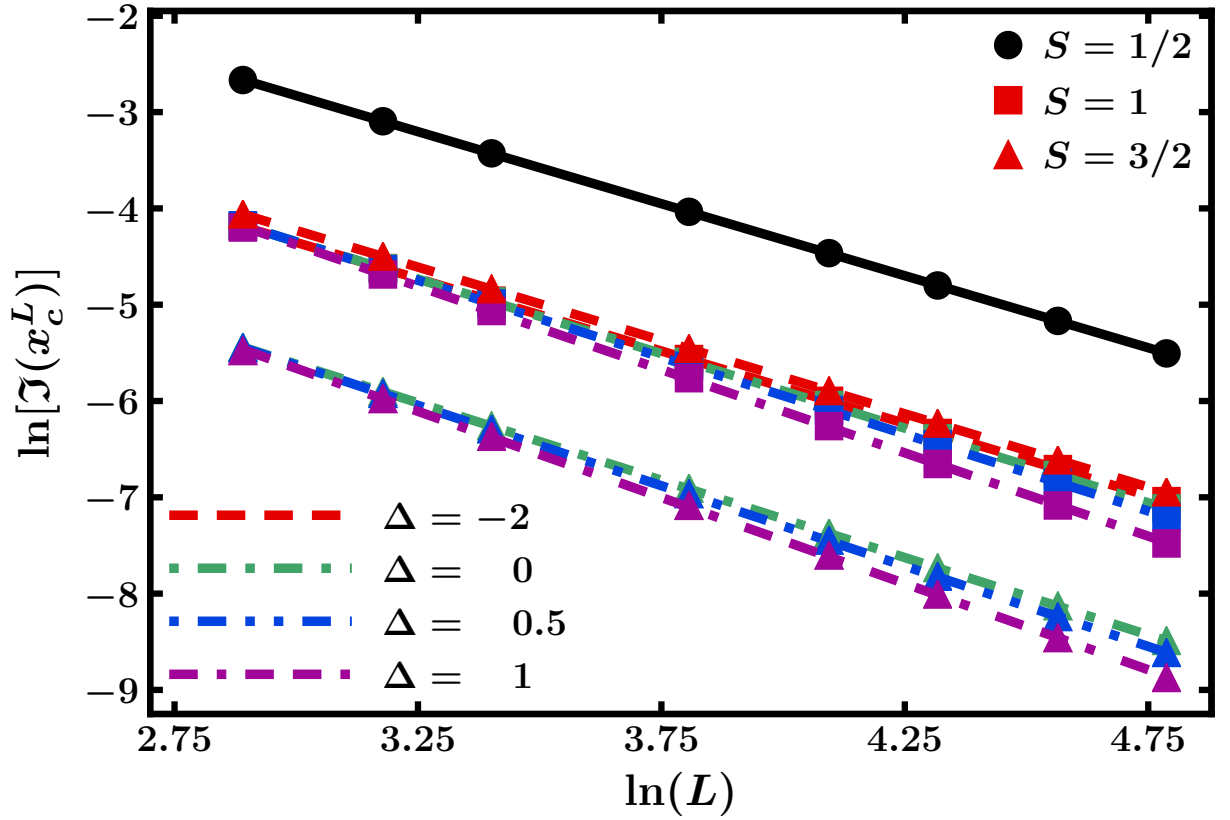


Fig. 4.2: O gráfico log-log da parte imaginária, $\Im(x_c^L)$, em função do tamanho linear, L , da rede para o modelo Baxter-Wu de spin $S = 1/2$ (círculos), $S = 1$ (quadrados) e $S = 3/2$ (triângulos). Em ambos casos $S = 1$ e $S = 3/2$ ocorrem: linhas tracejadas para $\Delta = -2$; linhas tracejadas-pontilhadas para $\Delta = 0$; linhas tracejadas-pontilhadas-pontilhadas para $\Delta = 0,5$; e linhas tracejadas-tracejadas-pontilhadas para $\Delta = 1$.

Tab. 4.2: Temperatura de transição, T_c , e inverso do expoente crítico do comprimento de correlação, $1/\nu$, do modelo Baxter-Wu de spin $S = 1/2$, $S = 1$ e $S = 3/2$, estes dois últimos para diversos campos cristalinos, Δ , obtidos a partir dos zeros da distribuição de probabilidade da energia. A primeira linha corresponde ao resultado exato e a segunda ao numérico obtido com os zeros DPE para o caso $S = 1/2$. Na quinta e sexta colunas estão alguns resultados da temperatura de transição procedentes de métodos como Wang-Landau [49] e invariância conforme [45], respectivamente, para comparação.

Δ	T_c	$T_c(L \geq 24)$	$T_c(L \geq 30)$	T_c^{WL}	T_c^{IC}	$1/\nu$
$S = 1/2$						
$-\infty$	2,26918...					1,5
$-\infty$	2,2691(2)	2,2692(3)	2,2692(3)	2,26924(2)		1,496(1)
$S = 1$						
-10,0	2,2577(2)	2,2577(2)	2,2577(2)		2,2578	1,495(2)
-2,0	1,9797(4)	1,9796(4)	1,9796(3)	1,9980		1,503(1)
-1,0	1,8502(3)	1,8502(3)	1,8502(2)		1,8597	1,512(1)
-0,5	1,7650(1)	1,7650(2)	1,7650(3)			1,526(1)
0,00	1,6606(5)	1,6606(4)	1,6606(3)			1,548(1)
0,50	1,5301(3)	1,5302(3)	1,5301(2)	1,5437		1,597(2)
1,00	1,3596(3)	1,3597(2)	1,3597(1)	1,3730	1,3617	1,750(4)
1,20	1,2739(3)	1,2739(2)	1,2739(2)			1,885(4)
1,30	1,2255(1)	1,2255(2)	1,2255(1)			1,952(5)
1,40	1,1721(2)	1,1722(3)	1,1721(2)			1,991(3)
1,48	1,1249(4)	1,1249(3)	1,1249(2)			2,001(4)
1,50	1,1126(3)	1,1127(3)	1,1126(2)	1,1272		2,000(4)
1,52	1,0997(3)	1,0997(2)	1,0997(1)			1,999(3)
1,54	1,0864(2)	1,0865(2)	1,0863(1)			2,001(3)
1,56	1,073(3)	1,073(2)	1,073(1)			2,00(3)
1,58	1,059(3)	1,059(2)	1,059(2)			2,00(2)
1,60	1,045(2)	1,045(3)	1,045(2)			2,00(2)
$S = 3/2$						
-2,0	5,6645(5)	5,6645(4)	5,6645(3)			1,523(2)
-1,0	5,2576(3)	5,2576(2)	5,2576(2)		5,2661	1,543(1)
-0,5	5,0037(3)	5,0037(3)	5,0037(4)			1,552(1)
0,00	4,7056(6)	4,7057(4)	4,7057(4)			1,562(2)
0,50	4,3839(4)	4,3839(4)	4,3839(4)			1,667(4)
1,00	3,9985(3)	3,9986(4)	3,9985(3)		4,0107	1,798(5)
1,30	3,7629(4)	3,7630(4)	3,7629(4)			1,90(1)
1,40	3,6574(3)	3,6575(3)	3,6575(3)			1,942(3)
1,50	3,5527(4)	3,5527(3)	3,5527(3)			1,977(4)
1,60	3,4445(3)	3,4444(3)	3,4443(3)			1,993(2)
1,80	3,2141(4)	3,2144(3)	3,2144(3)			1,998(3)
1,82	3,1928(5)	3,1928(4)	3,1928(4)			2,000(4)
1,84	3,1703(5)	3,1704(4)	3,1703(2)			2,000(4)
2,00	2,987(2)	2,987(1)	2,987(1)		2,9846	2,00(2)

Em posse do expoente crítico do comprimento de correlação e da temperatura da pseudo-transição T_c^L para cada tamanho de rede L , a temperatura de transição, no limite termodinâmico, pode ser obtida usando as Eqs. (2.34) e (2.35). A Fig. 4.3 mostra os três diferentes ajustes realizados para o modelo BW de spin $S = 1/2$ e $S = 1$, dois ajustes lineares, com $A' = 0$ e usando redes $L \geq 24$ em um dos ajustes e outro com $L \geq 30$, e um ajuste não linear usando todas as redes e o valor exato do coeficiente de correção de escala $w = 2$ [41, 42]. Tomando a média desses três ajustes resulta em $T_c = 2,26918(4)$ para o caso $S = 1/2$, em excelente acordo com o resultado exato de $2,269185\dots$ [37]. No caso $S = 1$, para cada valor do campo cristalino usamos os correspondentes expoentes críticos $1/\nu$ da Tabela 4.2. A variação de $1/\nu$ com o campo cristalino é a razão para ocorrer diferentes valores de escala ao longo do eixo horizontal da Fig. 4.3, embora os tamanhos de redes sejam os mesmos. Na escala das figuras, as linhas dos diferentes ajustes ficam sobrepostas e são praticamente indistinguíveis. Os valores numéricos são dados na Tabela 4.2 junto com aqueles obtidos para outros valores de campo cristalino.

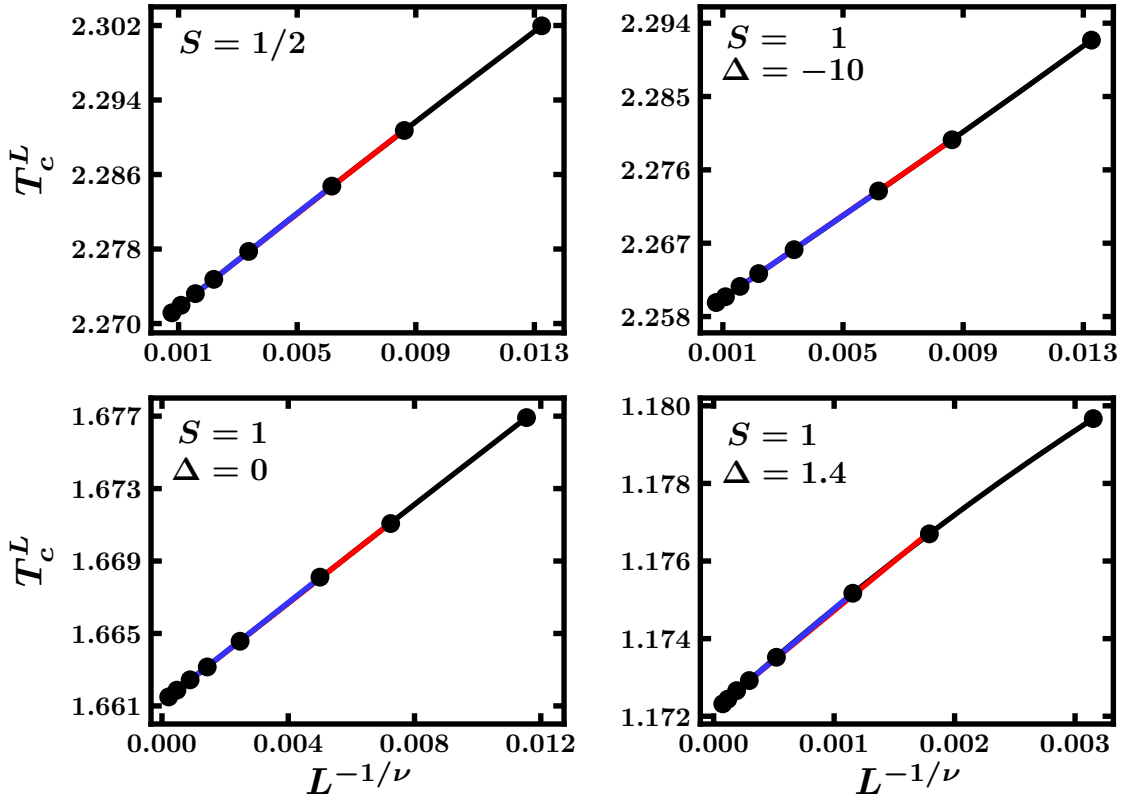


Fig. 4.3: Temperatura da pseudo-transição T_c^L como função do tamanho da rede $L^{-1/\nu}$, com o expoente crítico $1/\nu$ vindos da Tabela 4.2, para o modelo BW para spin $S = 1/2$, gráfico superior esquerdo, e para spin $S = 1$ em vários valores de campo cristalino Δ . Em cada gráfico existem três diferentes linhas quase sobrepostas que correspondem a três diferentes ajustes descritos no texto.

Uma inspeção mais detalhada da Tabela 4.2 mostra que as três temperaturas de transição, obtidas a partir dos três diferentes ajustes, estão todas em concordância dentro das barras de erro, mesmo para $\Delta = 1, 5$, onde é possível notar uma visível dependência com efeitos de tamanho finito para redes menores. Esses valores também são comparados com alguns poucos resultados advindos do método Wang-Landau [49] e teoria de invariância conforme [45]. Da qualidade desses ajustes, e pela robustez já demonstrada

pelo método zeros DPE aplicado a outros sistemas críticos [56–58], acreditamos que as presentes temperaturas críticas como função do campo cristalino, certamente podem ser consideradas como uma das mais precisas até agora para o presente modelo.

Em altos campos cristalinos torna-se inviável utilizar as maiores redes devido a ineficiência do algoritmo de Metropolis em alternar entre os diferentes estados do modelo. Por isso, no caso $S = 1$, em $1,48 \leq \Delta \leq 1,53$ a maior rede utilizada foi $L = 96$, já para $\Delta \geq 1,56$ a maior rede foi de $L = 75$.

Na Fig. 4.4 apresentamos a temperatura da pseudo-transição T_c^L como função de $L^{-1/\nu}$ para o modelo BW de spin $S = 3/2$ em alguns valores de campo cristalino. Os ajustes para a temperatura de transição no limite termodinâmico foram obtidos da mesma forma como descrito para o caso spin $S = 1$ e os valores correspondentes estão listados na Tabela 4.2, junto com valores adicionais de campo cristalino. Em $1,8 \leq \Delta \leq 1,84$ a maior rede utilizada foi $L = 96$, já em $\Delta = 2$ foi $L = 75$.

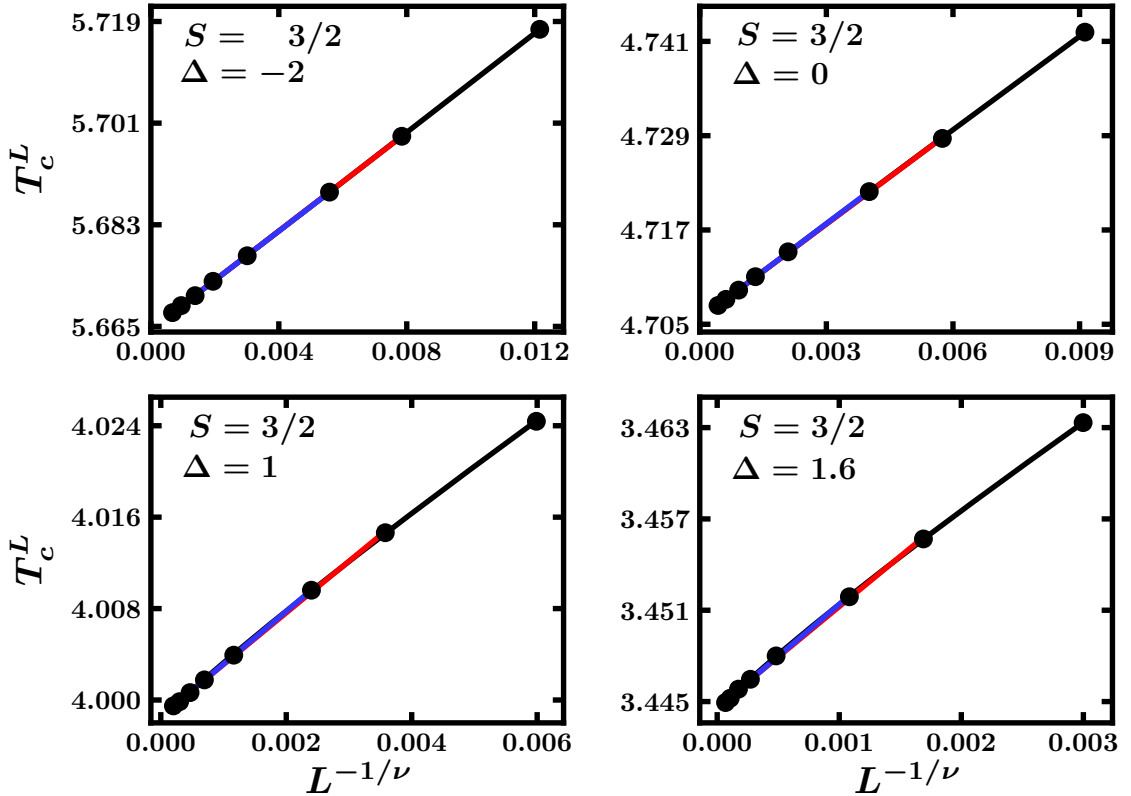


Fig. 4.4: Temperatura da pseudo-transição T_c^L como função do tamanho da rede $L^{-1/\nu}$, com o expoente crítico $1/\nu$ vindos da Tabela 4.2, para o modelo BW de spin $S = 3/2$ em vários campos cristalinos Δ . Em cada gráfico existem três diferentes linhas quase sobrepostas que correspondem a três diferentes ajustes descritos no texto.

Ficou evidente, da discussão acima, que a temperatura de transição do modelo BW para diferentes valores de spin e campos cristalinos pode ser precisamente obtida dos zeros da distribuição de probabilidade da energia. É também interessante notar que no modelo BW não presenciamos efeitos de tamanho finito, na temperatura de transição, tão pronunciados como no modelo BC estudado no capítulo anterior, permitindo uma análise linear para todos os valores de campo cristalino. No entanto, a questão da universalidade continua sendo inferida apenas através da análise do valor numérico do expoente crítico em si. Embora exista uma sensível alteração na direção $1/\nu = 2$, sendo 2 a dimensão

da rede e representativa da transição de primeira ordem, como indicado na Tabela 4.2, esse expoente mostra uma contínua variação conforme se aproxima do ponto multicrítico. Da Fig. 4.2 já é possível perceber um pequeno desvio do caso $S = 1/2$ para o campo cristalino $\Delta = 1$, tanto para spin $S = 1$ quanto para $S = 3/2$. Se essa variação do expoente crítico é uma alteração da classe de universalidade ou um efeito de tamanho finito devido a presença do ponto multicrítico é uma questão não esclarecida pelo procedimento dos zeros sozinho. Por essa razão, iremos analisar as distribuições universais da energia e da magnetização para reforçar essa importante questão.

4.3 Distribuição de probabilidade universal do modelo Baxter-Wu

Primeiro, vamos considerar o caso simétrico e, caso as FDPs se tornem bem diferentes conforme o sistema se aproxima do ponto multicrítico, implementaremos a abordagem de mistura de campos na próxima seção.

FDPs para o spin $S = 1/2$

Vamos primeiro calcular a distribuição de probabilidade universal para essa classe de sistemas considerando o caso mais simples do modelo de spin $S = 1/2$. Esse problema já foi abordado nas Refs. [70, 72] para a energia e nas Refs. [69, 71] para a magnetização. Entretanto, o interesse principal desses trabalhos anteriores não eram as FDPs universais em si. Assim, vale a pena verificar o comportamento de tamanho finito dessas FDPs em mais detalhes considerando redes ainda maiores, tomando longos MCS, e avaliando também as magnetizações das subredes.

As correspondentes FDPs da energia, gráfico superior, da magnetização das subredes, gráfico central, e da magnetização total, gráfico inferior, na temperatura de transição exata, estão mostradas na Fig. 4.5 para vários tamanhos de rede (a rede menor foi omitida porque apresenta muitos ruídos). Podemos verificar que as distribuições de magnetização convergem para a universal apenas para redes grandes, apresentando considerável efeito de tamanho finito. Enquanto a magnetização total tem um pico mais alto para valores negativos de m (refletindo o fato de que duas, das três subredes, tem spin com orientação negativa), as magnetizações das subredes possuem distribuições simétricas. É também surpreendente que a FDP universal da energia praticamente não sofre do mesmo efeito de tamanho finito das magnetizações, e um colapso é alcançado mesmo para as redes menores, como pode-se notar na Fig. 4.5, onde temos as distribuições para todas as redes.

Consideramos também, nesse caso, uma rede adicional de tamanho $L = 180$. No entanto, notamos que, enquanto a FDP para a energia e magnetização total são praticamente as mesmas da rede $L = 150$, a da magnetização das subredes apresentam picos de alturas ligeiramente diferentes, que se alternam dependendo do número de passos de Monte Carlo (típico do algoritmo de Metropolis de inversão de spin). Parece que à medida que o tamanho das redes aumenta, o sistema passa mais tempo em uma das fases da subrede. Por isso, adotamos, como FDP universal para comparação, apenas a distribuição mostrada na Fig. 4.5 para o tamanho da rede $L = 150$.

É interessante notar que em temperaturas um pouco acima de T_c , nesse caso $T = 2,27055$ para a rede $L = 150$, o ombro na FDP da energia mostrado na Fig. 4.5, gráfico

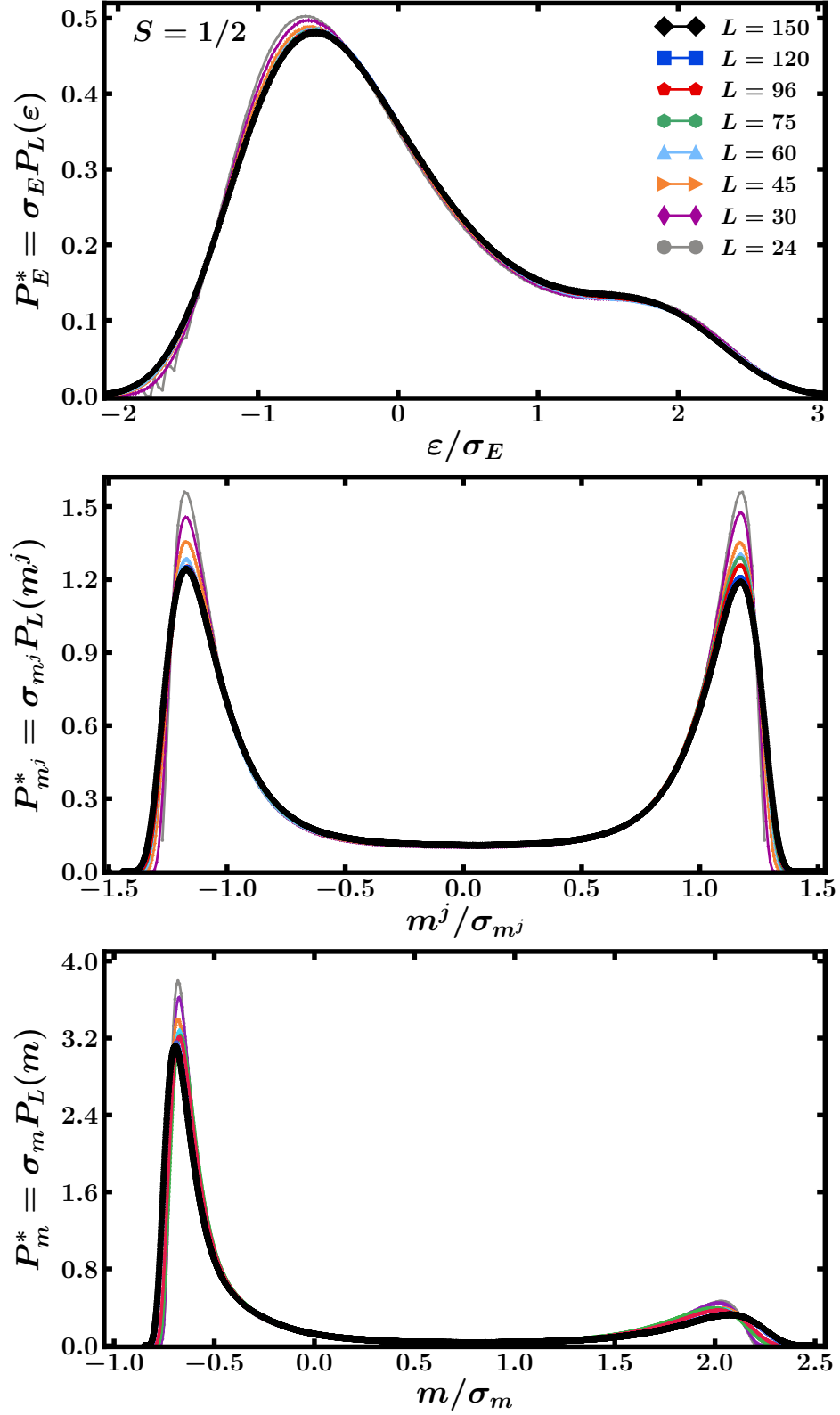


Fig. 4.5: Função distribuição de probabilidade universal da energia média P_E^* para o modelo BW de spin $S = 1/2$, gráfico superior, da magnetização das subredes $P_{m^j}^*$, que é a média das três subredes $j = 1, 2, 3$, gráfico central, e da magnetização total P_m^* , gráfico inferior. Todas as distribuições foram calculadas na temperatura de transição exata para $S = 1/2$. As redes indicadas na legenda superior também se aplicam nos outros gráficos.

superior, torna-se um segundo pico do mesmo tamanho do outro. Essa função de pico duplo foi interpretada, previamente, como um sinal de transição de fase de primeira ordem [52]. Para entender melhor esse efeito, usamos a técnica do histograma e obtivemos a Fig. 4.6, que mostra a FDP da energia calculada em uma temperatura onde os picos tem a mesma altura para vários tamanhos de rede. Podemos ver claramente que, nesse caso, também temos convergência para uma única função para tamanhos de redes $L \geq 60$. Associando a temperatura de picos à mesma altura a uma temperatura da pseudo-transição T_c^L e ajustando de acordo com as relações de escala de tamanho finito (2.34) e (2.35) obtem-se a temperatura de transição no limite termodinâmico. Isso pode ser verificado no detalhe da Fig. 4.6 e fornece o valor médio $T_c = 2,2692(1)$, bem próximo daquela obtida dos zeros da DPE e do exato.

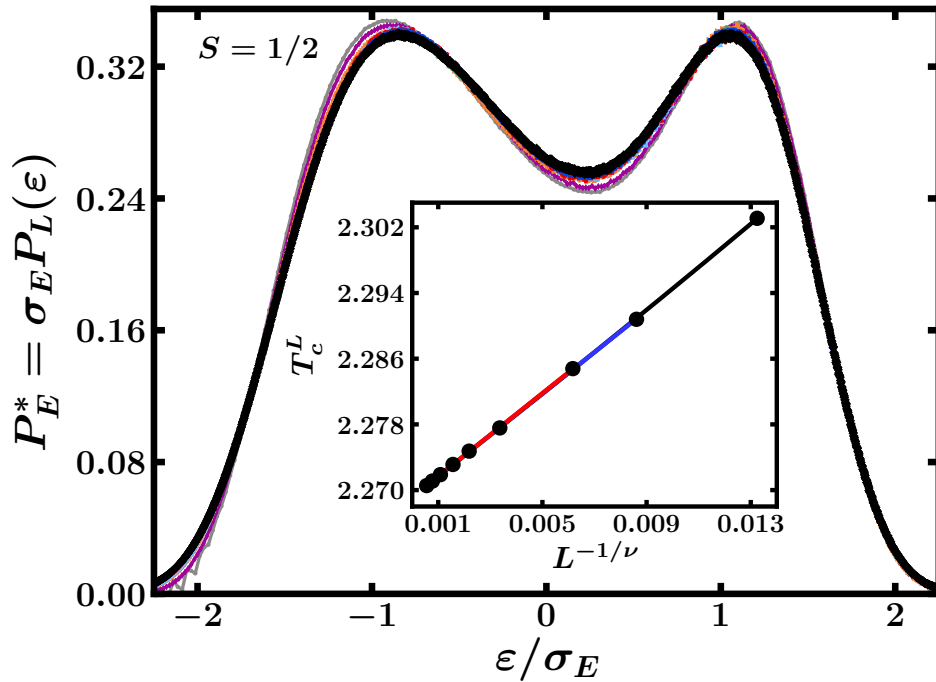


Fig. 4.6: FDP da energia P_E^* para o spin $S = 1/2$ e vários tamanhos de redes, calculadas na temperatura em que as distribuições tem dois picos de mesma altura. A legenda da Fig. 4.5 também se aplica nesse caso, o detalhe mostra o ajuste da temperatura da pseudo-transição T_c^L como função de $L^{-1/\nu}$. As linhas correspondem aos três diferentes ajustes já descritos na seção anterior.

O que está implícito na Fig. 4.6 é, na verdade, uma extensão à FDP da energia de um método originalmente proposto para a FDP da magnetização [67] para se determinar a temperatura de transição quando não se conhece, a priori, a FDP universal. Apesar do duplo pico, o resultado na Fig. 4.6 também confirma o esperado carácter da transição de segunda ordem como obtido das simulações de MC (e não primeira ordem), corroborando o resultado recente obtido pelo cálculo da tensão superficial no limite termodinâmico [54, 55].

FDPs para o spin $S = 1$ e $S = 3/2$

As FDPs do modelo BW de spin $S = 1$ e $S = 3/2$ foram obtidas para diferentes valores de campos cristalinos e com longas simulações nas correspondentes temperaturas críticas dadas na Tabela 4.2. Com exceção dos casos $S = 1/2$ e $S = 1$ em $\Delta = -2$, onde

foram usadas redes de tamanho $L = 150$, em todos os outros casos as redes foram de tamanho $L = 120$. O motivo é que com o aumento do valor do spin e do campo cristalino é necessário aumentar o número de passos de Monte Carlo para obter uma distribuição razoável.

A Fig. 4.7 mostra as FDPs do modelo BW para a energia P_E^* (gráfico superior), magnetização média das três subredes P_{mj}^* , $j = 1, 2, 3$ (gráfico central), e magnetização total P_m^* (gráfico inferior). Nessa figura temos spin $S = 1$ (quadrados) e $S = 3/2$ (triângulos), com os três valores de campos cristalinos considerados, $\Delta = -2$, $\Delta = 0,5$ e $\Delta = 1$. A FDP do modelo de spin $S = 1/2$ (círculos) também está presente para comparação.

Para $\Delta = -2$ a FDP do spin $S = 1$ converge para a universal do spin $S = 1/2$, mas existe uma pequena diferença entre a FDP de ambas e a do spin $S = 3/2$ nesse mesmo campo cristalino. Essa convergência fica ainda melhor em campos cristalinos negativos. Portanto, pode-se garantir que para $\Delta \leq -2$ os modelos de spin $S = 1$ e $S = 3/2$ estão na mesma universalidade do modelo de spin $S = 1/2$. No entanto, para campos cristalinos positivos essa situação é completamente diferente. Nos casos $\Delta = 0,5$ e $\Delta = 1$, por exemplo, ambas distribuições do spin $S = 1$ e $S = 3/2$ tornam-se completamente diferentes uma da outra e daquela do spin $S = 1/2$. A FDP da energia começa a desenvolver um segundo pico, onde inicialmente havia apenas um ombro. A FDP da magnetização das subredes e da total apresentam um pico adicional em $m^j = 0$ e $m \sim 0$, respectivamente. Em todos os casos, os picos tornam-se maiores com o aumento do spin e do campo cristalino.

Para verificar se essa distribuição da Fig. 4.7 já alcançou o comportamento de grandes redes, mostramos na Fig. 4.8 as correspondentes FDPs da energia, magnetização das subredes e total do modelo BW de spin $S = 3/2$ no campo cristalino $\Delta = 0,5$, para vários valores de tamanho de rede L na temperatura tetracrítica estimada dada na Tabela 4.2. Embora os efeitos de tamanho finito sejam mais pronunciados que os do caso spin $S = 1/2$ da Fig. 4.5, pode-se notar que as FDPs já alcançaram o limite de L grande para os presentes tamanhos de rede, mesmo alterando levemente o valor da temperatura de transição, pois temos apenas uma boa estimativa de T_c e não seu valor exato como no caso $S = 1/2$.

O resultado mostrado na Fig. 4.7 é um forte indicativo de que os expoentes tetracríticos do modelo BW não apenas se alteram ao longo da linha de transição de segunda ordem conforme o campo cristalino varia, mas também dependem do valor do spin S . A mudança no valor do expoente crítico com S está presente na Tabela 4.2 (por exemplo, em $\Delta = 0$ ocorre $1/\nu = 1,548(1)$ para spin $S = 1$ e $1/\nu = 1,562(2)$ para spin $S = 3/2$). No entanto, a discrepância entre as FDPs torna-se maior conforme o campo cristalino Δ aumenta na direção do ponto multicrítico.

Esses resultados podem estar indicando que existe uma mudança de universalidade entre o modelo BW de spin $S = 1/2$ e os de spin $S = 1$ e $S = 3/2$ para $\Delta > -2$. Mas, precisamos definir com mais precisão em que campos cristalinos essa mudança de universalidade ocorre. Para isso, usaremos a técnica de mistura de campos já aplicada com sucesso no modelo Blume-Capel.

Mistura de campos no modelo Baxter-Wu

O caso simétrico da subseção anterior mostrou que as FDPs do modelo BW de spin $S = 1$ e $S = 3/2$ começam a se desviar do caso $S = 1/2$ ainda em baixos valores de campos cristalinos. Embora efeitos de tamanho finito e correções de escala tendem a aumentar nessa região, uma mudança de universalidade pode ser evidente. Além disso,

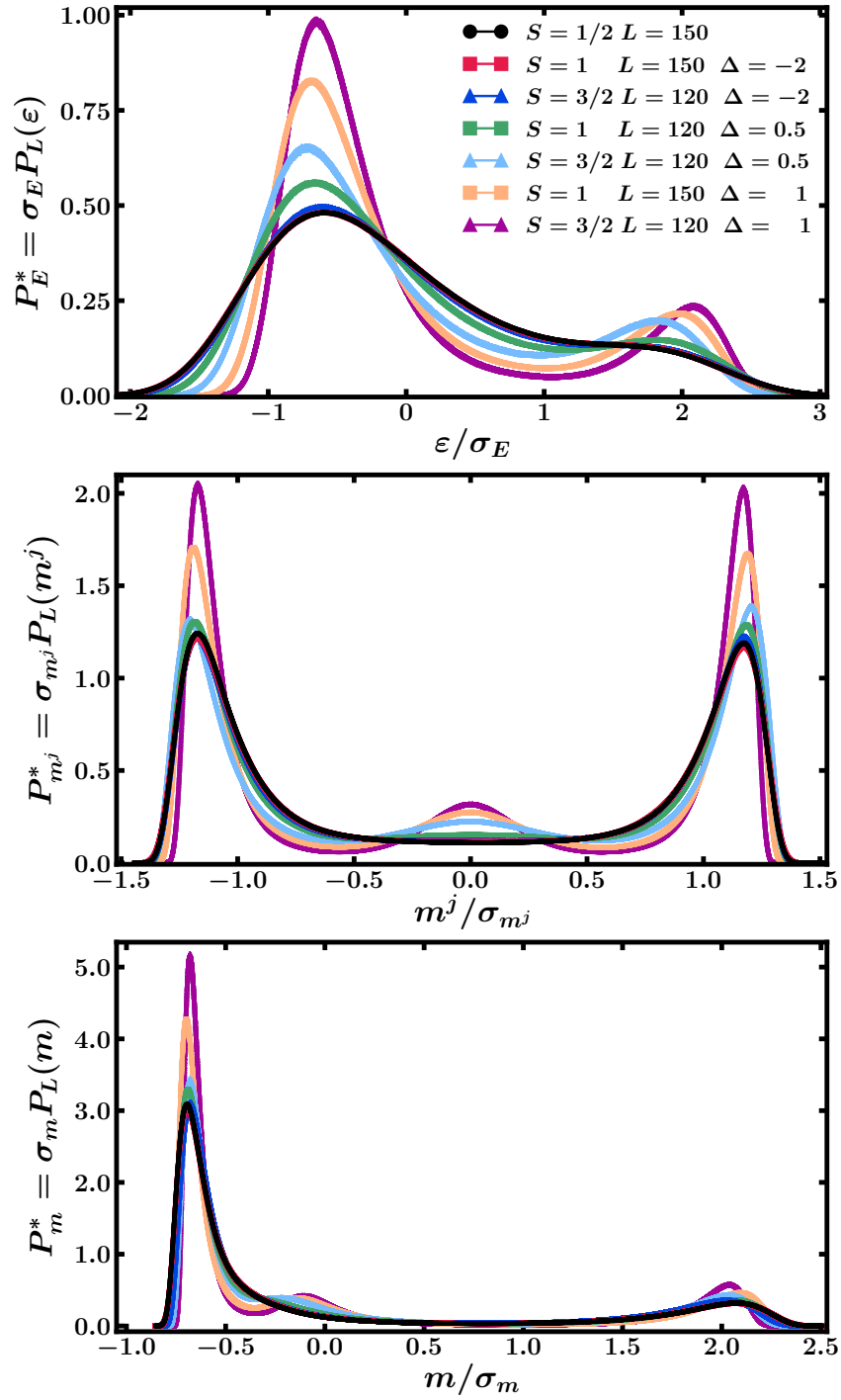


Fig. 4.7: Função distribuição de probabilidade da energia P_E^* (gráfico superior), da magnetização média das subredes $P_{m^j}^*$ (gráfico central), e da magnetização total P_m^* (gráfico inferior), para o modelo BW de spin $S = 1/2$ (círculos), $S = 1$ (quadrados) e $S = 3/2$ (triângulos), em vários valores de campos cristalinos. Os tamanhos das redes usadas em cada caso estão especificados na legenda do gráfico superior que também se aplica aos gráficos inferiores.

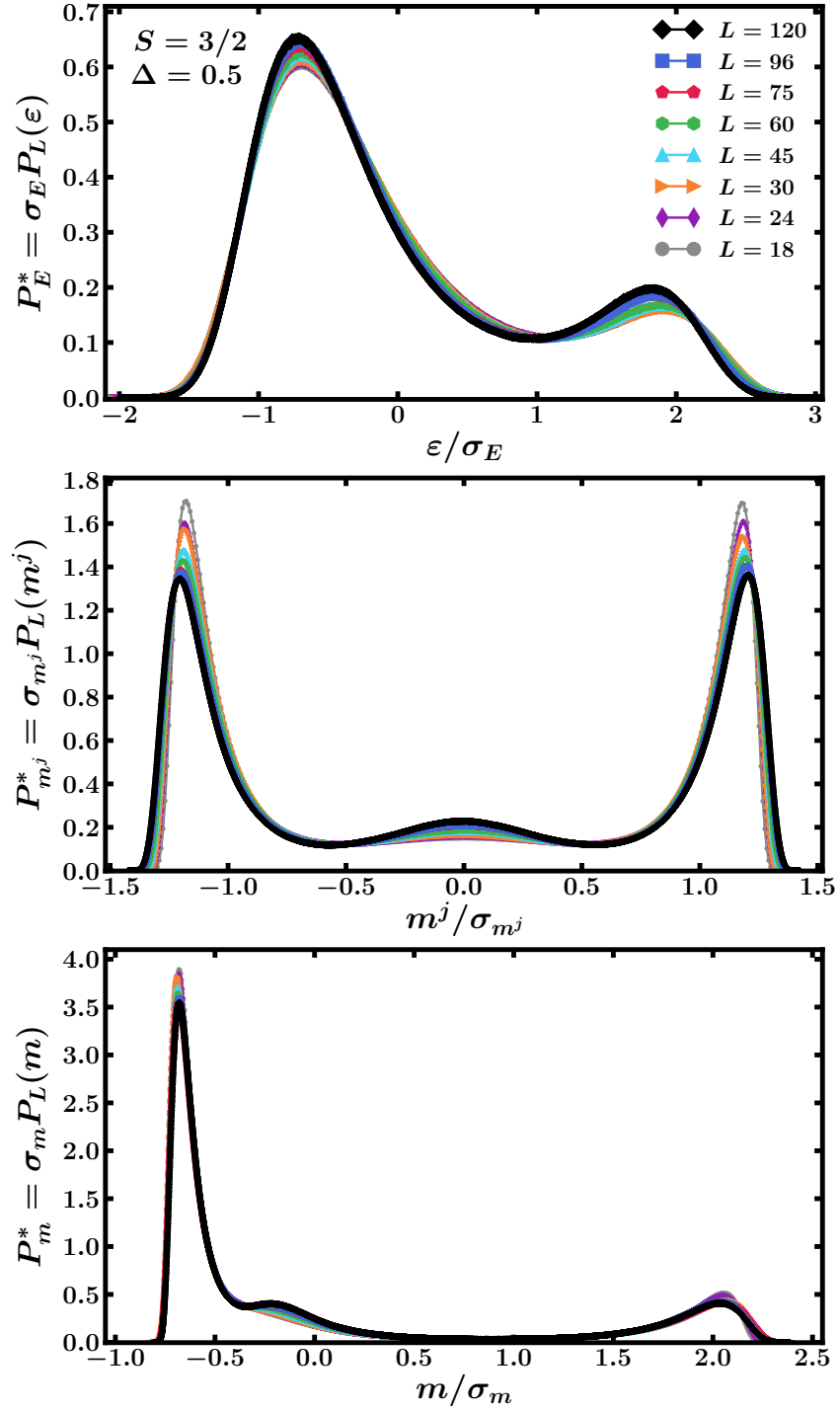


Fig. 4.8: Função distribuição de probabilidade da energia P_E^* (gráfico superior), magnetização média das três subredes $P_{m^j}^*$, $j = 1, 2, 3$ (gráfico central) e da magnetização total P_m^* (gráfico inferior), para o modelo BW de spin $S = 3/2$ e $\Delta = 0,5$ em vários valores de tamanhos de redes L . A legenda no gráfico superior também se aplica aos demais gráficos.

espera-se que desvios do caso simétrico ocorram à medida que aumentamos o valor do campo cristalino e, por isso, a abordagem de mistura de campos pode ser mais adequada para analisar o caráter das transições de fase.

Portanto, ao contrário do modelo BC, onde mostramos a mistura de campos apenas onde as correções de escala eram mais relevantes, aqui no modelo BW precisamos aplicar mesmo em baixos valores de campos cristalinos onde as FDPs da energia tornam-se diferentes. Uma vez que as distribuições de probabilidades foram calculadas com as redes maiores, que já estão no limite de L grande, os resultados estão no limite termodinâmico.

Como as distribuições das variáveis de escala $\mathcal{E}$ e $\mathcal{Q}$ são equivalentes na linha de transição de segunda ordem, conforme observado no modelo BC, e as distribuições de $\mathcal{Q}$ são aquelas que se modificam ao longo da linha de primeira ordem, optamos por utilizar apenas as distribuições da variável $\mathcal{Q}$ no presente modelo.

A Fig. 4.9 mostra as distribuições de probabilidade da variável de escala $\mathcal{Q}$ em vários valores de campos cristalinos para o modelo Baxter-Wu de spin $S = 1$ e $S = 3/2$, comparadas com a FDP universal da energia do mesmo modelo de spin $S = 1/2$. Em $\Delta = -2$, Fig. 4.9 superior, para o modelo de spin $S = 1$, existem vários valores de s , no caso $0,15 \leq s \leq 0,72$, em que as distribuições coincidem com a do spin $S = 1/2$, no modelo de spin $S = 3/2$ as distribuições concordam apenas para $s = 0,12$. Então, enquanto no caso de spin $S = 1$ é possível cruzar a linha de segunda ordem em várias direções, no caso $S = 3/2$ isso ocorre em um valor bem específico.

Conforme aumentamos o valor do campo cristalino, as possíveis direções de cruzamento da linha de transição, no caso spin $S = 1$, tornam-se mais reduzidas, assim como no caso $S = 3/2$, como poder ser notado na Fig. 4.9, gráficos central e inferior. Variando o parâmetro de mistura s até atingir um valor cuja FDP mais se aproxima daquela do caso $S = 1/2$, obtemos os valores otimizados $s = 0,155$ para $S = 1$ e $s = 0,133$ para $S = 3/2$, ambos no campo cristalino $\Delta = -1$. Em $\Delta = -0,5$ os valores cujas FDPs mais se aproximam da universal correspondem a $s = 0,165$ para $S = 1$ e $s = 0,1425$ para $S = 3/2$. Mas é possível verificar uma pequena diferença entre as FDPs dos spins mais altos em $\Delta = -0,5$ e aquela do spin $S = 1/2$.

Dos resultados acima para os modelos de spin $S = 1$ e $S = 3/2$, fica clara uma mudança de universalidade nos comportamentos críticos, mudança essa que se torna mais evidente para $\Delta \geq -0,5$. No entanto, é possível verificar da Fig. 4.9, gráfico inferior, que as distribuições dos modelos de spin $S = 1$ e $S = 3/2$, que antes eram bem diferentes, estão agora bem parecidas, indicando que spins diferentes pertencem a mesma classe de universalidade, como esperado. Com o intuito de verificar a extensão desse resultado entre os modelos de spin mais altos, apresentamos na Fig. 4.10 as distribuições de probabilidade da variável de escala $\mathcal{Q}$ para os campos cristalinos $\Delta = 0$, $\Delta = 0,5$ e $\Delta = 1$. Notamos que as distribuições continuam parecidas, embora para $\Delta = 1$ (e valores maiores) efeitos de tamanho finito adicionais pareçam estar presentes.

Diagrama de fase do modelo Baxter-Wu

O diagrama de fase do modelo BW de spin $S = 1$, com os dados da Tabela 4.2, está representado na Fig. 4.11. A linha cheia, linha de pontos tetracríticos (LTC), corresponde aos presentes resultados em comparação com alguns da literatura. Percebe-se que a linha de transição de segunda ordem é completamente determinada por valores de campos cristalinos negativos e positivos bem pequenos. Não conseguimos obter resultados confiáveis para $\Delta > 1,6$, porque, nessa região, o algoritmo de Metropolis tende a ficar mais tempo em determinadas configurações. Especialmente em redes e campos cristalinos maiores,

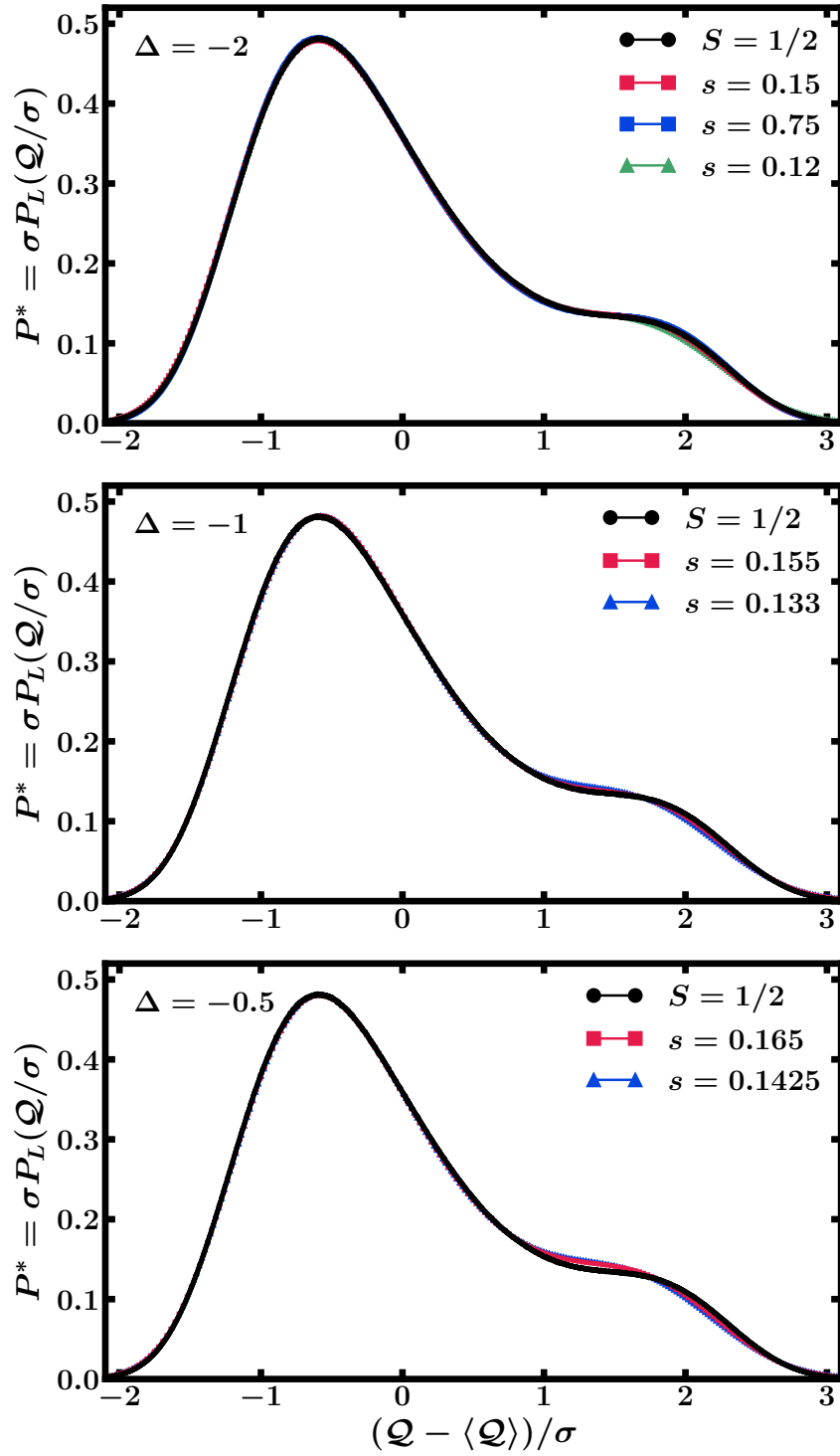


Fig. 4.9: Função distribuição de probabilidade universal da variável extensiva Q em certos valores da variável de mistura de campos s para o modelo Baxter-Wu de spin $S = 1$ (quadrados) e $S = 3/2$ (triângulos) nos campos cristalinos $\Delta = -2$, gráfico superior, $\Delta = -1$, gráfico central, e $\Delta = -0,5$, gráfico inferior. A FDP do modelo BW para spin $S = 1/2$ (círculos) está presente para comparação.

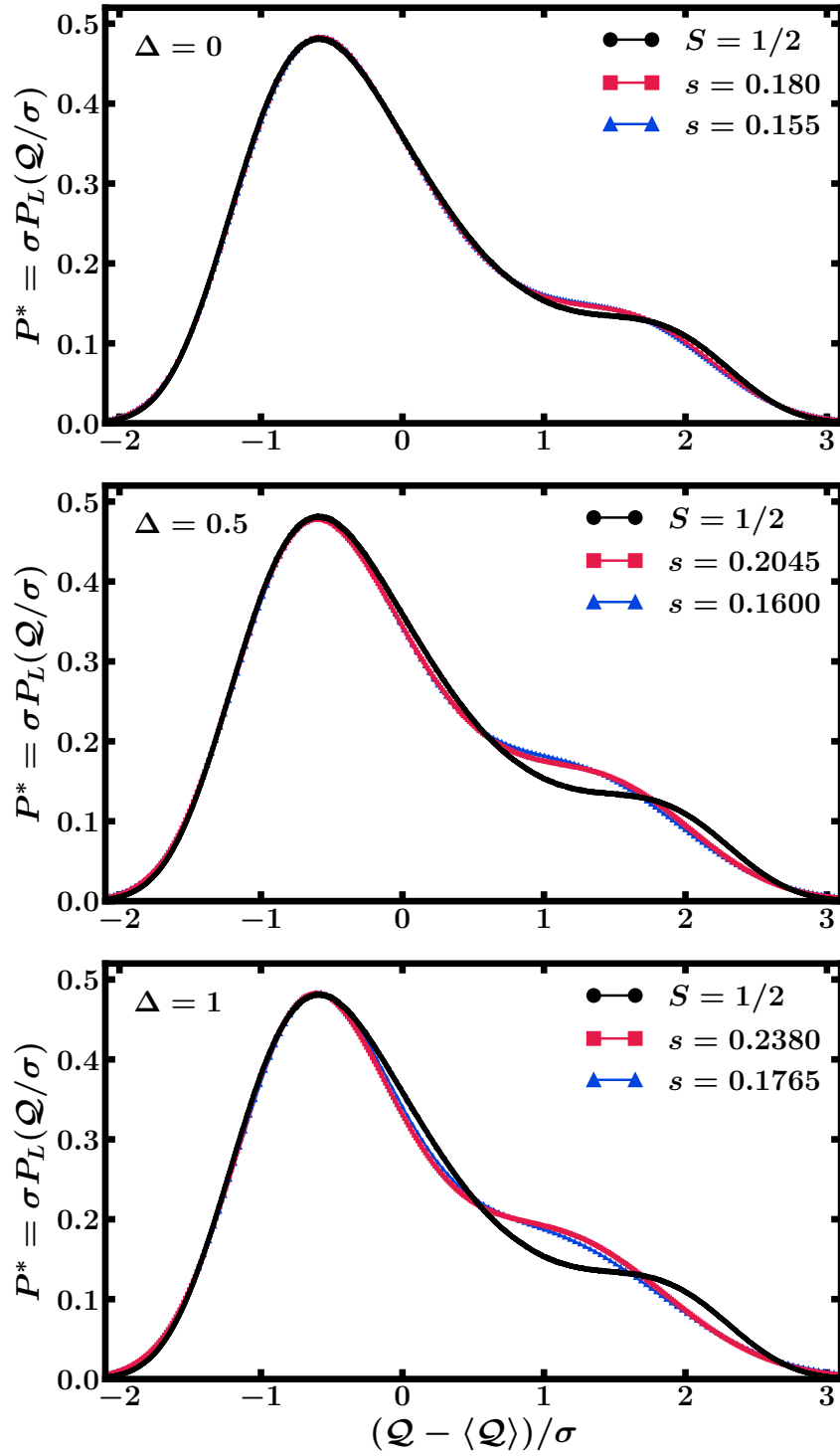


Fig. 4.10: Função distribuição de probabilidade universal da variável extensiva Q em alguns valores da variável de mistura de campos s para o modelo Baxter-Wu de spin $S = 1$ (quadrados) e $S = 3/2$ (triângulos) nos campos cristalinos $\Delta = 0$, gráfico superior, e $\Delta = 0,5$, gráfico central, e $\Delta = 1$, gráfico inferior. A FDP do modelo BW para spin $S = 1/2$ (círculos) está presente para comparação.

essa tendência do algoritmo torna-se tão extrema que as distribuições de probabilidades da energia começam a apresentar apenas um pico onde deveria ter dois (algo similar ocorre para as distribuições da magnetização das subredes). Por isso, para completude do diagrama de fases, os dados para $\Delta > 1,6$ foram tirados dos resultados de invariância conforme da Ref. [45].

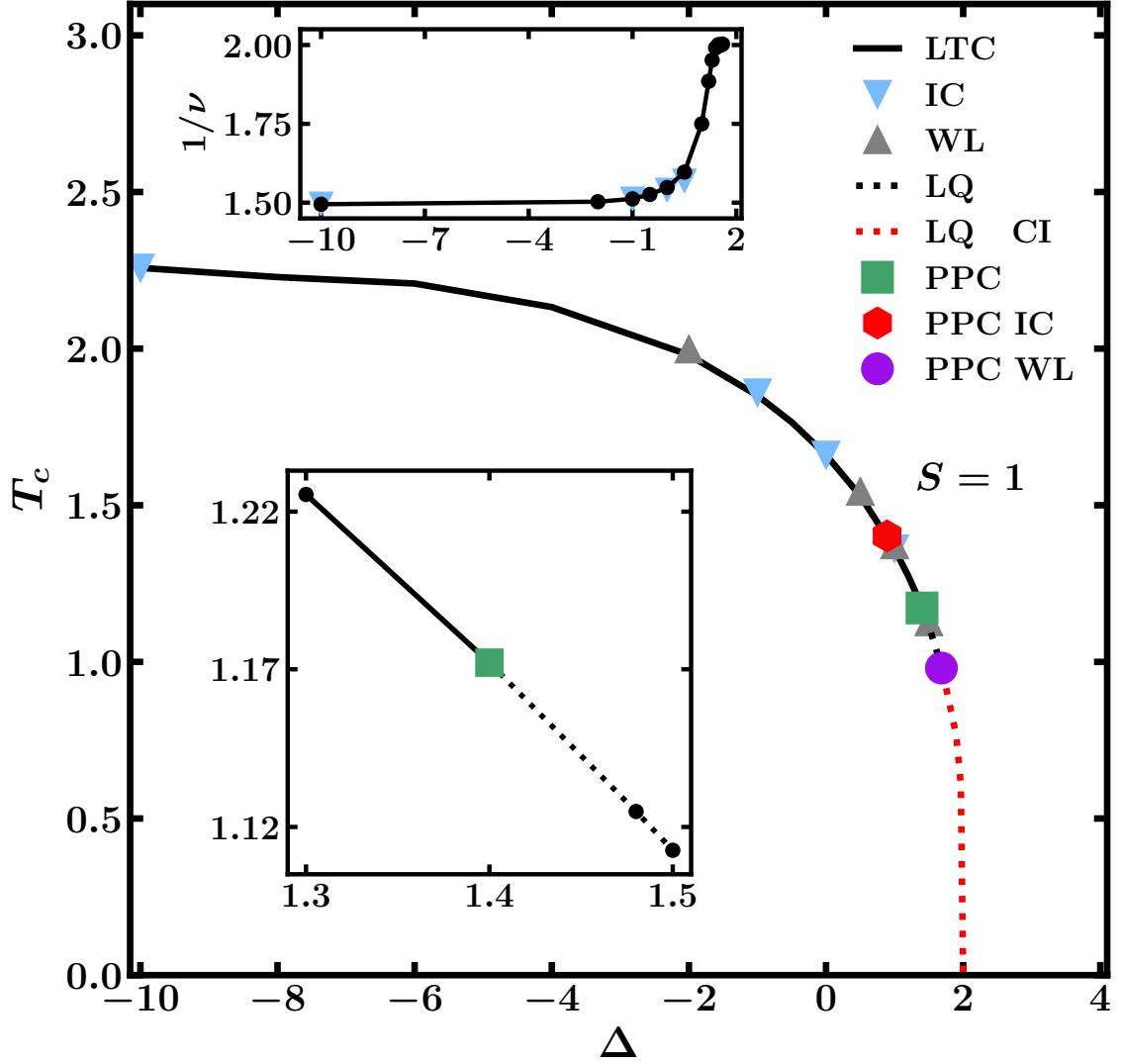


Fig. 4.11: Diagrama de fase do modelo BW de spin $S = 1$ no plano da temperatura T_c^L e do campo cristalino Δ . A linha cheia, linha tetracrítica (LTC), representa os presentes resultados para a transição de segunda ordem, em comparação com prévios valores de invariância conforme (IC) e Wang-Landau (WL). As linhas tracejadas, linhas quártuplas (LQ), representam transições de primeira ordem. O detalhe superior corresponde ao expoente crítico $1/\nu$ em função do campo cristalino, e o detalhe inferior é uma ampliação próxima do ponto pentacrítico (PPC).

Da Tabela 4.2 pode-se verificar que o valor de $1/\nu$ aumenta continuamente com o campo cristalino, como indicado também no detalhe superior da Fig. 4.11. O expoente $1/\nu$ tende a saturar em 2, que é a dimensão da rede, indicando que uma transição de primeira ordem ocorre nessa região. Esse é o único argumento que temos para usar os zeros DPE para localizar um possível ponto multicrítico. Por essa razão, podemos estimar, a partir dos zeros DPE, a localização do ponto pentacrítico (PPC) em $\Delta_{PPC} = 1,4$ e $T_{PPC} = 1,1721(2)$. Os correspondentes valores de WL [49] e IC [45] são, respectivamente,

$\Delta_{PPC}^{WL} = 1,68288(62)$ e $T_{PPC}^{WL} = 0,98030(10)$ e $\Delta_{PPC}^{IC} = 0,8902$ e $T_{PPC}^{IC} = 1,4020$. Embora o presente valor do ponto pentacrítico seja mais próximo daquele de WL que do método IC, o fato de todos esses valores serem diferentes mostra que essa região do diagrama de fase parece bastante difícil de ser analisada a partir de simulações de Monte Carlo, e mesmo calculando exatamente os autovalores da matriz de transferência definida em tiras infinitas com larguras finitas, como requerido pela abordagem de IC.

O detalhe inferior, na Fig. 4.11, mostra uma ampliação em torno do ponto pentacrítico obtido pelo zeros DPE. Aumentando o campo cristalino além do ponto pentacrítico, as transições se alteram para as de primeira ordem. Essa linha de transição de primeira ordem, linha de pontos quintuplos (LQ), termina em $\Delta = 2$.

O diagrama de fase global do modelo BW de spin $S = 3/2$ com dados da Tabela 4.2 está ilustrado na Fig. 4.12. A linha cheia, linha tetracrítica (LTC), corresponde às transições de segunda ordem, enquanto a linha tracejada, linha de pontos quintuplos (LQ), indica as transições de primeira ordem. As transições de fase alteram de segunda para de primeira ordem no ponto pentacrítico (PPC). Da evolução do expoente crítico com o campo cristalino, presente na Fig. 4.12, detalhe superior, e na Tabela 4.2, foi possível estimar, através dos zeros DPE, a localização do ponto pentacrítico em $\Delta_{PPC} = 1,6$ e $T_{PPC} = 3,4445(3)$. Um pouco diferente do valor obtido por invariância conforme [45] para o ponto pentacrítico de $\Delta_{PPC}^{IC} = 2,062$ e $T_{PPC}^{IC} = 2,9145$. O detalhe inferior mostra uma ampliação da região em torno do ponto pentacrítico.

Não foi possível obter distribuições confiáveis para $\Delta > 2$ porque, assim como no caso $S = 1$ e $\Delta > 1,6$, o algoritmo de Metropolis torna-se ineficiente em altos campos cristalinos e principalmente para redes grandes. Por isso, a parte do diagrama de fase para $\Delta > 2$ na Fig. 4.12 foi retirada dos resultados de invariância conforme (IC). Nesses resultados de invariância conforme, para mais além do ponto pentacrítico, Dias *et al.* [45] propõem dois cenários possíveis: um no qual a linha descontínua começa no ponto $T = 0$ e $\Delta = 3,25$ e termina na linha de segunda ordem, a qual se estende de $\Delta \rightarrow -\infty$ a $\Delta \rightarrow +\infty$; e outro em que a linha de primeira ordem corta a linha de segunda ordem num ponto tetracrítico terminal (PTT) e se estende até um novo ponto pentacrítico.

4.4 Conclusões

Neste capítulo, realizamos extensivas simulações de Monte Carlo no modelo Baxter-Wu de spin $S = 1/2$, $S = 1$ e $S = 3/2$, estes dois últimos na presença de um campo cristalino Δ . Utilizamos os zeros da distribuição de probabilidade da energia para obter o expoente crítico do comprimento de correlação e a temperatura crítica, e, dessa forma, descrever o diagrama de fase dos modelos no limite termodinâmico.

Inicialmente, estudamos o modelo Baxter-Wu de spin $S = 1/2$ com o intuito de testar o método dos zeros da distribuição de probabilidade da energia já que o mesmo possui solução exata. Utilizamos redes múltiplas de três para acomodar as três subredes do modelo. Os resultados do expoente crítico do comprimento de correlação e da temperatura crítica apresentam uma excelente concordância com os valores exatos e com resultados obtidos na literatura.

As distribuições de probabilidade do modelo BW em campos cristalinos negativos apresentam um pico maior do lado esquerdo e um ombro no lado direito. Já as distribuições de probabilidade da magnetização total apresentam dois picos de alturas diferentes, em contraste com aquelas das magnetizações das subredes que apresentam dois picos simétricos.

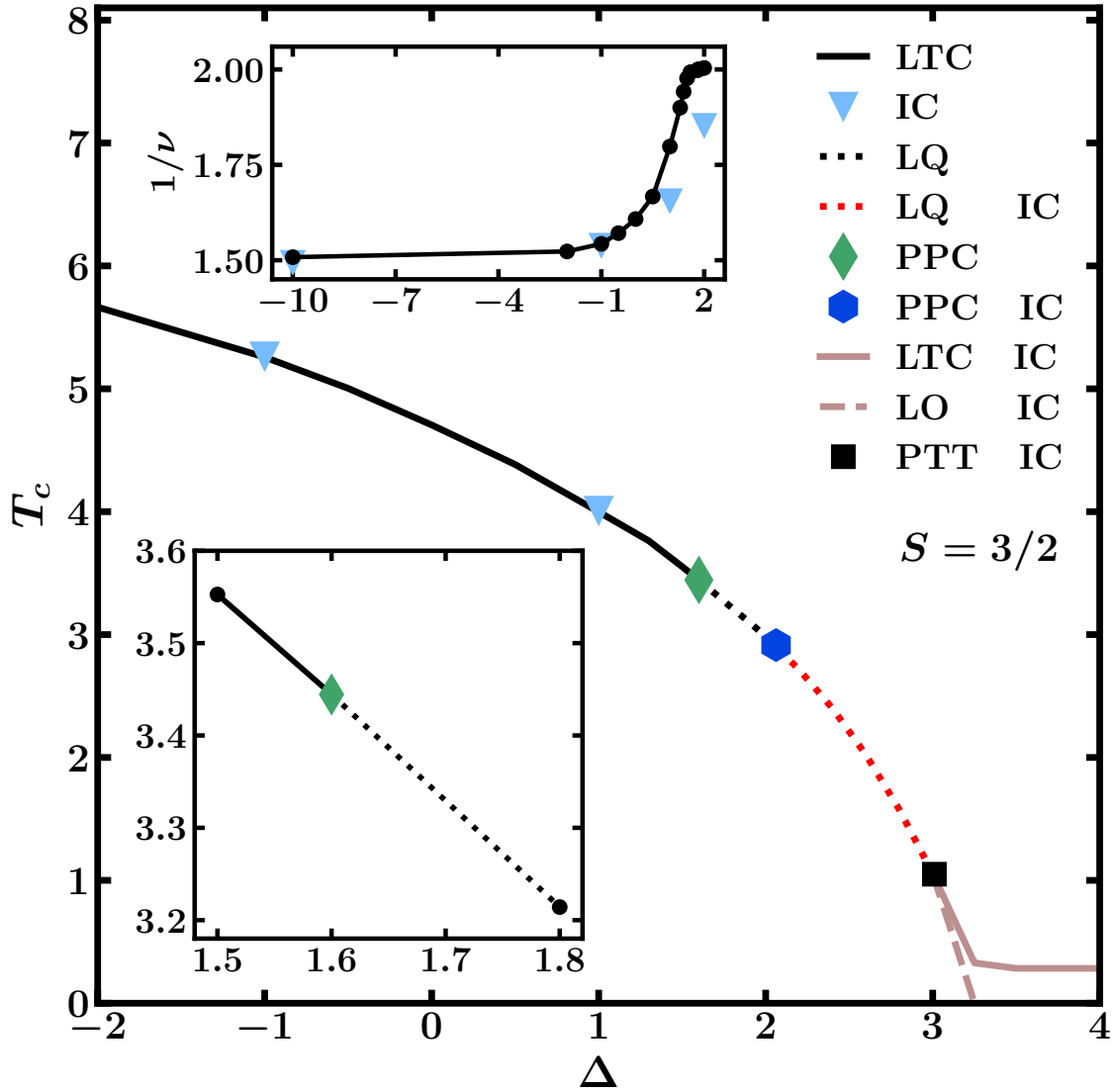


Fig. 4.12: Diagrama de fase do modelo BW de spin $S = 3/2$ no plano da temperatura T_c^L e do campo cristalino Δ . A linha cheia, linha tetracrítica (LTC), representa os presentes resultados para a transição de segunda ordem, em comparação com prévios valores de invariância conforme (IC). As linhas tracejadas (LQ e LO) representam transições de primeira ordem. O detalhe superior corresponde ao expoente crítico $1/\nu$ em função do campo cristalino, e o detalhe inferior é uma ampliação próxima do ponto pentacrítico (PPC). Resultados de IC mostram que a linha quártupla (LQ) se divide em uma linha óctupla (LO) e outra tetracrítica no ponto tetracrítico terminal (PTT).

Tanto as distribuições de probabilidade da energia e magnetizações, quanto as distribuições provenientes da mistura de campos, foram fundamentais para verificar a classe de universalidade dos modelos. Assim como no caso BC, verificamos que as distribuições da energia são mais robustas que as das magnetizações (total e de subredes) para descrever o comportamento universal dos modelos. Além disso, as distribuições da mistura de campos são mais adequadas para avaliar a universalidade, principalmente onde há fortes efeitos de tamanho finito e onde são necessárias correções de escala. Com a mistura de campos foi possível perceber que enquanto a universalidade entre o modelo de spin $S = 1/2$ e o de spin maiores, $S = 1$ e $S = 3/2$, permanece até $\Delta \leq -0,5$, a universalidade entre os modelos de spin $S = 1$ e $S = 3/2$ se estende até $\Delta \leq 1$.

Os expoentes críticos do modelo BW com campo cristalino se alteram continuamente ao longo da linha de transição de segunda ordem, até se estabilizarem próximo 2, que é a dimensão dos modelos. Esse resultado nos levou a localizar o ponto pentacrítico, no caso $S = 1$, em $\Delta_{PPC} = 1,4$ e $T_{PPC} = 1,1721(2)$, e no caso $S = 3/2$ em $\Delta_{PPC} = 1,6$ e $T_{PPC} = 3,4445(3)$.

Assim como verificado no modelo BC, em altos valores de campo cristalino o algoritmo de Metropolis não é muito eficiente em descrever o comportamento crítico do modelo BW em baixas temperaturas. Por isso, não foi possível obter resultados confiáveis para $\Delta > 1,6$ no caso $S = 1$ e para $\Delta > 2$ no caso $S = 3/2$. Portanto, foi possível descrever os diagramas de fase até um pouco além dos pontos pentacríticos. Nesse caso, um algoritmo híbrido seria de fundamental importância para a descrição completa dos diagramas de fase dos modelos.

5 Conclusão Geral

Iniciamos este trabalho através de uma revisão sucinta dos conceitos básicos de transições de fase. Mostramos as principais características dos modelos utilizados e os métodos aplicados para estudá-los.

O modelo Blume-Capel e Baxter-Wu de spins $S = 1$ e $S = 3/2$ na presença de um campo cristalino foram estudados no capítulo 3 e 4, respectivamente, através de extensivas simulações de Monte Carlo. No modelo Baxter-Wu utilizamos redes múltiplas de três para acomodar as três subredes do modelo. Uma vez que o modelo Ising e o modelo Baxter-Wu de spin $S = 1/2$ possuem solução exata, decidimos utilizá-los para testar a eficiência do método dos zeros DPE. De fato, o expoente crítico do comprimento de correlação e temperatura crítica obtidos de ambos modelos através da teoria de escala de tamanho finito, concordam muito bem com os valores exatos e com resultados advindos de outros métodos da literatura.

Diferente do modelo Ising e Blume-Capel que apresentam distribuição de probabilidade com um único pico, as distribuições de probabilidade do modelo BW, ao longo da linha segunda ordem, apresentam um pico maior do lado esquerdo e um ombro no lado direito. Além disso, as distribuições de probabilidade da magnetização total do modelo BW apresentam dois picos de alturas diferentes, enquanto as distribuições da magnetização das subredes apresentam dois picos simétricos assim como a magnetização total do modelo Ising e Blume-Capel.

As distribuições de probabilidade da energia e magnetização, tanto aquelas advindas dos zeros DPE quanto da abordagem de mistura de campos, permitiram avaliar a classe de universalidade dos modelos no limite termodinâmico e identificar com precisão razoável os pontos multicríticos. Percebemos que as distribuições de probabilidade da energia são mais eficazes na descrição do comportamento universal dos modelos do que a distribuição da magnetização. Notamos ainda que as distribuições de probabilidades provenientes da mistura de campos são mais convenientes para descrever a universalidade dos modelos, principalmente onde há fortes efeitos de tamanho finito e onde são necessárias correções de escala. A universalidade entre o modelo Ising e o modelo BC de spin $S = 1$ e $S = 3/2$ ocorrem em $\Delta \leq 1,972$ e $\Delta \leq 1,987$, respectivamente. Com o aumento do campo cristalino em direção aos pontos multicríticos, as distribuições de probabilidade universais com mistura de campos tendem a ficar restritas aos valores de r e s que respeitam a relação $rs = 1$. Com a mistura de campos foi possível perceber que enquanto a universalidade entre o modelo BW de spin $S = 1/2$ e o de spin maiores, $S = 1$ e $S = 3/2$, permanece até $\Delta \leq -0,5$, a universalidade entre os modelos de spin $S = 1$ e $S = 3/2$ se estende até $\Delta \leq 1$.

Os expoentes críticos do modelo BC com campo cristalino praticamente não se alteram ao longo da linha de segunda ordem, apenas bem próximo dos pontos multicríticos ocorrem alterações significativas, tendendo a um valor próximo de 2, que é a dimensão da rede. Utilizamos o valor do expoente crítico e o limite da universalidade entre os modelos para localizarmos o ponto tricrítico em $\Delta_{PTC} = 1,97(2)$ e $T_{PTC} = 0,5928(3)$, no caso BC de spin $S = 1$, e o ponto crítico terminal duplo do modelo BC de spin $S = 3/2$ em $\Delta_{CTD} = 1,987(1)$ e $T_{CTD} = 0,5886(6)$.

Os expoentes críticos do modelo BW com campo cristalino se alteram continuamente

ao longo da linha de transição de segunda ordem, até se estabilizarem próximo 2 indicando transições de fase de primeira ordem. Esse resultado nos levou a localizar o ponto pentacrítico, no caso $S = 1$, em $\Delta_{PPC} = 1,4$ e $T_{PPC} = 1,1721(2)$, e no caso $S = 3/2$ em $\Delta_{PPC} = 1,6$ e $T_{PPC} = 3,4445(3)$.

Em altos valores de campos cristalinos, o algoritmo de Metropolis não é muito eficiente em descrever o comportamento crítico dos modelos. Portanto, não foi possível descrever os diagramas de fase muito além dos pontos multicríticos. Nesse caso, um algoritmo híbrido, como o algoritmo de Metropolis associado ao algoritmo de Wolff, seria de fundamental importância para a descrição completa dos diagramas de fase dos modelos.

Como ficou evidente ao longo do capítulo 4, inúmeros métodos ainda divergem no que se refere à localização do ponto pentacrítico do modelo BW de spin $S = 1$. Além disso, o diagrama de fases do modelo BW de spin $S = 3/2$ ainda não está bem caracterizado. Fica claro que, com o intuito de melhor caracterizar a linha de primeira ordem, e assim identificar com maior precisão os pontos multicríticos, simulações adicionais, com mais passos de Monte Carlo, devem ser feitas nessa região.

Adicionalmente, para se evitar os problemas com o algoritmo de Metropolis para campos altos, citados nos capítulos 3 e 4, especialmente no caso do modelo BW, uma implementação de algoritmo híbridos seria muito bem vinda.

REFERÊNCIAS

- [1] H. E. Stanley. *Introduction to phase transition and critical phenomena*. Oxford University Press, 1971.
- [2] S. R. A. Salinas. *Introdução à física estatística*. Edusp, 1999.
- [3] J. M. Yeomans. *Statistical mechanics of phase transitions*. Clarendon Press, 1992.
- [4] B. Berche, M. Henkel, and R. Kenna. Fenômenos críticos: 150 anos desde cagniard de la tour. *Revista Brasileira de Ensino de Física*, 31:2602–1, 2009.
- [5] T. Andrews. The bakerian lecture: On the continuity of the gaseous and liquid states of matter. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London*, 159:575–590, 1869.
- [6] K. G. Wilson. Renormalization group and critical phenomena. i. renormalization group and the kadanoff scaling picture. *Physical review B*, 4(9):3174, 1971.
- [7] K. G. Wilson and J. Kogut. The renormalization group and the epsilon expansion. *Physics reports*, 12(2):75–199, 1974.
- [8] E. Ising. Contribution to the theory of ferromagnetism. *Z. Phys*, 31(1):253–258, 1925.
- [9] R. Peierls. On ising’s model of ferromagnetism. In *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, volume 32, pages 477–481. Cambridge University Press, 1936.
- [10] L. Onsager. Crystal statistics. i. a two-dimensional model with an order-disorder transition. *Physical Review*, 65(3-4):117, 1944.
- [11] C. H. Back, C. Würsch, A. Vaterlaus, U. Ramsperger, U. Maier, and D. Pescia. Experimental confirmation of universality for a phase transition in two dimensions. *Nature*, 378(6557):597–600, 1995.
- [12] R. Coldea, D. A. Tennant, E. M. Wheeler, E. Wawrzynska, D. Prabhakaran, M. Telling, K. Habicht, P. Smeibidl, and K. Kiefer. Quantum criticality in an ising chain: experimental evidence for emergent e8 symmetry. *Science*, 327(5962):177–180, 2010.
- [13] S. Bornholdt. Expectation bubbles in a spin model of markets: Intermittency from frustration across scales. *International Journal of Modern Physics C*, 12(05):667–674, 2001.
- [14] S. Torquato. Toward an ising model of cancer and beyond. *Physical biology*, 8(1):015017, 2011.
- [15] T. C. Schelling. Dynamic models of segregation. *Journal of mathematical sociology*, 1(2):143–186, 1971.

- [16] M. Blume. Theory of the first-order magnetic phase change in UO_2 . *Physical Review*, 141(2):517, 1966.
- [17] H. W. Capel. On the possibility of first-order phase transitions in Ising systems of triplet ions with zero-field splitting. *Physica*, 32(5):966–988, 1966.
- [18] H. W. Capel. On the possibility of first-order transitions in Ising systems of triplet ions with zero-field splitting ii. *Physica*, 33(2):295–331, 1967.
- [19] H. W. Capel. On the possibility of first-order transitions in Ising systems of triplet ions with zero-field splitting iii. *Physica*, 37(3):423–441, 1967.
- [20] C. Domb. *Phase transitions and critical phenomena*. Elsevier, 2000.
- [21] W. Selke and J. Oitmaa. Monte Carlo study of mixed-spin $s=(1/2, 1)$ Ising ferrimagnets. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 22(7):076004, 2010.
- [22] J. A. Plascak, J. G. Moreira, et al. Mean field solution of the general spin Blume-Capel model. *Physics Letters A*, 173(4-5):360–364, 1993.
- [23] S. Moss de Oliveira, P. M. C. De Oliveira, and F. C. de Sá Barreto. The spin- s Blume-Capel RG flow diagram. *Journal of statistical physics*, 78:1619–1627, 1995.
- [24] J. C. Xavier, F. C. Alcaraz, D. P. Lara, and J. A. Plascak. Critical behavior of the spin- $3/2$ Blume-Capel model in two dimensions. *Physical Review B*, 57(18):11575, 1998.
- [25] J. A. Plascak and D. P. Landau. Universality and double critical end points. *Physical Review E*, 67(1):015103, 2003.
- [26] C. José da Silva, A. A. Caparica, and J. A. Plascak. Wang-Landau Monte Carlo simulation of the Blume-Capel model. *Physical Review E*, 73(3):036702, 2006.
- [27] A. Malakis, A. N. Berker, I. A. Hadjiagapiou, and N. G. Fytas. Strong violation of critical phenomena universality: Wang-Landau study of the two-dimensional Blume-Capel model under bond randomness. *Physical Review E*, 79(1):011125, 2009.
- [28] A. Malakis, A. N. Berker, I. A. Hadjiagapiou, N. G. Fytas, and T. Papakonstantinou. Multicritical points and crossover mediating the strong violation of universality: Wang-Landau determinations in the random-bond $d=2$ Blume-Capel model. *Physical Review E*, 81(4):041113, 2010.
- [29] W. Kwak, J. Jeong, J. Lee, and Dong-Hee Kim. First-order phase transition and tricritical scaling behavior of the Blume-Capel model: A Wang-Landau sampling approach. *Physical Review E*, 92(2):022134, 2015.
- [30] E. Costabile, J. R. Viana, J. R. de Sousa, and J. A. Plascak. The general-spin Blume-Capel model: A study of the multicritical behavior using effective-field theory. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 393:297–303, 2014.
- [31] J. Zierenberg, N. G. Fytas, and W. Janke. Parallel multicanonical study of the three-dimensional Blume-Capel model. *Physical Review E*, 91(3):032126, 2015.

- [32] J. Zierenberg, N. G. Fytas, M. Weigel, W. Janke, and A. Malakis. Scaling and universality in the phase diagram of the 2d blume-capel model. *The European Physical Journal Special Topics*, 226(4):789–804, 2017.
- [33] D. A. Dias, F. W. S. Lima, and J. A. Plascak. Generalized gibbs phase rule and multicriticality applied to magnetic systems. *Entropy*, 24(1):63, 2021.
- [34] D. W. Wood and H. P. Griffiths. A self dual relation for an ising model with triplet interactions. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, 5(18):L253, 1972.
- [35] R. J. Baxter and F. Y. Wu. Exact solution of an ising model with three-spin interactions on a triangular lattice. *Physical Review Letters*, 31(21):1294, 1973.
- [36] R. J. Baxter and F. Y. Wu. Ising model on a triangular lattice with three-spin interactions. i. the eigenvalue equation. *Australian Journal of Physics*, 27(3):357–368, 1974.
- [37] R. J. Baxter. *Exactly solved models in statistical mechanics*. Academic, New York, 1982.
- [38] A. N. Berker, S. Ostlund, and F. A. Putnam. Renormalization-group treatment of a potts lattice gas for krypton adsorbed onto graphite. *Physical Review B*, 17(9):3650, 1978.
- [39] T. Antal, P. L. Krapivsky, and S. Redner. Dynamics of social balance on networks. *Physical Review E*, 72(3):036121, 2005.
- [40] F. Radicchi, D. Vilone, S. Yoon, and H. Meyer-Ortmanns. Social balance as a satisfiability problem of computer science. *Physical Review E*, 75(2):026106, 2007.
- [41] F. C. Alcaraz and J. C. Xavier. Conformal invariance studies of the Baxter-Wu model and a related site-colouring problem. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 30(8):L203, 1997.
- [42] F. C. Alcaraz and J. C. Xavier. Critical and off-critical studies of the Baxter-Wu model with general toroidal boundary conditions. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 32(11):2041, 1999.
- [43] E. Domany and E. K. Riedel. Phase transitions in two-dimensional systems. *Journal of Applied Physics*, 49(3):1315–1320, 1978.
- [44] Fa-Yueh Wu. The potts model. *Reviews of modern physics*, 54(1):235, 1982.
- [45] D. A. Dias, J. C. Xavier, and J. A. Plascak. Critical behavior of the spin-1 and spin-3/2 Baxter-Wu model in a crystal field. *Physical Review E*, 95(1):012103, 2017.
- [46] B. Nienhuis, A. N. Berker, E. K. Riedel, and M. Schick. First-and second-order phase transitions in potts models: renormalization-group solution. *Physical Review Letters*, 43(11):737, 1979.
- [47] W. Kinzel, E. Domany, and A. Aharony. Finite size scaling analysis of the dilute Baxter-Wu model. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 14(10):L417, 1981.

- [48] M. L. M. Costa, J. C. Xavier, and J. A. Plascak. Phase diagram and critical behavior of the spin-1 Baxter-Wu model with a crystal field. *Physical Review B*, 69(10):104103, 2004.
- [49] L. N. Jorge, P. H. L. Martins, C. J. DaSilva, L. S. Ferreira, and A. A. Caparica. An entropic simulational study of the spin-1 Baxter-Wu model in a crystal field. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 576:126071, 2021.
- [50] M. L. M. Costa and J. A. Plascak. Monte carlo study of the spin-1 baxter-wu model. *Brazilian journal of physics*, 34:419–421, 2004.
- [51] M. L. M. Costa and J. A. Plascak. Monte carlo study of the spin-1 baxter-wu model in a crystal field. In *Journal of Physics: Conference Series*, volume 686, page 012011. IOP Publishing, 2016.
- [52] L. N. Jorge, L. S. Ferreira, and A. A. Caparica. On the order of the phase transition in the spin-1 Baxter-Wu model. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 542:123417, 2020.
- [53] N. G. Fytas, A. Vasilopoulos, E. Vatansever, A. Malakis, and M. Weigel. Multicanonical simulations of the 2d spin-1 baxter-wu model in a crystal field. In *Journal of Physics: Conference Series*, volume 2207, page 012008. IOP Publishing, 2022.
- [54] A. Vasilopoulos, N. G. Fytas, E. Vatansever, A. Malakis, and M. Weigel. Universality in the two-dimensional dilute baxter-wu model. *Physical Review E*, 105(5):054143, 2022.
- [55] A. R. S. Macêdo, A. Vasilopoulos, M. Akritidis, J.A. Plascak, N. G. Fytas, and M. Weigel. Two-dimensional dilute baxter-wu model: Transition order and universality. *Physical Review E*, 108(2):024140, 2023.
- [56] B. V. D. Costa, L. A. D. S. Mól, and J. C. S. Rocha. Energy probability distribution zeros: A route to study phase transitions. *Computer Physics Communications*, 216:77–83, 2017.
- [57] B. V. Costa, L. A. S. Mól, and J. C. S. Rocha. A new algorithm to study the critical behavior of topological phase transitions. *Brazilian Journal of Physics*, 49(2):271–276, 2019.
- [58] R. G. M. Rodrigues, B. V. Costa, and L. A. S. Mól. Moment-generating function zeros in the study of phase transitions. *Physical Review E*, 104(6):064103, 2021.
- [59] D. Landau and K. Binder. *A guide to Monte Carlo simulations in statistical physics*. Cambridge university press, 2021.
- [60] N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, A. H. Teller, and E. Teller. Equation of state calculations by fast computing machines. *The journal of chemical physics*, 21(6):1087–1092, 1953.
- [61] A. D. Bruce. Probability density functions for collective coordinates in ising-like systems. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, 14(25):3667, 1981.

- [62] K. Binder. Finite size scaling analysis of ising model block distribution functions. *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter*, 43:119–140, 1981.
- [63] A. D. Bruce and N. B. Wilding. Scaling fields and universality of the liquid-gas critical point. *Physical review letters*, 68(2):193, 1992.
- [64] N. B. Wilding and A. D. Bruce. Density fluctuations and field mixing in the critical fluid. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 4(12):3087, 1992.
- [65] N. B. Wilding. Critical-point and coexistence-curve properties of the lennard-jones fluid: A finite-size scaling study. *Physical Review E*, 52(1):602, 1995.
- [66] N. B. Wilding and P. Nielaba. Tricritical universality in a two-dimensional spin fluid. *Physical Review E*, 53(1):926, 1996.
- [67] P. H. L. Martins and J. A. Plascak. Probability distribution of the order parameter. *Brazilian Journal of Physics*, 34:433–437, 2004.
- [68] J. A. Plascak and P. H. L. Martins. Probability distribution function of the order parameter: Mixing fields and universality. *Computer Physics Communications*, 184(2):259–269, 2013.
- [69] S. S. Martinos, A. Malakis, and I. Hadjiagapiou. Critical finite-size scaling of magnetization distribution function for baxter–wu model. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 331(1-2):182–188, 2004.
- [70] N. Schreiber and J. Adler. Monte carlo study of the pure and dilute Baxter-Wu model. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 38(33):7253, 2005.
- [71] I. N. Velonakis and S. S. Martinos. Scaling properties of the baxter–wu model. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 390(20):3369–3384, 2011.
- [72] I. N. Velonakis. Critical energy distribution function of the baxter–wu model. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 399:171–188, 2014.
- [73] M. E. J Newman and G. T. Barkema. *Monte Carlo methods in statistical physics*. Clarendon Press, 1999.
- [74] K. Binder, D. W. Heermann, and K. Binder. *Monte Carlo simulation in statistical physics*, volume 8. Springer, 1992.
- [75] J. P. Valleau and D. N. Card. Monte carlo estimation of the free energy by multistage sampling. *The Journal of Chemical Physics*, 57(12):5457–5462, 1972.
- [76] A. M. Ferrenberg and R. H. Swendsen. New monte carlo technique for studying phase transitions. *Physical Review Letters*, 63(15):1658, 1989.
- [77] M. E. J Newman. Power laws, pareto distributions and zipf’s law. *Contemporary physics*, 46(5):323–351, 2005.
- [78] J.D. van der Waals. *Over de Continuïteit van den Gas-en Vloeistoestand*. PhD thesis, Leiden, 1873.

- [79] P. Weiss. L'hypothèse du champ moléculaire et la propriété ferromagnétique. *J. Phys. Theor. Appl.*, 6(1):661–690, 1907.
- [80] L. Landau. The theory of phase transitions. *Nature*, 138(3498):840–841, 1936.
- [81] H. E. Stanley. Scaling, universality, and renormalization: Three pillars of modern critical phenomena. *Reviews of modern physics*, 71(2):S358, 1999.
- [82] M. E. Fisher and M. N. Barber. Scaling theory for finite-size effects in the critical region. *Physical Review Letters*, 28(23):1516, 1972.
- [83] D. P. Landau. Computer simulation studies of critical phenomena. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 205(1-3):41–64, 1994.
- [84] V. Privman. *Finite size scaling and numerical simulation of statistical systems*. World Scientific, 1990.
- [85] A. M. Ferrenberg, J. Xu, and D. P. Landau. Pushing the limits of monte carlo simulations for the three-dimensional ising model. *Physical Review E*, 97(4):043301, 2018.
- [86] M. E. Fisher. in: *W. Brittin (Ed.), Lectures in Theoretical Physics: Volume VII C - Statistical Physics, Weak Interactions, in: Field Theory : Lectures Delivered at the Summer Institute for Theoretical Physics, University of Colorado, Boulder, 1964, vol. 7*. University of Colorado Press, Boulder, 1965.
- [87] J. J. Rehr and N. D. Mermin. Revised scaling equation of state at the liquid-vapor critical point. *Physical Review A*, 8(1):472, 1973.
- [88] M. Galassi, J. Davies, J. Theiler, B. Gough, G. Jungman, P. Alken, M. Booth, F. Rossi, and R. Ulerich. *GNU scientific library*. Network Theory Limited Godalming, 2002.
- [89] A. M. Ferrenberg and R. H. Swendsen. New monte carlo technique for studying phase transitions. *Physical review letters*, 61(23):2635, 1988.
- [90] P. Butera and M. Pernici. The blume–capel model for spins $s = 1$ and $3/2$ in dimensions $d = 2$ and 3 . *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 507:22–66, 2018.
- [91] J. A. Plascak, A. M. Ferrenberg, and D. P. Landau. Cluster hybrid monte carlo simulation algorithms. *Physical Review E*, 65(6):066702, 2002.
- [92] B. Nienhuis. Analytical calculation of two leading exponents of the dilute potts model. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 15(1):199, 1982.

ANEXOS

Anexo A – Artigo publicado na revista Physical Review E

Two-dimensional dilute Baxter-Wu model: Transition order and universality

A. R. S. Macêdo^{1,2}, A. Vasilopoulos³, M. Akritidis³, J. A. Plascak^{1,4,5}, N. G. Fytas^{3,6,*} and M. Weigel⁷

¹Departamento de Física, Instituto de Ciências Exatas,

Universidade Federal de Minas Gerais, C.P. 702, Belo Horizonte 65919-050, MG, Brazil

²Instituto Federal do Maranhão - Campus Imperatriz, Imperatriz 65919-050, MA, Brazil

³Centre for Fluid and Complex Systems, Coventry University, Coventry CV1 5FB, United Kingdom

⁴Universidade Federal da Paraíba, Centro de Ciências Exatas e da Natureza - Campus I,

Departamento de Física - CCEN Cidade Universitária, João Pessoa 58051-970, PB, Brazil

⁵Center for Simulation Physics, University of Georgia, Athens, Georgia 30602, USA

⁶Department of Mathematical Sciences, University of Essex, Colchester CO4 3SQ, United Kingdom

⁷Institut für Physik, Technische Universität Chemnitz, 09107 Chemnitz, Germany



(Received 22 April 2023; accepted 7 August 2023; published 25 August 2023)

We investigate the critical behavior of the two-dimensional spin-1 Baxter-Wu model in the presence of a crystal-field coupling Δ with the goal of determining the universality class of transitions along the second-order part of the transition line as one approaches the putative location of the multicritical point. We employ extensive Monte Carlo simulations using two different methodologies: (i) a study of the zeros of the energy probability distribution, closely related to the Fisher zeros of the partition function, and (ii) the well-established multicanonical approach employed to study the probability distribution of the crystal-field energy. A detailed finite-size scaling analysis in the regime of second-order phase transitions in the (Δ, T) phase diagram supports previous claims that the transition belongs to the universality class of the four-state Potts model. For positive values of Δ , we observe the presence of strong finite-size effects, indicative of crossover effects due to the proximity of the first-order part of the transition line. Finally, we demonstrate how a combination of cluster and heat-bath updates allows one to equilibrate larger systems, and we demonstrate the potential of this approach for resolving the ambiguities observed in the regime of $\Delta \gtrsim 0$.

DOI: [10.1103/PhysRevE.108.024140](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.108.024140)

I. INTRODUCTION

Most of the commonly studied spin models of statistical mechanics such as the Ising and Potts or $O(n)$ models are spin-inversion symmetric. A notable exception to this rule is the Baxter-Wu (BW) model [1,2] that was originally introduced by Wood and Griffiths [3,4]. The commonly studied version is defined on the triangular lattice with N sites and has the Hamiltonian function

$$\mathcal{H}_{\text{BW}} = -J \sum_{\langle ijk \rangle} \sigma_i \sigma_j \sigma_k, \quad (1)$$

where $J > 0$ denotes a ferromagnetic exchange coupling. The sum $\langle ijk \rangle$ extends over all elementary triangles, and $\sigma_i = \pm 1$ are Ising-like spin-1/2 variables. The presence of three-spin interactions leads to the mentioned violation of spin-inversion symmetry, and it results in a fourfold degeneracy of the ground state: there is one ferromagnetic state with

all spins up, and three ferrimagnetic states with down spins in two sublattices and up spins in the third. The triangular lattice can be decomposed into three sublattices, A, B, and C, as shown in Fig. 1. Note that the model of Eq. (1) is self-dual [3,4], resulting in the same critical temperature as that of the spin-1/2 Ising model on the square lattice, i.e., $k_B T_c/J = 2/\ln(\sqrt{2} + 1) = 2.269185 \dots$, where k_B denotes Boltzmann's constant.

An exact solution of the model was provided early on by Baxter and Wu [1,2], supplying the critical exponents $\alpha = 2/3$, $\nu = 2/3$, and $\gamma = 7/6$. In the following, it was also shown that its critical behavior corresponds to a conformal field theory with central charge $c = 1$ [5,6]. Due to the four-fold symmetry of the ground state, it is expected that the critical behavior of the $q = 4$ model Potts and of the Baxter-Wu model belong to the same universality class [7]. While, therefore, the critical exponents of the two models are identical, the same does not apply to the scaling corrections: the four-state Potts model exhibits logarithmic corrections with system size [8], whereas the Baxter-Wu model has power-law corrections with a correction-to-scaling exponent $\omega = 2$ [5,6]. Recently, the model has attracted renewed attention, and various aspects of its critical behavior have been studied in substantial detail [9–17].

A natural generalization of the Baxter-Wu model (1) results from the consideration of three spin orientations

*nikolaos.fytas@coventry.ac.uk

Published by the American Physical Society under the terms of the [Creative Commons Attribution 4.0 International](https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/) license. Further distribution of this work must maintain attribution to the author(s) and the published article's title, journal citation, and DOI.

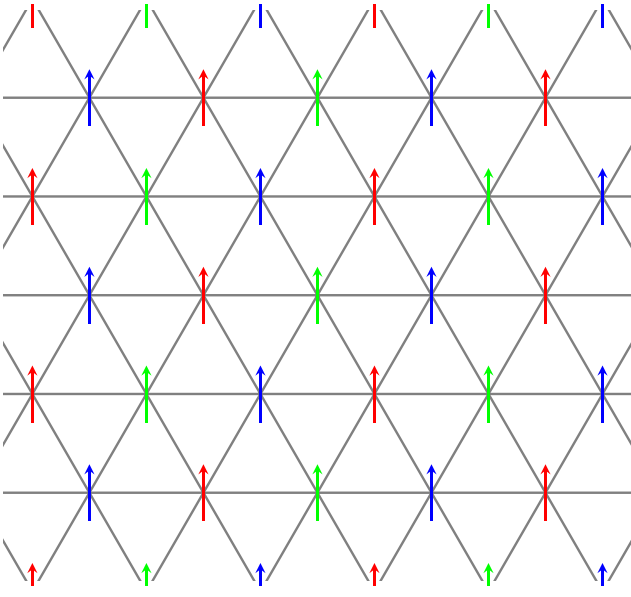


FIG. 1. Representation of the triangular lattice of the Baxter-Wu model as a superposition of three sublattices, A, B, and C. Each sublattice corresponds to spins of the same color. The spins are shown in the ferromagnetic ground state.

$\sigma_i = \{-1, 0, 1\}$ and the inclusion of an additional crystal-field (or single-ion anisotropy) coupling Δ . The resulting Hamiltonian then reads

$$\mathcal{H} = -J \sum_{(ijk)} \sigma_i \sigma_j \sigma_k + \Delta \sum_i \sigma_i^2 = E_J + \Delta E_\Delta, \quad (2)$$

where E_J and E_Δ denote the contributions of the exchange and the crystal field, respectively, to the total energy. Note that in the following we will use reduced units where $J = 1$ as well as $k_B = 1$. This choice of units follows the past notation of some of the present authors implementing multicanonical simulations on spin-1 Blume-Capel and Baxter-Wu models, see the discussion in Sec. III. Although still rather simple, for this spin-1 model there exists no exact solution, except for the case $\Delta \rightarrow -\infty$, where only configurations with $\sigma_i = \pm 1$ are allowed and the pure spin-1/2 Baxter-Wu model is recovered, as well as for zero temperature, where the four ordered phases coexist with the paramagnetic phase in a multiphase point at $\Delta/J = 2$ (accordingly, no transition is observed for $\Delta/J > 2$).

Based on the analogy between the Baxter-Wu and the diluted Potts model [18], but also on a series of more recent results [19–21], it is now well established that the phase diagram of the spin-1 Baxter-Wu model in the (Δ, T) plane includes a multicritical point separating first- from second-order transition regimes. This is in contrast to an earlier prediction by finite-size scaling applied to transfer-matrix calculations, where a continuous transition only occurs in the limit $\Delta \rightarrow -\infty$ [22]. In this respect, the model resembles the well-known Blume-Capel ferromagnet [23], which exhibits a phase diagram with ordered ferromagnetic and disordered paramagnetic phases separated by a transition line with first- and second-order segments (the latter in the Ising universality class) connected by a tricritical point, whose location is known

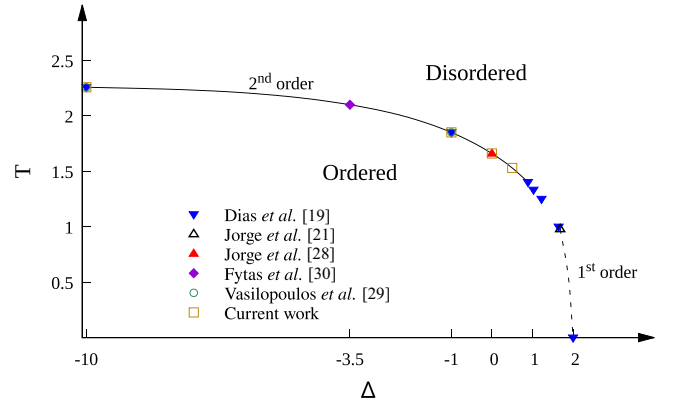


FIG. 2. Phase diagram of the two-dimensional spin-1 Baxter-Wu model including several estimates of transition points. The black dashed and continuous lines correspond to first- and second-order phase transitions, respectively. The intermediate regime between the two pentacritical point estimations by Dias *et al.* [19] (Δ_{pp}, T_{pp}) $\approx$ (0.8902, 1.4) and Jorge *et al.* [21] (Δ_{pp}, T_{pp}) $\approx$ (1.68288(62), 0.98030(10)) is not crossed by a line as its status is currently unclear.

with high accuracy [24–27]. In contrast, there is no consensus on the precise location of the multicritical point for the spin-1 Baxter-Wu model; see Fig. 2 but also Fig. 5 of Ref. [21] for a summary regarding the phase diagram. Along the first-order transition line of Fig. 2 three ferrimagnetic phases and one ferromagnetic one coexist with the paramagnetic phase, forming a quintuple line that arrives at a pentacritical point where all five phases become identical.

In addition to the question of the location of the multicritical point, the reign of universality along the second-order segment of the transition line has been put into question. While some earlier results based on the transfer matrix and conformal invariance suggested a continuous variation of critical exponents with the crystal field along the second-order transition line [20], more recent studies reported a match of the observed critical behavior with that of the four-state Potts model [19]. Some authors have also suggested the scenario of a mixed-order transition with both first-order and second-order properties [28]. Recently, however, some clear-cut evidence for a simple, continuous transition in the universality class of the four-state Potts model in the regime of $\Delta < 0$ could be provided based on a highly optimized combination of Wang-Landau simulations that cross the transition at constant Δ and multicanonical simulations operating at constant temperature T [29,30], such that questions remain mainly in the regime $\Delta \gtrsim 0$.

In the present work we study the spin-1 Baxter-Wu model at several values of the crystal-field coupling that also reach into the regime $\Delta > 0$. To this end, we employ two complementary Monte Carlo schemes, a recently proposed variant of studying Fisher’s partition function zeros [31] dubbed energy probability distribution zeros [32], and the multicanonical approach applied to the crystal-field energy [25,29,30,33]. While the latter method is well established in the literature, the usefulness and robustness of the former has been demonstrated for only a few cases to date, including some simple

spin systems and polymer chains [32,34,35]. In this respect, the purpose of the present work is twofold: first, to explore the scope and limitations of the method of energy probability distribution zeros for the more complicated spin-1 Baxter-Wu model that lacks the up-down symmetry and, second, to investigate the criticality and universality of the model specifically for $\Delta \geq 0$, but still below the proposed location of the multicritical point.

The rest of the paper is organized as follows. In Sec. II we outline the method based on the energy probability distribution zeros and show results for both the pure spin-1/2 and for the spin-1 Baxter-Wu model, the latter for several values of the crystal-field coupling in the range $-10 \leq \Delta \leq 0.5$. In Sec. III we complement the outcomes of Sec. II via extensive multicanonical simulations at fixed values of the temperature in the regime where $\Delta \geq 0$. Finally, in Sec. IV we summarize the main findings of the current work, comparing the implemented methodologies in the light of some additional preliminary results at $\Delta = 0$ obtained via an efficient numerical scheme that mixes cluster and heat-bath updates.

II. ENERGY PROBABILITY DISTRIBUTION ZEROS

A. Description and finite-size scaling

As was recently discussed in Refs. [32,34,35], the study of zeros in the energy probability distribution (EPD) allows for a straightforward determination of critical temperatures and the shift exponent $\theta = 1/\nu$ while avoiding the need of computing traditional thermodynamic quantities, such as the susceptibility or the specific heat. The method of EPD zeros is closely related to the Fisher zeros of the canonical partition function $\mathcal{Z}$ [31], expressed as

$$\mathcal{Z} = \sum_E g(E) e^{-\beta E} = e^{-\beta \epsilon_0} \sum_{n=1}^{\mathcal{N}} g(E_n) e^{-\beta n \epsilon}, \quad (3)$$

where E is the energy of the system, $g(E)$ is the number of states having energy E (degeneracy), and $\beta = 1/T$. In the last part of Eq. (3) we assume a discrete energy spectrum $E = E_n = \epsilon_0 + n\epsilon$, where ϵ_0 is the ground-state energy and ϵ denotes the level spacing, $n = 0, 1, 2, \dots, \mathcal{N}$. Fisher noted that since (3) is a polynomial in $y = e^{-\beta \epsilon}$, it has $\mathcal{N}$ complex zeros and since $g(E_n) \geq 0$ none of them are real. However, on approaching the thermodynamic limit $\mathcal{N} \rightarrow \infty$, some zeros might approach the real axis, thus leading to a nonanalyticity at $y_c = e^{-\beta_c \epsilon}$ corresponding to the phase transition at the inverse critical temperature β_c . Since the partition function is not so straightforward to sample in a Monte Carlo simulation, we consider a somewhat different formulation. To this end, we multiply the right-hand side of Eq. (3) by $1 = e^{-\beta_0 \epsilon_0} e^{+\beta_0 \epsilon_0}$ to obtain

$$\mathcal{Z}_\beta = e^{-\Delta \beta \epsilon_0} \sum_{n=1}^{\mathcal{N}} h_{\beta_0}(n) x^n, \quad (4)$$

where β_0 is the inverse of some reference temperature, $\Delta \beta = \beta - \beta_0$, $h_{\beta_0}(n) = g(E_n) e^{-\beta_0 E_n}$, and $x = e^{-\Delta \beta \epsilon}$. Note that $h_{\beta_0}(n)$ is the unnormalized canonical energy probability distribution at β_0 , and it can be easily estimated from an energy histogram through Monte Carlo simulations. As is

easily seen, when $\beta_0 = \beta_c$ the dominant zero of the EPD is located at the fixed value $x_c = (1, 0)$ in the complex plane, thus simplifying the analysis.

For the finite lattice systems of linear size L that are amenable to numerical simulation, one can systematically follow the behavior of the most dominant zero x_L^* that is approaching the real axis at $x_c = (1, 0)$ as L is increased. In this way, it is possible to use finite-size scaling arguments to retrieve the critical temperature as well as the critical exponent ν . Specifically, the algorithm proposed in Ref. [32] for this purpose is as follows. We first choose a starting guess $\beta_0^{j=0}$ of the inverse transition temperature and then iterate through the following steps:

- (1) Simulate the system at $\beta = \beta_0^j$ and construct a histogram $h_{\beta_0^j}$.
- (2) Find all the zeros of the polynomial with coefficients given by $h_{\beta_0^j}$, i.e.,

$$\sum_{n=1}^{\mathcal{N}} h_{\beta_0^j}(n) x^n = 0. \quad (5)$$

- (3) Find the dominant zero $(x^j)^*$. Then:

- (1) if $(x^j)^*$ is close enough to the point $(1, 0)$, $x_L^* = (x^j)^*$ and stop;
- (2) else, make

$$\beta_0^{j+1} = -\epsilon^{-1} \ln [\text{Re}(x^j)^*] + \beta_0^j \quad (6)$$

and return to step (i).

After setting a convergence criterion, one ends up with estimates x_L^* for the dominant zeros and hence with pseudocritical temperatures T_L^* (β_L^*). Previous numerical results for several spin systems of Ising, Potts, and Heisenberg type, as well as for homopolymeric models, indicate that [32,34,35]: (i) the choice of the starting temperature β_0 is largely irrelevant for arriving at the dominant zero x_L^* ; (ii) for $\beta \approx \beta_c$, only states with a nonvanishing probability are relevant to the transition, thus allowing us to define a cutoff, h_{cut} , affecting the left- and right-hand side margins of the energy distribution. Discarding configurations where $h_{\beta_0^j}(n) < h_{\text{cut}}$ substantially reduces the degree of the polynomial, especially with increasing system size; and (iii) to further simplify the polynomial, one can rescale the histogram by setting its maximum value to unity so that $\max h_{\beta_0^j} = 1$, since an overall rescaling of the partition function does not affect the location of the zeros.

According to the well-established finite-size scaling theory, the shift of pseudocritical temperatures T_L^* is described by the power law [36,37]

$$T_L^* = T_c + b_T L^{-1/\nu} (1 + b'_T L^{-\omega}), \quad (7)$$

where T_c is the critical temperature of the infinite system, b and b' are nonuniversal parameters, ν is the critical exponent of the correlation length, and ω denotes the correction-to-scaling (Wegner) exponent, fixed hereafter to the predicted value $\omega = 2$ [5,6]. On the same ground, one also expects that [32]

$$x_L^* = x_c + b_x L^{-1/\nu} (1 + b'_x L^{-\omega}). \quad (8)$$

Since $x_L^* \approx (1, 0)$, the imaginary part $\text{Im}(x_L^*)$ should scale with the system size as [32]

$$\text{Im}(x_L^*) \sim L^{-1/\nu}(1 + b'L^{-\omega}). \quad (9)$$

In this description, the standard process is to first compute the critical exponent ν via Eq. (9), and then retrieve the critical temperature T_c using Eq. (7).

B. Results

For the application of the EPD zeros method to the Baxter-Wu model, histograms were accumulated using the standard single-spin-flip Metropolis algorithm. To accommodate for all ground states, periodic boundary conditions must be considered and the allowed values of the linear size of the lattice L must be a multiple of three [19,20,29,30]. (Note that a triangular lattice on the torus is tripartite when its linear dimensions are multiples of three.) In the course of our simulations we considered linear sizes in the range $12 \leq L \leq 120$, respecting this constraint (a practice followed also in the multicanonical and hybrid simulations described below). During thermalization, 10^5 Monte Carlo steps per spin (sweeps) were discarded for $L \leq 45$ and 3×10^5 sweeps for the larger sizes. An additional 10^8 sweeps were performed to accumulate the energy histograms, leading to a quite precise estimate of the dominant root. The iterative process of finding the dominant EPD zero terminated when the temperature difference between two consecutive steps became smaller than a predefined accuracy of $\varepsilon = 10^{-4}$. Note that one may also look at the real part of the dominant zero and halt the process when $|\text{Re}(x_L^*) - 1| \leq \varepsilon$, and also that smaller values of ε may be considered, without any significant consequences in the results. Regarding the cutoff, the value $h_{\text{cut}} = 10^{-4}$ was used throughout the simulations. Errors have been computed by averaging over ten different independent runs. Finally, for all fits performed throughout this paper we restricted ourselves to data with $L \geq L_{\text{min}}$, adopting standard χ^2 test for goodness of fit. Specifically, we considered a fit as being acceptable only if $Q > 0.01$, where Q is the quality-of-fit parameter [38].

It is clear that determining the zeros of a high-order polynomial is far from trivial, in general. In the present case, this difficulty is being added to by the need to determine the cutoff of the EPD while monitoring the precision of coefficients $h_{\beta'_0}(n)$ in order to obtain a sensible accuracy for the zeros. The precision of the coefficients $h_{\beta'_0}(n)$ strongly depends on the length of the Monte Carlo time series. On the other hand, even in case of rather accurate values of the coefficients results still depend on the cutoff threshold of the EPD. However, as it has been recently shown for the two-dimensional Ising and six-state Potts models [39], the EPD method is indeed quite robust against the cutoff threshold and the number of Monte Carlo sweeps used, giving accurate results for the critical parameters.

Since the method has not yet been checked on the spin-1/2 Baxter-Wu model, our first port of call is to test it against the well-known exact results. Figure 3 depicts typical results for the zeros of a system of size $L = 75$ at a temperature close to the pseudocritical one. Note that since the density-of-states factors $g(E_n)$ are real, the zeros all come in conjugate pairs. The top panel shows a global view of all zeros located around

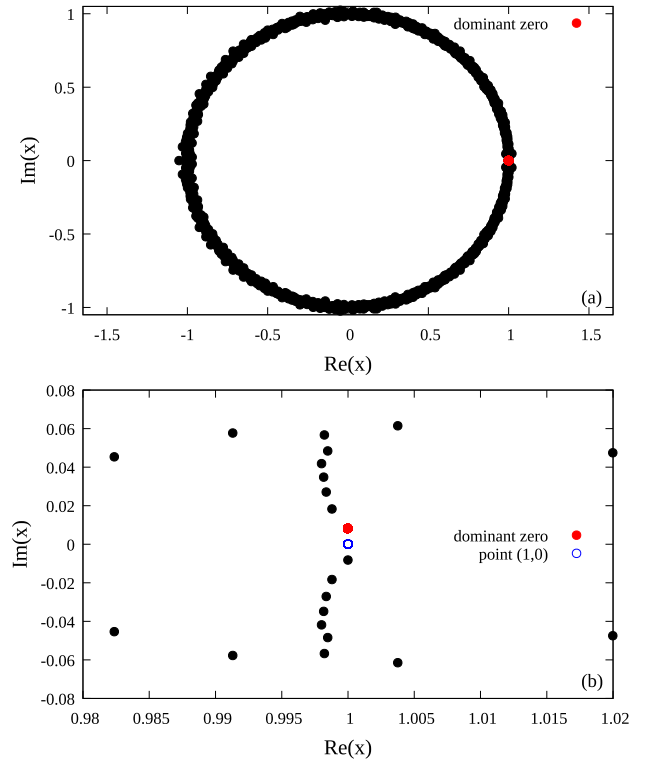


FIG. 3. Zeros of the EPD in the complex plane for the spin-1/2 Baxter-Wu model and a system with linear size $L = 75$ at $\beta = 0.43991$, close to the corresponding pseudocritical temperature; see also Eq. (5). (a) provides a global view of the zeros around a unit-radius circle and (b) shows a zoom in on the area of the dominant zero near $(1,0)$. As discussed in the main text the roots appear in conjugate pairs.

a unit circle, and the bottom panel depicts an enlargement of the dominant zero $(x^j)^*$ near the point $x_c = (1, 0)$. Changing the temperature according to Eq. (6) will furnish a different new dominant zero that converges to the desired x_L^* after just a few iterations. The finite-size scaling analysis of the imaginary part of the dominant root, as given by Eq. (9), is shown in Fig. 4(a). A linear fit on a log-log scale gives an estimate of $\nu = 0.668(6)$ for the critical exponent of the correlation length, in very good agreement with the exact result $\nu = 2/3$ [1,2]. Fixing ν to this value and $\omega = 2$ [40], Eq. (7) gives $T_c = 2.2692(4)$ in accordance with the exact result $2.269185 \dots$ [2], see Fig. 4(b).

We proceed now to the study of the spin-1 Baxter-Wu model at $\Delta = \{-10, -1, 0, 0.5\}$. This selection allows a direct comparison with results already reported in the literature by other approaches [19,28–30]. For brevity, we choose to show here in Fig. 5 the case $\Delta = 0.5$, which is the largest positive value of Δ considered in this work. The scaling analysis in both panels of Fig. 5 is in direct analogy with that of Fig. 4, giving $\nu = 0.623(11)$ and $T_c = 1.5301(3)$. Although the estimate for T_c is in excellent agreement with conformal invariance, see Table I, the value of ν appears to deviate from the expected $2/3$ result. A similar but slighter deviation was observed also for the case $\Delta = 0$, see again Table I. This trend is a note of warning indicating the presence of strong

TABLE I. Representative critical-point estimates (T_c or Δ_c) of the phase diagram of the spin-1 Baxter-Wu model from the present work as well as previous studies, including estimates of the critical exponent ν . In the first column we either indicate the value of Δ for simulations that vary T or the value of T for simulations that vary Δ . Columns 2–5 feature results obtained in the current work from the EPD zeros method (columns 2 and 3) and multicanonical simulations (columns 4 and 5). Columns 6–9 append earlier estimates from Wang-Landau (WL) simulations ($\Delta = -10$ and -1 [29] and $\Delta = 0$ [28]) and conformal invariance (CI) [19]. The first line of results relates to the pure spin-1/2 model ($\Delta = -\infty$).

Simulation point	EPD Zeros		MUCA		WL		CI	
	T_c	ν	Δ_c	ν	T_c	ν	T_c	ν
$\Delta = -\infty$	2.2692(4)	0.668(6)	—	—	—	—	—	—
$\Delta = -10$	2.2578(4)	0.666(10)	—	—	2.2578(5)	0.655(17)	2.2578	0.6683
$\Delta = -1$	1.8502(3)	0.660(12)	—	—	1.8503(9)	0.652(18)	1.8503	0.6601
$T = 1.8503$	—	—	$-1.002(2)$	0.671(6) ^a	—	—	—	—
$\Delta = 0$	1.6606(5)	0.649(12)	—	—	1.66055(5)	0.644(1)	1.6606	0.6488
$T = 1.6606$	—	—	0.0008(7)	0.652(10) ^b	—	—	—	—
$\Delta = 0.5$	1.5301(3)	0.623(11)	—	—	—	—	1.5300	0.6369 ^c
$T = 1.5301$	—	—	0.4999(2)	0.654(19)	—	—	—	—

^aFrom Ref. [29].

^bThis estimate (and the one at $T = 1.5301$) corresponds to the average value of ν obtained from the fits of Fig. 9. Cross correlations were not taken into account, but see Ref. [60].

^cPrivate communication by the authors of Ref. [19].

finite-size effects as Δ approaches the location Δ_{pp} of the multicritical point, suggesting the need of studying larger system sizes or further scaling corrections. Finally, in Fig. 6 we provide a summary concerning the finite-size scaling behavior

of the imaginary part of the dominant zero for all values of Δ considered, including the case of the spin-1/2 model. Inspecting Fig. 6 one may observe that as we lower Δ from 0.5 to $-\infty$ the trend of the numerical data follows the expected passage to the spin-1/2 model ($\Delta = -\infty$). However, this approach appears to be rather slow, and it could be instructive to study even more negative values of Δ . The gathered results

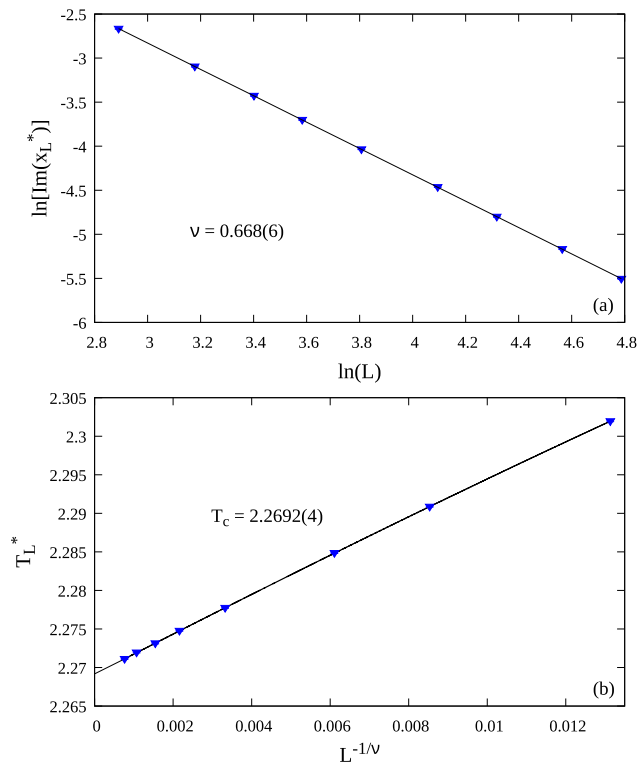


FIG. 4. (a) Log-log plot of the imaginary part of the dominant zero as a function of lattice size for the spin-1/2 Baxter-Wu model. The solid line shows a fit of the form (9). (b) Finite-size scaling analysis of the pseudocritical temperatures, see Eq. (7), where the critical exponent ν is fixed to the value from (a).

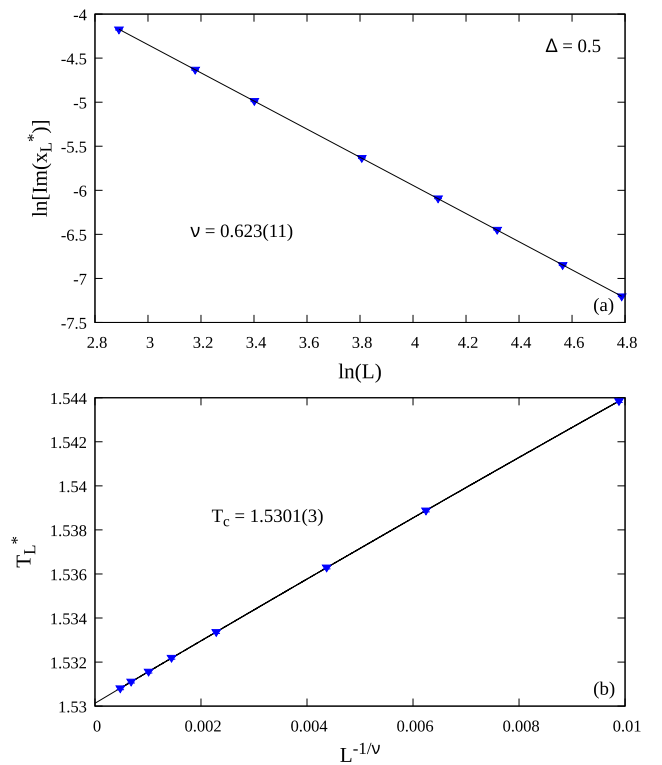


FIG. 5. The same as in Fig. 4 for the spin-1 Baxter-Wu model at $\Delta = 0.5$.

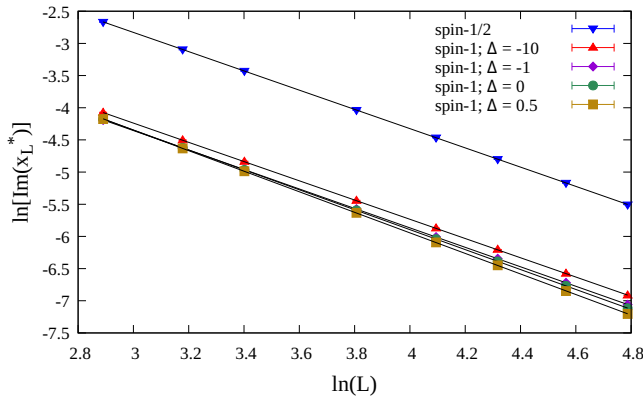


FIG. 6. Log-log plot of the imaginary part of the dominant zero as a function of the lattice size for both the spin-1/2 and spin-1 Baxter-Wu models. For the spin-1 case results at various values of Δ are shown. The solid lines are fits of the form (9) as described in the text.

for T_c and ν are listed in Table I and are critically discussed in Sec. IV. Overall, we may deduce that the EPD zeros method appears to be a promising alternative for determining critical aspects of the transition in the Baxter-Wu model.

III. MULTICANONICAL SIMULATIONS

A. Method and observables

The multicanonical (MUCA) method [33] consists of a substitution of the Boltzmann factor $e^{-\beta E}$ with weights that are iteratively modified to produce a flat histogram, usually in energy space. This ensures that suppressed states such as those in the coexistence region in an (asymptotic or effective) first-order transition can be reliably sampled, and a continuous reweighting to arbitrary values of the external control parameter becomes possible [41,42]. Due to the two-parametric nature of the density of states, $g(E_J, E_\Delta)$, in the spin-1 Baxter-Wu model, the process was applied only to the crystal-field part E_Δ of the energy. This allowed us to reweight to arbitrary values of Δ while keeping the temperature fixed. Starting from the partition function of Eq. (3) we can write

$$\mathcal{Z}_{\text{MUCA}} = \sum_{E_J, E_\Delta} g(E_J, E_\Delta) e^{-\beta E_J} W(E_\Delta), \quad (10)$$

where the Boltzmann weight associated with the crystal-field part of the energy has been generalized to $W(E_\Delta)$. For a flat marginal distribution in E_Δ , it should hold that

$$W(E_\Delta) \propto \mathcal{Z}_{\text{MUCA}} \left[\sum_{E_J} g(E_J, E_\Delta) e^{-\beta E_J} \right]^{-1}. \quad (11)$$

In order to iteratively approximate the generalized weights $W(E_\Delta)$, we sampled histograms of the crystal-field energy. Supposing that at the n th iteration a histogram $H^{(n)}(E_\Delta)$ was sampled, then its average should depend on the weight of the iteration $W^{(n)}(E_\Delta)$ as

$$\langle H^{(n)}(E_\Delta) \rangle \propto \sum_{E_J} g(E_J, E_\Delta) e^{-\beta E_J} W^{(n)}(E_\Delta). \quad (12)$$

From Eqs. (11) and (12) it follows that $\langle H^{(n)}(E_\Delta) \rangle \propto W^{(n)}(E_\Delta)/W(E_\Delta)$. Hence, in order to approximate the $W(E_\Delta)$ that produces a flat histogram a weight modification scheme of the form $W^{(n+1)}(E_\Delta) = W^{(n)}(E_\Delta)/H^{(n)}(E_\Delta)$ is justified. The simulations can terminate when a flat enough histogram has been sampled, based on a suitable flatness criterion. For our purposes we used the Kullback-Leibler divergence to test the flatness [42,43]. After this initial preparatory part, the final fixed weights can be used for production runs.

As has been shown in detail in Refs. [42,44], the multicanonical method can be adapted for the use on parallel machines by performing the sampling of histograms in parallel, with each parallel worker using the same weights but a different (independent) pseudorandom number sequence. The accumulated histogram can then be used to update the weights, keeping communication between the parallel parts of the code minimal. This scheme has been successfully applied for the study of spin systems in the past, including the spin-1 Blume-Capel and Baxter-Wu models [25,27,29,30,45]. Here we performed our simulations on an Nvidia Tesla K80 GPU, using a total of 26 624 workers assigned to independent copies of the system. At each time, a subset of these threads are actually running in parallel on the 4 992 cores of the device, while the excess in the number of parallel tasks is employed to hide the latencies due to memory accesses [46].

In the course of the multicanonical simulations (production runs) the sampled observables include estimates of the mean energy $\langle E \rangle$, the order parameter $\langle m \rangle$, which is estimated from the root mean-square average of the magnetization per site of the three sublattices A, B, and C [28,47,48],

$$m = \sqrt{\frac{m_A^2 + m_B^2 + m_C^2}{3}}, \quad (13)$$

and the magnetic susceptibility

$$\chi = \beta N [\langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2]. \quad (14)$$

As the multicanonical method allows for continuously reweighting to any value of Δ , canonical expectation values for an observable $O = O(\{\sigma\})$ at a fixed temperature can be attained by estimating the expressions

$$\langle O \rangle_\Delta = \frac{\langle O(\{\sigma\}) e^{-\beta \Delta E_\Delta(\{\sigma\})} W^{-1}(E_\Delta) \rangle_{\text{MUCA}}}{\langle e^{-\beta \Delta E_\Delta(\{\sigma\})} W^{-1}(E_\Delta) \rangle_{\text{MUCA}}}. \quad (15)$$

In this framework, it is natural to compute Δ derivatives of observables rather than the usual T ones. For instance, in place of the usual specific heat one may define a specific-heat-like quantity [25]

$$C_\Delta = \frac{1}{N} \frac{\partial E_J}{\partial \Delta} = -\beta [\langle E_J E_\Delta \rangle - \langle E_J \rangle \langle E_\Delta \rangle] / N, \quad (16)$$

which shows the shift behavior expected from the usual specific heat [25,29,30]. Additionally, in order to obtain direct estimates of the critical exponent ν from finite-size scaling, one may compute the logarithmic derivatives of the n th power of the order parameter [36,49,50]

$$\frac{\partial \ln \langle m^n \rangle}{\partial \Delta} = -\beta \left[\frac{\langle m^n E_\Delta \rangle}{\langle m^n \rangle} - \langle E_\Delta \rangle \right]. \quad (17)$$

B. Results

We performed simulations at $T = 1.6606$ and $T = 1.5301$, which approximate the critical points at $\Delta = 0$ and $\Delta = 0.5$, respectively, see Table I, using system sizes $12 \leq L \leq 96$, again with periodic boundary conditions. For $T = 1.6606$, 4×10^6 sweeps were used in the production run for the smallest system and 3×10^8 sweeps for the largest. For the lower temperature $T = 1.5301$, due to its proximity to the proposed multicritical point (see Fig. 2), sampling was increased to 2.5×10^7 sweeps in the production run for the smallest system and 10^9 sweeps for the largest. After the initial iterations for the calculation of the generalized weights, an additional 10% of the total production sweeps were discarded by each worker for thermalization. Preliminary tests indicated that distributing the production sweeps equally among the workers results in sampling the equivalent of ~ 5 autocorrelation times worth of data points per worker for the larger temperature and ~ 20 for the smaller. The results were analyzed using the jackknife resampling method [51] and the location of pseudocritical points was estimated via reweighting and bisecting in Δ .

As discussed in Refs. [21,28,29], there have been recent reports of first-order transition features even along the presumed continuous part of the transition line. In relation to such claims, we put forward here some additional evidence for the clarification of the nature of the phase transition at $\Delta < \Delta_{pp}$. Following the prescription of Ref. [29] we studied the reweighted probability density function $P(E_\Delta)$. It is well known that a double-peak structure in the density function in finite systems is an expected precursor of the two δ -peak behavior in the thermodynamic limit that is expected for a first-order phase transition [52,53]. However, this observation must be taken with a grain of salt, since there have been many cases reported in the literature for which this two-peak structure tends to a unique peak in the thermodynamic limit. A warning example is the two-dimensional four-state Potts model [54].

We start the presentation of our results with Fig. 7(a) where we show the probability density function $P(E_\Delta)$ for selected system sizes at the temperatures $T = 1.6606$ and 1.5301 . A double-peak structure is observed in both cases, in agreement with the evidence in Ref. [28] for $\Delta = 0$. As is clearly visible, stronger first-order-like characteristics are present for the lower- T (higher- Δ) example that is closer to the multicritical point.

The multicanonical method is optimal for studying these phenomena in the framework of the method proposed by Lee and Kosterlitz [55], as it allows the direct estimation of the barrier associated with the suppression of states during a first-order phase transition. Considering distributions with two peaks of equal height (eqh) [56], as the ones shown in Fig. 7(a), allows one to extract the surface tension in the E_Δ -space,

$$\Sigma(L) = \frac{1}{2\beta L} \ln \left(\frac{P_{\max}}{P_{\min}} \right)_{\text{eqh}}, \quad (18)$$

where $P_{\max}$ and $P_{\min}$ are the maximum and local minimum of the distribution $P(E_\Delta)$, respectively. This parameter is

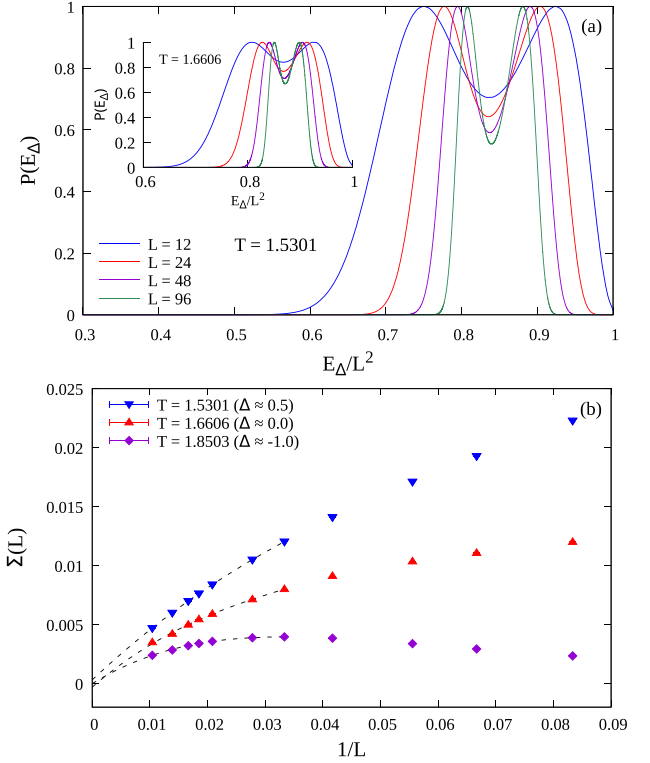


FIG. 7. (a) Reweighted canonical probability density functions $P(E_\Delta)$ for selected system sizes at $T = 1.5301$ (main panel) and $T = 1.6606$ (inset). (b) Limiting behavior of the corresponding surface tension $\Sigma(L)$. For a better comparison of the pseudo-first-order effects, data at $T = 1.8503$ (corresponding approximately to $\Delta = -1$) are also included [29].

expected to scale in two dimensions as

$$\Sigma(L) = \Sigma_\infty + c_1 L^{-1} + c_2 L^{-2} + c_3 L^{-3}, \quad (19)$$

possibly with higher-order corrections [57–59]. For the system under investigation here, the scaling behavior of the surface tension $\Sigma(L)$ is depicted in Fig. 7(b) for all temperatures studied. The dashed lines show fits of the form (19) with $L \geq L_{\min} = 30$ leading to a practically zero value of Σ_∞ in all cases. In particular, we obtain the extrapolated values $\Sigma_\infty = -0.00005(11)$, $-0.0003(9)$, and $0.0003(3)$, for $T = 1.8503$, 1.6606 , and 1.5301 , respectively. This analysis suggests a continuous transition in the thermodynamic limit for the regime of $\Delta < \Delta_{pp}$, in favor of the scenario originally discussed in Ref. [29].

In order to extract critical crystal fields $\Delta_c(T)$ as well as a first estimate of the correlation-length exponent ν , we present in Fig. 8 the shift behavior of suitable pseudocritical fields Δ_L^* . These are defined as the peak locations of Δ -dependent curves, such as the specific heat C_Δ , the magnetic susceptibility χ , and the logarithmic derivative of the order parameter $\partial \ln \langle m \rangle / \partial \Delta$. For each of the two temperatures studied the dashed lines show joint fits to the expected power-law behavior [25,27]

$$\Delta_L^* = \Delta_c + bL^{-1/\nu} (1 + b'L^{-\omega}), \quad (20)$$

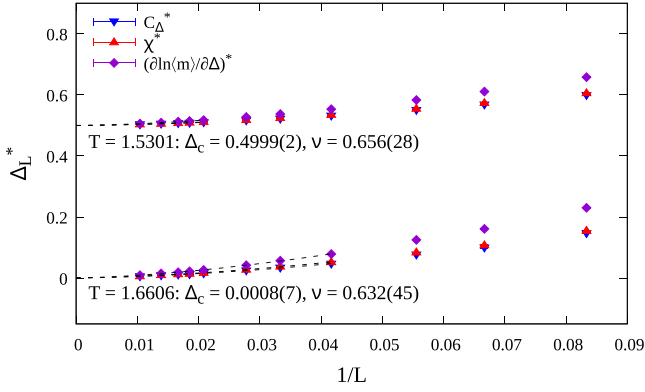


FIG. 8. Shift behavior of several pseudocritical fields as a function of the inverse linear system size at the temperatures $T = 1.5301$ and $T = 1.6606$, corresponding roughly to $\Delta \approx 0.5$ and $\Delta \approx 0$, respectively.

where Δ_c and ν are common parameters and $\omega = 2$ [5,6]. Using $L_{\min} = 24$ and 48 for $T = 1.6606$ and 1.5301, respectively, the evaluated critical points $\Delta_c(T = 1.5301) = 0.4999(2)$ and $\Delta_c(T = 1.6606) = 0.0008(7)$ are in good agreement with the results of Sec. II B but also with those reported in Table I from Wang-Landau simulations [28] and conformal invariance [19]. More importantly, our estimates $\nu = 0.656(28)$ and $0.632(45)$ for $T = 1.5301$ and 1.6606, respectively, confirm to a good accuracy the $q = 4$ Potts model universality class [8].

Additional estimates for the critical exponent ν can be extracted from the maxima of the logarithmic derivatives of the order parameter according to Eq. (17), which are expected to scale as [36,49,50]

$$\left(\frac{\partial \ln \langle m^n \rangle}{\partial \Delta} \right)^* \sim L^{1/\nu} (1 + b'L^{-\omega}). \quad (21)$$

Figure 9 shows our data for $n = 1$ (main panel) and $n = 2$ (inset) at the two temperatures under study. The dashed lines are power-law fits of the form (21) using $L_{\min} = 36$, providing an average of $\nu = 0.654(19)$ and $0.652(10)$ for $T = 1.5301$

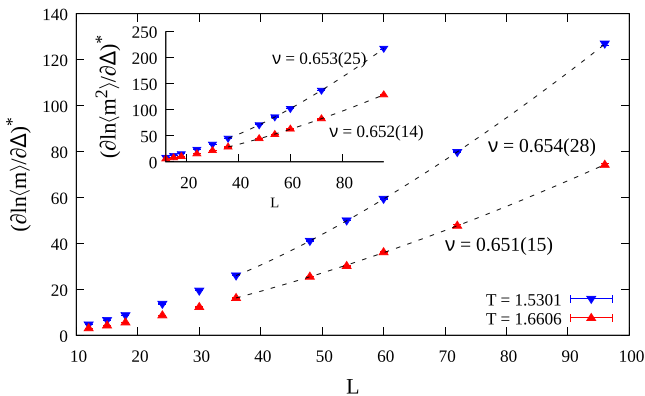


FIG. 9. Finite-size scaling behavior of the logarithmic derivatives (17) of powers $n = 1$ (main panel) and 2 (inset) of the order parameter.

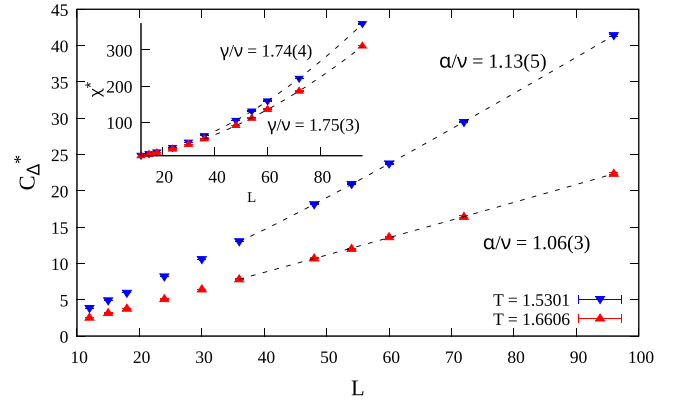


FIG. 10. Finite-size scaling behavior of C_Δ^* (main panel) and χ^* (inset).

and 1.6606, respectively, thus reinforcing the scenario of the $q = 4$ Potts model universality class [7].

Finally, we turn to the finite-size scaling behavior of the maxima of the specific heat, C_Δ^* , and magnetic susceptibility, χ^* , in order to probe the critical-exponent ratios α/ν and γ/ν , respectively. Figure 10 contains the relevant numerical data at the two temperatures considered. The dashed lines are fits of the expected form [27,29]

$$C_\Delta^* \sim L^{\alpha/\nu} (1 + b'L^{-\omega}) \quad (22)$$

and

$$\chi^* \sim L^{\gamma/\nu} (1 + b'L^{-\omega}), \quad (23)$$

with $L_{\min} = 36$. These led to the estimates $\alpha/\nu = 1.13(5)$ and $1.06(3)$, and $\gamma/\nu = 1.74(4)$ and $1.75(3)$ for $T = 1.5301$ and 1.6606, respectively. Here, at the lower temperature $T = 1.5301$ we had to include a second-order correction term ($\sim L^{-2\omega}$) in our fitting attempts to improve the quality of fit. All of the above results are clearly compatible with the exact values $\alpha/\nu = 1$ and $\gamma/\nu = 7/4$ of the four-state Potts model universality class [8].

IV. SUMMARY AND OUTLOOK

In closing, we return to the question of the current understanding of the behavior of the model along the phase boundary. Our results as well as some reference estimates from the recent literature are summarized in Table I. On inspecting these values, the following comments are in order: (i) A very good agreement between different methods of estimating the location of points (Δ, T) along the phase boundary of the model is observed, cross validating the different numerical approaches used in the present but also in previous works. (ii) The values of the critical exponent ν at $\Delta < 0$ are fully compatible with the value $2/3$ of the four-state Potts universality class [7,8] for all methods. However, with increasing Δ , a slight decrease in the value of ν is observed and may be attributed to the presence of finite-size effects that become more pronounced as one approaches the pentacritical point $\Delta_{pp} \approx 0.89\text{--}1.68$ [19,21]. (iii) Although the multicanonical simulations allowed us to significantly improve the limited capability of the Metropolis algorithm to reduce correlations,

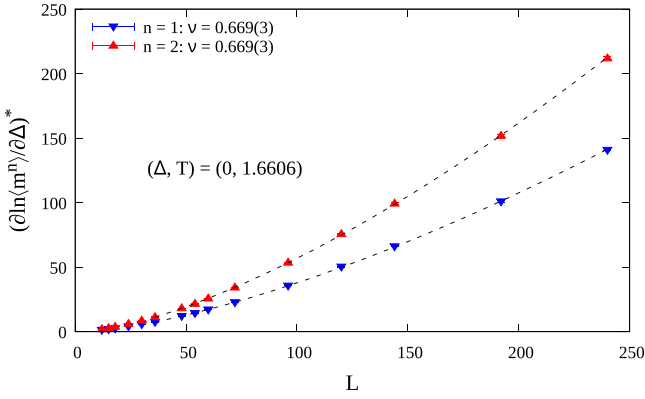


FIG. 11. Finite-size scaling of the logarithmic derivatives of powers $n = 1$ and 2 of the order parameter at the critical point $(\Delta, T) = (0, 1.6606)$, as indicated by the EPD zeros method; see also Table I. The dashed lines are fits of the form (21). Data generated via the hybrid approach.

much larger system sizes are required for a safe determination of critical exponents, in particular in the regime $0 \leq \Delta < \Delta_{pp}$.

In light of the above discussion, it would be very valuable to have at one's disposal some simulation method that allows to equilibrate significantly larger systems than those considered here. This holds especially for the scaling at the pentacritical point itself, where one may need to take into account possible multiplicative and additive logarithmic corrections, similar to those present in the four-state Potts model. A suitable cluster update for the spin-1/2 Baxter-Wu model was proposed by Novotny and Evertz [61]. Its basic idea is as follows: for each update step one of the sublattices is chosen at random and its spins kept fixed, resulting in an effective Ising model on the other two sublattices with nonfrustrating couplings. Hence, the Swendsen-Wang [62] algorithm can be applied for simulations of these embedded models. Our preliminary tests indicate that a combination of this cluster formalism, that improves the decorrelation of configurations but is not ergodic as it does not affect the diluted spins $\sigma_i = 0$, with the heat bath algorithm [63,64] results in an efficient algorithm capable of thermalizing rather large systems. A detailed analysis of the critical dynamical behavior of this hybrid scheme will be discussed elsewhere [65].

Here, we confine ourselves to an exemplary application of this technique to the case $\Delta = 0$ beyond which the deviation in the estimates of ν from the expected value $2/3$ appears to grow, cf. also Table I. In Fig. 11 we present the results of a test calculation of the critical exponent ν from hybrid simulations at the critical point $(\Delta, T) = (0, 1.6606)$, studying systems up to linear size $L_{\max} = 240$. The finite-size scaling analysis of the logarithmic derivatives of the order parameter (for both $n = 1$ and 2) produces the estimate $\nu = 0.669(3)$, in excellent agreement with the value $2/3$ [1,7,8]. A comparative set of results for the critical exponent ν of the spin-1 Baxter-Wu model at $\Delta = 0$ is given in Table II, where one may notice the superior accuracy of the hybrid approach.

To conclude, this work complements previous results that map the universality class of the spin-1 Baxter-Wu model to

TABLE II. Summary of results for the critical exponent ν of the spin-1 Baxter-Wu model at $\Delta = 0$ obtained via conformal invariance (second row) [19], Wang-Landau simulations (third row) [28], EPD zeros (fourth row), and multicanonical simulations (fifth row). The sixth row showcases the estimate of ν via the hybrid approach [61,65], see also Fig. 11. For all methods the maximum accessible system size $L_{\max}$ used in the simulations is also given in brackets. The third column highlights the deviation $\delta\nu$ of each estimate from the exact value [8], which is included in the last row for reference.

Method	ν	$\delta\nu = 2/3 - \nu $
CI ($L_{\max} = 12$) ^a	0.6488	0.018
WL ($L_{\max} = 92$)	0.644(1)	0.023(1)
EPD zeros ($L_{\max} = 120$)	0.649(12)	0.018(12)
MUCA ($L_{\max} = 96$)	0.652(10) ^b	0.015(10)
Hybrid ($L_{\max} = 240$)	0.669(3)	0.002(3)
Exact solution	$2/3$	0

^aNote that $L_{\max}$ denotes the maximum strip width considered in Ref. [19].

^bAverage value of ν obtained from the fits of Fig. 9.

that of the four-state Potts model, a nontrivial task obscured by the presence of strong finite-size effects as revealed by our analysis. Clearly, it would be very instructive to add data for additional values of Δ in the regime $\Delta > 0.5$. Yet this requires a huge computational effort given that crossover phenomena become more pronounced as we move towards the expected pentacritical point. In fact, in order to perform a safe finite-size scaling analysis much larger system sizes would be needed with increasing values of Δ . For future work, we propose the following two-stage process: (i) identify with good numerical accuracy the location of the pentacritical point (Δ_{pp}, T_{pp}) , and (ii) perform extensive simulations around this point using the hybrid approach in order to quantify all these interesting phenomena outlined above, including crossover effects and possible logarithmic corrections to scaling. A possible tool for such an endeavor could be the field-mixing technique [66] in combination with the numerical methods reported in this paper. Such attempts are the subject of ongoing investigations.

ACKNOWLEDGMENTS

We would like to thank Lucas Mól for fruitful discussions on the use of the EPD zeros method and Gerald Weber for the invaluable assistance in the use of the Statistical Mechanics Computer Lab facilities at the Universidade Federal de Minas Gerais. We acknowledge the provision of computing time on the parallel computer clusters *ZEUS* and *EPYC* of Coventry University. This research was supported by CNPq, CAPES, and FAPEMIG (Brazilian agencies).

- [1] R. J. Baxter and F. Y. Wu, *Phys. Rev. Lett.* **31**, 1294 (1973); *Aust. J. Phys.* **27**, 357 (1974); R. J. Baxter, *ibid.* **27**, 369 (1974).
- [2] R. J. Baxter, *Exactly Solved Models in Statistical Mechanics* (Academic, New York, 1982).
- [3] D. W. Wood and H. P. Griffiths, *J. Phys. C* **5**, L253 (1972).
- [4] D. Merlini and C. Gruber, *J. Math. Phys.* **13**, 1814 (1972).
- [5] F. C. Alcaraz and J. C. Xavier, *J. Phys. A: Math. Gen.* **30**, L203 (1997).
- [6] F. C. Alcaraz and J. C. Xavier, *J. Phys. A: Math. Gen.* **32**, 2041 (1999).
- [7] E. Domany and E. K. Riedel, *J. Appl. Phys.* **49**, 1315 (1978).
- [8] F.-Y. Wu, *Rev. Mod. Phys.* **54**, 235 (1982).
- [9] I. A. Hadjiagapiou, A. Malakis, and S. S. Martinos, *Physica A* **356**, 563 (2005).
- [10] L. N. Shchur and W. Janke, *Nucl. Phys. B* **840**, 491 (2010).
- [11] I. N. Velonakis and S. S. Martinos, *Physica A* **392**, 2016 (2013).
- [12] S. Capponi, S. S. Jahromi, F. Alet, and K. P. Schmidt, *Phys. Rev. E* **89**, 062136 (2014).
- [13] I. N. Velonakis and I. A. Hadjiagapiou, *Braz. J. Phys.* **48**, 354 (2018).
- [14] L. N. Jorge, L. S. Ferreira, and A. A. Caparica, *Phys. Rev. E* **100**, 032141 (2019).
- [15] M. F. Cavalcante and J. A. Plascak, *Physica A* **518**, 111 (2019).
- [16] W. Liu, F. Wang, P. Sun, and J. Wang, *J. Stat. Mech.* **2022**, 093206 (2022).
- [17] J. L. Monroe, *J. Phys. A: Math. Theor.* **55**, 375001 (2022).
- [18] B. Nienhuis, A. N. Berker, E. K. Riedel, and M. Schick, *Phys. Rev. Lett.* **43**, 737 (1979).
- [19] D. A. Dias, J. C. Xavier, and J. A. Plascak, *Phys. Rev. E* **95**, 012103 (2017).
- [20] M. L. M. Costa, J. C. Xavier, and J. A. Plascak, *Phys. Rev. B* **69**, 104103 (2004).
- [21] L. N. Jorge, P. H. L. Martins, C. J. Da Silva, L. S. Ferreira, and A. A. Caparica, *Physica A* **576**, 126071 (2021).
- [22] W. Kinzel, E. Domany, and A. Aharony, *J. Phys. A: Math. Gen.* **14**, L417 (1981).
- [23] M. Blume, *Phys. Rev.* **141**, 517 (1966); H. W. Capel, *Physica* **32**, 966 (1966); **33**, 295 (1967); **37**, 423 (1967).
- [24] A. Malakis, A. N. Berker, I. A. Hadjiagapiou, N. G. Fytas, and T. Papakonstantinou, *Phys. Rev. E* **81**, 041113 (2010).
- [25] J. Zierenberg, N. G. Fytas, and W. Janke, *Phys. Rev. E* **91**, 032126 (2015).
- [26] W. Kwak, J. Jeong, J. Lee, and D.-H. Kim, *Phys. Rev. E* **92**, 022134 (2015).
- [27] J. Zierenberg, N. G. Fytas, M. Weigel, W. Janke, and A. Malakis, *Eur. Phys. J. Spec. Top.* **226**, 789 (2017).
- [28] L. N. Jorge, L. S. Ferreira, and A. A. Caparica, *Physica A* **542**, 123417 (2020).
- [29] A. Vasilopoulos, N. G. Fytas, E. Vatansever, A. Malakis, and M. Weigel, *Phys. Rev. E* **105**, 054143 (2022).
- [30] N. G. Fytas, A. Vasilopoulos, E. Vatansever, A. Malakis, and M. Weigel, *J. Phys.: Conf. Ser.* **2207**, 012008 (2022).
- [31] M. E. Fisher, The nature of critical points, in *Lectures in Theoretical Physics*, Vol. 7C, edited by W. Brittin (University of Colorado Press, Boulder, 1965), Chap. 1, pp. 1–159.
- [32] B. V. Costa, L. A. S. Mól, and J. C. S. Rocha, *Comput. Phys. Commun.* **216**, 77 (2017).
- [33] B. A. Berg and T. Neuhaus, *Phys. Rev. Lett.* **68**, 9 (1992).
- [34] B. V. Costa, L. A. S. Mól, and J. C. S. Rocha, *Braz. J. Phys.* **49**, 271 (2019).
- [35] R. G. M. Rodrigues, B. V. Costa, and L. A. S. Mól, *Phys. Rev. E* **104**, 064103 (2021).
- [36] A. M. Ferrenberg and D. P. Landau, *Phys. Rev. B* **44**, 5081 (1991).
- [37] D. J. Amit and V. Martín-Mayor, *Field Theory, the Renormalization Group and Critical Phenomena*, 3rd ed. (World Scientific, Singapore, 2005).
- [38] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, and B. P. Flannery, *Numerical Recipes in C*, 2nd ed. (Cambridge University Press, Cambridge, 1992).
- [39] R. G. M. Rodrigues, B. V. Costa, and L. A. S. Mól, *Braz. J. Phys.* **52**, 14 (2022).
- [40] Here, and in all fits shown below, we have used the exact value for the corrections-to-scaling exponent ω , since our tests indicated that even if it is treated as an additional free fitting parameter in Eq. (7) it always converges to ~ 2 . For these tests we have used again the standard χ^2 test for goodness of the fit, as described in the main text.
- [41] W. Janke, *Histograms and All That*, in *Computer Simulations of Surfaces and Interfaces*, edited by B. Dünweg, D. P. Landau, and A. I. Milchev, Vol. 114 (Kluwer, Dordrecht, 2003), pp. 137–157.
- [42] J. Gross, J. Zierenberg, M. Weigel, and W. Janke, *Comput. Phys. Commun.* **224**, 387 (2018).
- [43] S. Kullback and R. A. Leibler, *Ann. Math. Stat.* **22**, 79 (1951).
- [44] J. Zierenberg, M. Marenz, and W. Janke, *Comput. Phys. Commun.* **184**, 1155 (2013).
- [45] N. G. Fytas, J. Zierenberg, P. E. Theodorakis, M. Weigel, W. Janke, and A. Malakis, *Phys. Rev. E* **97**, 040102(R) (2018).
- [46] M. Weigel, Monte Carlo methods for massively parallel computers, in *Order, Disorder and Criticality*, Vol. 5, edited by Yu. Holovatch (World Scientific, Singapore, 2018), pp. 271–340.
- [47] M. L. M. Costa and J. A. Plascak, *Braz. J. Phys.* **34**, 419 (2004).
- [48] M. L. M. Costa and J. A. Plascak, *J. Phys.: Conf. Ser.* **686**, 012011 (2016).
- [49] A. A. Caparica, A. Bunker, and D. P. Landau, *Phys. Rev. B* **62**, 9458 (2000).
- [50] A. Malakis, A. N. Berker, I. A. Hadjiagapiou, and N. G. Fytas, *Phys. Rev. E* **79**, 011125 (2009).
- [51] B. Efron, *The Jackknife, the Bootstrap and Other Resampling Plans* (Society for Industrial and Applied Mathematics [SIAM], Philadelphia, 1982).
- [52] K. Binder and D. P. Landau, *Phys. Rev. B* **30**, 1477 (1984).
- [53] K. Binder, *Rep. Prog. Phys.* **50**, 783 (1987).
- [54] L. A. Fernandez, A. Gordillo-Guerrero, V. Martín-Mayor, and J. J. Ruiz-Lorenzo, *Phys. Rev. E* **80**, 051105 (2009).
- [55] J. Lee and J. M. Kosterlitz, *Phys. Rev. Lett.* **65**, 137 (1990); *Phys. Rev. B* **43**, 3265 (1991).
- [56] C. Borgs and S. Kappler, *Phys. Lett. A* **171**, 37 (1992).
- [57] A. Nußbaumer, E. Bittner, T. Neuhaus, and W. Janke, *Europhys. Lett.* **75**, 716 (2006).
- [58] A. Nußbaumer, E. Bittner, and W. Janke, *Phys. Rev. E* **77**, 041109 (2008).
- [59] E. Bittner, A. Nußbaumer, and W. Janke, *Nucl. Phys. B* **820**, 694 (2009).
- [60] M. Weigel and W. Janke, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 100601 (2009); *Phys. Rev. E* **81**, 066701 (2010).
- [61] M. A. Novotny and H. G. Evertz, in *Computer Simulation Studies in Condensed-Matter Physics VI*, edited by D. P. Landau, K. K. Mon, and H.-B. Schüttler (Springer, Berlin, 1993), p. 188.

- [62] R. H. Swendsen and J.-S. Wang, [Phys. Rev. Lett. **58**, 86 \(1987\)](#).
- [63] Y. Miyatake, M. Yamamoto, J. J. Kim, M. Toyonaga, and O. Nagai, [J. Phys. C: Solid State Phys. **19**, 2539 \(1986\)](#).
- [64] D. Loison, C. L. Qin, K. D. Schotte, and X. F. Jin, [Eur. Phys. J. B **41**, 395 \(2004\)](#).
- [65] A. Vasilopoulos, M. Akritidis, N. G. Fytas, and M. Weigel (unpublished).
- [66] A. D. Bruce and N. B. Wilding, [Phys. Rev. Lett. **68**, 193 \(1992\)](#); N. B. Wilding and A. D. Bruce, [J. Phys.: Condens. Matter **4**, 3087 \(1992\)](#).

Anexo B – Artigo publicado na revista Journal of Statistical Mechanics

PAPER

Universal energy and magnetisation distributions in the Blume–Capel and Baxter–Wu models

To cite this article: A R S Macêdo *et al* *J. Stat. Mech.* (2024) 103204

View the [article online](#) for updates and enhancements.

You may also like

- [Bifurcation in correlation length of the Ising model on a 'Toblerone' lattice](#)
Joseph Chapman, Bruno Tomasello and Sam Carr
- [Generalized hydrodynamics and approach to generalized Gibbs equilibrium for a classical harmonic chain](#)
Saurav Pandey, Abhishek Dhar and Anupam Kundu
- [Percolation and jamming properties in an object growth model on a triangular lattice with finite-size impurities](#)
D Dujak, A Kara, Lj Budinski-Petkovi et al.

Universal energy and magnetisation distributions in the Blume–Capel and Baxter–Wu models

A R S Macêdo^{1,2}, J A Plascak^{1,3,4,*}, A Vasilopoulos⁵,
N G Fytas^{5,*}, M Akritidis⁶ and M Weigel^{7,*}

¹ Departamento de Física, Instituto de Ciências Exatas, Universidade Federal de Minas Gerais, C.P. 702., 30123-970 Belo Horizonte, MG, Brazil

² Instituto Federal do Maranhão—Campus Imperatriz, 65919-050 Imperatriz, MA, Brazil

³ Universidade Federal da Paraíba, Centro de Ciências Exatas e da Natureza—Campus I, Departamento de Física—CCEN Cidade Universitária, 58051-970 João Pessoa, PB, Brazil

⁴ Center for Simulation Physics, University of Georgia, Athens, GA 30602, United States of America

⁵ School of Mathematics, Statistics and Actuarial Science, University of Essex, Colchester CO4 3SQ, United Kingdom

⁶ School of Computing, Mathematics and Data Science, Coventry University, Coventry CV1 5FB, United Kingdom

⁷ Institut für Physik, Technische Universität Chemnitz, 09107 Chemnitz, Germany

E-mail: pla@uga.edu, nikolaos.fytas@essex.ac.uk and martin.weigel@physik.tu-chemnitz.de

Received 7 July 2024

Accepted for publication 6 September 2024

Published 25 October 2024



Online at stacks.iop.org/JSTAT/2024/103204
<https://doi.org/10.1088/1742-5468/ad784e>

Abstract. We analyse the probability distribution functions of the energy and magnetisation of the two-dimensional Blume–Capel (BC) and Baxter–Wu (BW) models with spin values $S \in \{1/2, 1, 3/2\}$ in the presence of a crystal field Δ . By employing extensive single-spin flip Monte Carlo simulations and a recently developed method of studying the zeros of the energy probability distribution we

* Authors to whom any correspondence should be addressed.

are able to probe, with a good numerical accuracy, several critical characteristics of the transitions. Additionally, the universal aspects of these transitions are scrutinised by computing the corresponding probability distribution functions. The energy distribution has been underutilised in the literature when compared to that of the magnetisation. Somewhat surprisingly, however, the former appears to be more robust in characterising the universality class for both models upon varying the crystal field Δ than the latter. Finally, our analysis suggests that in contrast to the BC ferromagnet, the BW model appears to suffer from strong finite-size effects, especially upon increasing Δ and S , that obscure the application of traditional finite-size scaling approaches.

Keywords: classical Monte Carlo simulations, classical phase transitions, critical exponents and amplitudes, finite-size scaling

Contents

1. Introduction	2
2. Theoretical background	5
2.1. EPD zeros	6
2.2. Critical energy and magnetisation PDFs	7
3. Monte Carlo simulations: setup and parameters	9
4. Results	10
4.1. The BC model	10
4.2. The BW model	14
5. Concluding remarks	22
Acknowledgments	22
References	23

1. Introduction

The Blume–Capel (BC) model is defined by a spin-1 Ising Hamiltonian with a single-ion uniaxial crystal-field anisotropy [1, 2]. The fact that it has been very widely studied in statistical and condensed-matter physics is explained not only by its relative simplicity and the fundamental theoretical interest arising from the richness of its phase diagram, but also by a number of different physical realisations of variants of the model, ranging from multi-component fluids to ternary alloys and ^3He – ^4He mixtures [3]. The zero-field model is described by the Hamiltonian

$$\mathcal{H}^{(\text{BC})} = -J \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j + \Delta \sum_i \sigma_i^2, \quad (1)$$

where $J > 0$ is a ferromagnetic exchange interaction and Δ denotes the crystal-field coupling. The first sum is over all nearest-neighbours $\langle ij \rangle$ and the second over all spins of the lattice. Our numerical work is focused on the square lattice but the model is, of course, more general. For $S = 1$ the variables σ_i take on the values $\sigma_i = 0, \pm 1$, but the model can be extended to general $S = 1, 3/2, 2, \dots$, where one has $\sigma_i \in \{-S, -S + 1, \dots, S - 1, S\}$ — importantly, for integer S , this includes $\sigma_i = 0$, while for half-integer S it does not.

The BC model on different lattice geometries and for various S values has been studied extensively over the years. Methodologically, a vast variety of approximation methods have been used to tackle the problem, such as mean-field theory [1, 2, 4, 5], the renormalisation group [6], finite-size scaling and conformal field theory [7–11], Monte Carlo simulations [12–18], and series expansions [19] (see also references therein). Although most of the simulation studies mentioned above have focused on $S = 1$ or $S = 3/2$, a number of general features of the phase diagram in the $(\Delta - T)$ plane follow from predictions of mean-field theory. In particular [4, 5]:

- (i) For integer values of S a second-order transition line with a decreasing critical temperature $T_c(\Delta)$ as Δ increases meets a first-order transition line at a tricritical point. This first-order transition line reaches the point of zero temperature ($T = 0$) at $\Delta_0 = zJ/2$, where z is the coordination number of the lattice. From the point $T = 0$ and $\Delta = \Delta_0$, $S - 1$ additional first-order transition lines emerge as the temperature rises and all end at independent double critical endpoints [4].
- (ii) For half-integer S values, the second-order transition line extends to all values of the crystal field. However, from the point $T = 0$ and $\Delta = \Delta_0$, $S - 1/2$ additional first-order transition lines emerge now as the temperature rises, all ending up at independent double critical endpoints located below the critical transition line [4].
- (iii) The critical lines as well as the double critical endpoints are in the same universality class as the regular Ising ferromagnet, regardless of the particular value of S .

In addition, for the $S = 1$ square-lattice model the location of the tricritical point is known with a high numerical accuracy to lie at $(\Delta_t, T_t) \approx (1.9660(1), 0.6080(1))$ [17].

On the other hand, the Baxter–Wu (BW) model was first introduced by Wood and Griffiths [20] as a system which does not exhibit invariance under a global inversion of all spins. The Hamiltonian of the model, again augmented by a crystal-field coupling term, reads

$$\mathcal{H}^{(\text{BW})} = -J \sum_{\langle ijk \rangle} \sigma_i \sigma_j \sigma_k + \Delta \sum_i \sigma_i^2, \quad (2)$$

where, as in equation (1), $J > 0$, but now the first sum extends over all elementary triangles $\langle ijk \rangle$ of the triangular lattice. In the original model of [20] $\sigma_i = \pm 1/2$ (then without crystal-field term, i.e. for $\Delta = 0$), while the spin-1 case has $\sigma_i = 0, \pm 1$. It is easily seen that the presence of three-spin interactions results in a four-fold degeneracy of the ground state: there is one ferromagnetic state with all spins up, and three ferromagnetic states with down-spins in two sublattices and up-spins in the third. A useful representation of the sublattice structure can be found in figure 1 of [21].

An exact solution of the original $S = 1/2$ BW model was provided early on by Baxter and Wu [22, 23], supplying the critical exponents $\alpha = 2/3$, $\nu = 2/3$, and $\gamma = 7/6$. In the following, it was also shown that its critical behaviour corresponds to a conformal field theory with central charge $c = 1$ [24, 25]. Due to the four-fold symmetry of the ground state it is expected that the critical behaviour of the BW model is in the same universality class as the $q = 4$ Potts model in two dimensions [26]⁸. While, therefore, the critical exponents of the two models are identical, the same does not apply to the scaling corrections: the 4-state Potts model exhibits logarithmic corrections with the system size [27], whereas the BW model has power-law corrections with a predicted correction-to-scaling exponent $\omega = 2$ [28]. Other models in the same universality class also exist. Examples are the square-lattice Ising model with mixed two- and three-spin interactions [29] as well as a quantum version of the model [30].

Compared to the BC model, the phase diagram of the BW model in the presence of a crystal field is not so well understood, not only regarding the presence of multicritical points but also regarding the question of universality along the second-order transition line. Based on an analogy between the BW model and a diluted four-state Potts model, Nienhuis *et al* [31] pointed out that the phase diagram of the $S = 1$ case exhibits a line of continuous transitions as well as a regime of first-order transitions connected through a multicritical point. In fact, this corresponds to a tetracritical line joining a quintuple line (coexistence of five phases) at a pentacritical point (see, for example, [32] for the terminology relating to multiple and multicritical points). Conversely, Kinzel *et al* [33], using a finite-size scaling method, conjectured that a continuous transition would only occur at $\Delta \rightarrow -\infty$ (the pure BW model). More recent works using Monte Carlo simulations and conformal invariance have indeed favoured the existence of a pentacritical point at finite values of Δ for spin $S = 1$ [10, 34–37]. With this observation the phase diagram of the $S = 1$ BW model turns out to be rather analogous to that of the BC model for the same value of spin. Nevertheless, an accurate estimate of the location of the pentacritical point (pp) is currently not available, complicating the analysis of numerical data in the area of this putative multicritical point: Note the discrepancy in the estimates by Dias *et al* [10], $(\Delta_{\text{pp}}, T_{\text{pp}}) \approx (0.8902, 1.4)$, and Jorge *et al* [35], $(\Delta_{\text{pp}}, T_{\text{pp}}) \approx (1.68288(62), 0.98030(10))$; see also figure 2 in [38]. Recently, there have even been arguments in favour of a first-order transition for the spin $S = 1/2$ model [39] (a mean-field treatment of the $S = 1/2$ model [40] erroneously predicts a first-order transition).

Although it has received little attention to date, it is of course also possible to study the model (2) for spin $S > 1$. For $S = 3/2$, to the best of our knowledge, the only known result stems from a finite-size scaling and conformal invariance study [10] which suggested that one has, along the second-order line (again, a tetracritical line), and close to the region where $\Delta/J \sim z/2$, a short segment of a first-order line with five coexisting phases, i.e. a quintuple line. To the left of this quintuple line one has a pentacritical point and to the right a tetracritical endpoint. From this tetracritical endpoint a low-temperature octuple line (eight coexisting phases) goes down to the point $T = 0$ and $\Delta/J = 3.25$ [10]. Thus, the phase diagram of the BW model with $S = 3/2$ appears to

⁸ As pointed out by E. Domany (private communication) this fact was first noticed by R.B. Griffiths.

differ significantly from that of the corresponding BC model. The universality class of the second-order transition line has also been studied for both values of the spin, $S = 1$ and $S = 3/2$. From renormalisation-group arguments one expects the second-order transition line to remain in the universality class of the $S = 1/2$ model and, therefore, in that of the 4-state Potts model. Indeed, this has been clearly shown to be the case by comparing critical exponents and other renormalisation-group invariants for both spin $S = 1$ [10, 21, 38] and $S = 3/2$ [10] models for a wide range of crystal-field values in the regime $\Delta < 0$. Nonetheless, for positive values of Δ and in closer proximity to the multicritical point, the model develops strong finite-size effects and numerical estimates of critical quantities show a systematic shift away from the expected results, as has been recently reported in [38] for the $S = 1$ model. Even for the case with $\Delta = 0$, carefully crafted simulations utilising rather large system sizes ($L = 240$, where L defines the linear dimension of the lattice) were needed for a clear demonstration of universality in this regime [38]. For $\Delta > 0$, such effects are expected to be even stronger. While it is of course conceivable that the model transitions to a new universality class for $\Delta > 0$, we believe that this is rather unlikely given that there is no change in symmetry. In this respect, the analysis of universal probability distribution functions (PDFs) to be discussed below is hoped to shed new light on this controversial aspect of the problem.

In the present work we focus on issues relating to universality in both models along the second-order transition lines in the $\Delta - T$ plane, studying them in depth by considering the numerically accessible PDFs. The majority of our Monte Carlo simulations are performed via the single spin-flip Metropolis algorithm complemented by histogram methods and finite-size scaling arguments [41, 42]. In particular, for dedicated values of the crystal field we locate the critical points and compute the critical exponent ν of the correlation length by means of a recently developed technique revolving around the zeros of the energy probability distribution (EPD) [43–45]. We then consider the corresponding critical distributions of the energies and magnetisations that are expected to be universal and can hence serve as sensitive indicators for determining universality classes. We remind the reader here that, for the BW model the energy and magnetisation PDFs have previously been considered for the particular case $S = 1/2$ [46–49].

The rest of this paper is organised as follows: In section 2 we elaborate on the necessary theoretical background, namely on the method of EPD zeros and the pathway to the universal energy and magnetisation probability distributions. Subsequently, in section 3, we provide an outline of the employed Monte Carlo methods and simulation protocols. Section 4 contains the presentation and critical discussion of the numerical results for both BC and BW models. Finally, the paper concludes with a summary and some additional remarks in section 5.

2. Theoretical background

Our study of the BC and BW models is twofold: an analysis of the zeros of the EPD yields our main estimate of the transition temperatures and the shift exponent $1/\nu$. Motivated by the observations made there, the question of universality is then examined in detail by a comparison of the universal critical distributions of the energy and magnetisation of the models. Here we provide the necessary background for these studies.

2.1. EPD zeros

Consider a system of statistical mechanics with a discrete energy spectrum with levels $E = E_n = \varepsilon_0 + n\varepsilon$, $n = 0, 1, \dots, \mathcal{N}$, with ε_0 being the ground state energy and ε the level spacing. We can write the partition function of this system in the following form:

$$\mathcal{Z}_\beta = \sum_E g(E) e^{-\beta E} = e^{-\beta \varepsilon_0} \sum_{n=0}^{\mathcal{N}} g_n e^{-\beta n \varepsilon} = e^{-\beta \varepsilon_0} \sum_{n=0}^{\mathcal{N}} g_n z^n, \quad (3)$$

where $g(E)$ is the number of states with energy E (i.e. the density of states) and $\beta = 1/(k_B T)$ with k_B being Boltzmann's constant and T the temperature; in the two last identities we use the shorthand notation $g_n = g(E_n)$ and $z = e^{-\beta \varepsilon}$.

As noted by Fisher [50], the analytic structure of the partition function and hence the occurrence of phase transitions can be understood from its factorised form that follows immediately once one knows all of its *zeros*. For a finite system $\mathcal{Z}$ is a polynomial of degree $\mathcal{N}$ in z and it hence has exactly $\mathcal{N}$ complex zeros. Since g_n is real and non-negative, none of the zeros are real, but they come in complex conjugate pairs. However, as shown by Fisher, for $\mathcal{N} \rightarrow \infty$ at least one root approaches the real axis at $z_c = e^{-\beta_c \varepsilon}$, and this event indicates the occurrence of a phase transition at $\beta_c = 1/k_B T_c$. For finite lattices one cannot directly investigate this limit $\mathcal{N} \rightarrow \infty$ but, instead, one usually studies the *dominant* zero, i.e. the zero closest to the real axis. Since it is not completely straightforward to sample partition function zeros in a Monte Carlo study, a slightly modified approach was proposed in [43]. Inserting unity in the form $1 = e^{-\beta_0 E} e^{+\beta_0 E}$ into equation (3), where β_0 is some reference inverse temperature, we immediately obtain the expression

$$\mathcal{Z}_\beta = e^{-\Delta \beta \varepsilon_0} \sum_{n=0}^{\mathcal{N}} h_{\beta_0}(n) x^n, \quad (4)$$

where $\Delta \beta = \beta - \beta_0$, $h_{\beta_0}(n) = g_n e^{-\beta_0 E}$, and $x = e^{-\Delta \beta \varepsilon}$. In this way, the set $\{x_i\}$ of zeros of the above equation are just the renormalised set of Fisher zeros $\{z_i\}$ resulting from equation (3), since $x = e^{-\beta \varepsilon} / e^{-\beta_0 \varepsilon} = z / e^{-\beta_0 \varepsilon}$. We note that $h_{\beta_0}(n) = g_n e^{-\beta_0 E}$ is the (unnormalised) EPD at inverse temperature β_0 . Hence it can be easily estimated numerically from an energy histogram sampled at β_0 . Computing the zeros of an estimate of equation (4) with $h_{\beta_0}(n)$ replaced by the histogram $\hat{h}_{\beta_0}(n)$ hence provides an easy pathway towards an analysis of some partition function zeros. Since the tails of the EPD are less populated, a cutoff δ is introduced by neglecting all coefficients $h_{\beta_0}(n) \leq \delta$, reducing significantly the degree of the polynomial for larger lattices. In order to avoid having to cope with the adverse numerical implications of very large polynomial coefficients, one can further normalise the histogram by considering $h_{\beta_0}(n)/h_{\beta_0}^{(\max)}$, where $h_{\beta_0}^{(\max)}$ is the maximum value of the histogram.

Now, when $\beta_0 = \beta_c$, the zero corresponding to the phase transition for the infinite system appears at $x_c = (1, 0)$. For a finite lattice of size L this implies that the dominant zero x_c^L should be close to the point $(1, 0)$ if we choose $\beta_0 \approx \beta_c^L$. This observation suggests an iterative approach for locating β_c^L by considering the location of the dominant zero

x_c^L for a given choice of β_0 [43–45]. One starts with an initial guess for β_c^L denoted by $\beta_0^{j=0}$ and iterates through the following steps:⁹

- (1) Simulate the system at $\beta = \beta_0^j$ and construct a histogram $\hat{h}_{\beta_0^j}$.
- (2) Determine all the zeros x_i^j , $i = 1, \dots, \mathcal{N}$ of the polynomial

$$\sum_{n=0}^{\mathcal{N}} \hat{h}_{\beta_0^j}(n) x^n.$$

- (3) Find the dominant zero x_c^j . Then:
 - (a) if x_c^j is (to a prescribed level of accuracy) close enough to the point $(1, 0)$, take $x_c^L = x_c^j$ and stop;
 - (b) else, take

$$\beta_0^{j+1} = -\varepsilon^{-1} \ln [\operatorname{Re}(x_c^j)] + \beta_0^j \quad (5)$$

and repeat at step (1).

In the above equation (5), $\operatorname{Re}(x_c^j)$ denotes the real part of the complex root x_c^j . At the end of this process, not only do we have x_c^L but also $\beta_0^j = \beta_0^L \approx \beta_c^L$, the desired pseudocritical inverse temperature, corresponding to the temperature T_c^L of the most relevant zero for the lattice size L . We can then make use of the established finite-size scaling form for pseudocritical inverse temperatures,

$$T_c^L = T_c + bL^{-1/\nu} (1 + b'L^{-\omega}), \quad (6)$$

where T_c is the critical temperature of the infinite system, b and b' are non-universal constants, ν the critical exponent of the correlation length, and ω the correction-to-scaling exponent. An analogous behaviour is expected for the scaling of the dominant zero [43]

$$x_c^L = x_c + bL^{-1/\nu} (1 + b'L^{-\omega}). \quad (7)$$

Thus, the real part approaches $\operatorname{Re}(x_c^L) \rightarrow 1$, while the imaginary part goes to zero as [43]

$$\operatorname{Im}(x_c^L) \sim L^{-1/\nu} (1 + b'L^{-\omega}). \quad (8)$$

Although in the above scaling equations (7) and (8) we have included a correction-to-scaling term proportional to $L^{-\omega}$, it turns out that in our numerical data these corrections are very small and thus the extra term was not included in those fits.

2.2. Critical energy and magnetisation PDFs

Universality classes are most often characterised by the values of critical exponents, sometimes also by comparison of universal amplitude ratios. Much less attention is being paid to universal *distribution functions* of the extensive thermodynamic variables

⁹ We note that this approach is not expected to yield reliable estimates of all or even the subleading zeros.

such as the energy and magnetisation [51, 52], although they naturally contain much more information than the single numbers of exponents and amplitude ratios. Here, we find that such distributions are quite useful as they indeed provide a fingerprint of the underlying universality class. Most of the first studies on the topic involved the computation of the magnetisation (or order-parameter) PDFs in Ising-like models [13, 51, 53–57], due to the main interest being primarily the location of first-order transition lines and multicritical points. Here, we will also consider the energy PDF, and find it rather more useful for comparing models than the magnetisation distributions. In the present section, we will describe the formalism for both cases in a unified language.

According to fundamental scaling arguments, the general form of the critical PDF of the density $x = X/N$ of an extensive thermodynamic variable X in a system of edge length L and number of sites $N = L^d$ is expected to take the form [51, 52]

$$P_L(x) = aL^u P^*[bL^v(x - x_0)] = aL^u P^*[bL^v\chi], \quad (9)$$

where $x_0 = X_0/N = \langle X \rangle/N$ is the expectation value of x , u and v are critical exponents, and a and b are non-universal metric constants. Importantly, here P^* is the *universal* scaling function related to the PDF of x . Normalisation of $P_L(x)$ as a probability distribution implies that $u = v$ and one can assume without loss of generality that $a = b$ [51]. It is often convenient to consider directly the shifted scaling variable $\chi = x - x_0$ as we shall do below.

In a numerical setting, we can generate an estimate of P_L by constructing a histogram $\hat{P}_L$ of values X from a time series $X_t, t = 1, \dots, T$ of length T of measurements of X taken at (or very close to) the critical temperature. We assume here that X has a discrete spectrum with $X \in \Omega_X = \{X_{\min}, X_{\min} + \Delta X, X_{\min} + 2\Delta X, \dots, X_{\max}\}$ (for a continuous spectrum one also naturally arrives at this form through some binning procedure). Formally, the normalised histogram is then given by

$$\hat{P}_L(X) = \frac{1}{T} \sum_{t=1}^T \delta_{X_t, X}, \quad X \in \Omega_X. \quad (10)$$

By construction, one has $\sum_{X \in \Omega_X} \hat{P}_L(X) = 1$ and we can use the empirical histogram to estimate X_0

$$\hat{X}_0 = \frac{1}{T} \sum_{t=1}^T X_t = \sum_{X \in \Omega_X} \hat{P}_L(X) X.$$

Since X is extensive, the range $X_{\max} - X_{\min}$ grows proportional to N , while we can assume that the spacing ΔX is independent of N . Then, the possible values for the density $x = X/N$ become quasi continuous for large N since we can write

$$1 = \sum_{X \in \Omega_X} \hat{P}_L(X) = \sum_{X=X_{\min}}^{X_{\max}} \frac{\hat{P}_L(X)}{\Delta X/\omega_X} \frac{\Delta X}{\omega_X} \xrightarrow{N \gg 1} \int_{x_{\min}}^{x_{\max}} \frac{\hat{P}_L(Nx)}{\Delta X/\omega_X} dx, \quad (11)$$

where $\omega_X = |\Omega_X|$ denotes the number of discrete values of the variable X ; clearly, for $N \gg 1$ one finds that $dx = \Delta X/\omega_X \ll 1$ and x approaches a continuous variable. We

hence get an estimate of the universal scaling function of equation (9),

$$\tilde{P}_L(x) = \frac{\hat{P}_L(Nx)}{\Delta X/\omega_X}. \quad (12)$$

Normalisation implies that

$$\int P_L(x) dx = \int bL^u P^*(bL^u \chi) d\chi = \int P^*(\chi^*) d\chi^* = 1,$$

where $\chi^* \equiv bL^u \chi$. The corresponding distribution variances are

$$\begin{aligned} \sigma^2 &= \int (x - x_0)^2 P_L(x) dx = \int bL^u \chi^2 P^*(bL^u \chi) d\chi \\ &= b^{-2} L^{-2u} \int \chi^{*2} P^*(\chi^*) d\chi^* = b^{-2} L^{-2u} \sigma^{*2}. \end{aligned} \quad (13)$$

We can use the metric factors b to ensure that the universal PDF P^* has *unit* variance, i.e. $\sigma^* = 1$. In that case, the basic relation (9) implies that

$$P^*(\chi/\sigma) = \sigma P_L(x). \quad (14)$$

We can then use the histogram (12) to estimate the universal PDF P^* . The convenience of the above procedure is now evident: from standard Monte Carlo simulations we are able to estimate $P_L(x)$ as well as the standard deviation σ and, without the need for knowing the exponent u , we can easily estimate the universal PDF P^* from equation (14).

While this formalism is fairly general, the most relevant cases clearly are $x = m$ for the magnetisation (or another order parameter such as the sub-lattice magnetisation m_j) and $x = e$ for the internal energy. For $x = m$ it has been shown in the original work [51] that $u = \beta/\nu$, while for $x = e$ one finds $u = (1 - \alpha)/\nu$ [52]. Here, α refers to the specific-heat exponent, while β is the exponent of the magnetisation, and ν denotes the correlation-length exponent. Note that the exponent u is just the scaling dimension of the given operator. We also note that for the case of $x = e$, equation (10) is identical to the numerical estimate of the probability density function used for the EPD zeros approach discussed above. In addition to the data collected in that context, we found it worthwhile to conduct a single, long simulation at the best available estimate of the critical temperature, which is the basis for the results presented below. Finally, also histogram reweighting techniques may be used to improve statistics [58]. It is easily possible to work out the elements of Ω_X . For the BW model at zero crystal field, for example, the energies lie in the symmetric range $-2L^2 S^3 \leq E \leq 2L^2 S^3$ with spacing $\Delta E = 1$ for both $S = 1$ and $S = 3/2$.

3. Monte Carlo simulations: setup and parameters

The Monte Carlo simulations reported in this paper were carried out using the single spin-flip Metropolis algorithm on square (BC model) and triangular (BW model) lattices

of linear size L with periodic boundary conditions. Simulations were conducted for several values of the crystal field in the range $-2 \leq \Delta \leq 1$ in order to carefully investigate the question of universality in the two models. Owing to the uncertainty in the precise location of the pentacritical point as well as the observed strong corrections to finite-size scaling for the BW model (see below), our simulations only reached up to $\Delta = 0.5$ for this case. In all simulations we set $J = 1$ and $k_B = 1$, so that the crystal-field coupling and the temperature are measured in units of J and J/k_B , respectively. Note that for the BW model in order to properly accommodate the three different ferrimagnetic phases at low temperatures, all values of L were selected as multiples of three. Further, the number of sweeps or Monte Carlo steps per spin (MCS) used for thermalisation and for computing average values of the thermodynamic quantities were chosen after several test runs designed to estimate the requirements for different system sizes L as well as different values of the spin S and the crystal field Δ .

For the analysis of the EPD zeros, we considered lattices in the range $16 \leq L \leq 128$ for the BC model and $18 \leq L \leq 120$ for the BW model, respectively. During thermalisation the first $N_{\text{therm}} = 10^5$ (resp. 3×10^5) MCS were discarded for $L \leq 45$ (resp. $L > 45$). The histograms were then obtained with a total of $N_{\text{MCS}} = 10^8$ MCS and the corresponding complex zeros were computed through the *GNU Scientific Library* [59], which uses balanced-QR reduction of the companion matrix. The criterion to halt the iteration process of getting the pseudocritical temperatures T_c^L was considered to be satisfied when $T_0^{j+1} - T_0^j \leq \eta$, with $\eta = 10^{-4}$. Equivalent results were obtained when considering $|\text{Re}(x_c^L) - 1| \leq \eta$.

For both models, after obtaining the critical temperature, estimates of universal PDFs of the energy and magnetisation were usually computed using the larger system sizes with additional simulations comprising $N_{\text{MCS}} = 12 \times 10^8$ MCS after thermalisation. When necessary, single histogram reweighing techniques were used to obtain the PDFs close to the estimated critical temperatures [58].

4. Results

4.1. The BC model

We first applied the approaches presented above in sections 2 and 3 to the BC model that is better understood than the BW model, thus creating a reference for the simulations of the latter, but also to gauge the reliability and accuracy of the methods.

In figure 1 we show the distribution of the EPD zeros in the complex plane for the BC model at $\Delta = 0$ and at the pseudo-critical temperatures T_c^L . Results for both spins, i.e. $S = 1$ and $S = 3/2$, are shown. In particular, the right panels present a magnified view around the dominant root x_c^L , illustrating that indeed the imaginary part $\text{Im}(x_c^L)$ is close to zero, while the real part $\text{Re}(x_c^L)$ is close to one. For each value of the spin S , the same pattern of the distribution of the EPD zeros is obtained, not only for different system sizes (with the number of roots rapidly increasing with L) but also for different values of Δ .

The finite-size scaling analysis of the imaginary part $\text{Im}(x_c^L)$ is depicted in figure 2 for the spin values $S = 1$ and $S = 3/2$ as well as for the full spectrum of Δ values considered

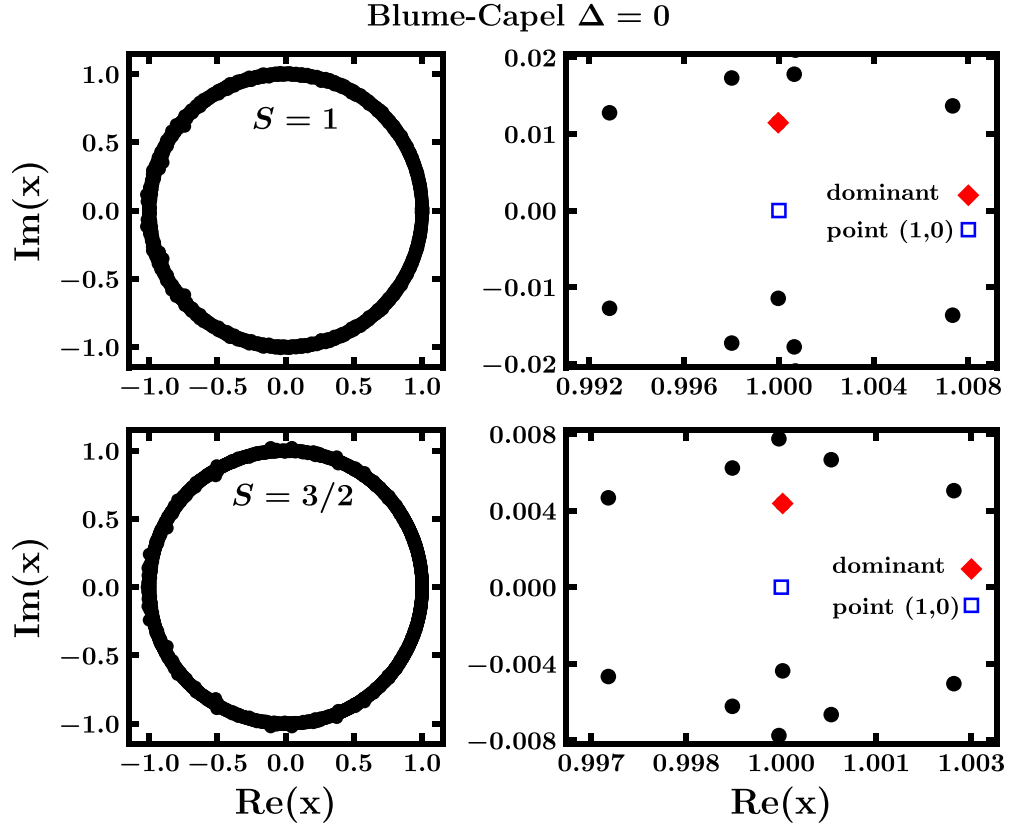


Figure 1. Distribution of the EPD zeros in the complex plane for the Blume–Capel model at $\Delta = 0$ and at T_c^L . Results for $S = 1$ (upper panels) with $L = 80$ and $S = 3/2$ (lower panels) with $L = 100$ are shown. The panels on the right show in more detail the regions closer to the dominant zero. The diamond symbols mark the dominant root and the open squares are the reference point $(1, 0)$, as indicated in both panels.

in this work. As a reference, we also include results for the Ising model. All lines are linear fits to equation (8) (excluding the correction term) with the magnitude of the slope providing $1/\nu$. The corresponding fit results are listed in table 1. It is interesting to note that all fitted lines are parallel to each other and to that of the Ising data, leading to the conclusion of a shared critical exponent $\nu = 1$ corresponding to the Ising universality class. This is verified to a good numerical accuracy by the extrapolated values reported in table 1 for both values S of the spin, as we move along the second-order transition line (always for $\Delta < \Delta_t \approx 1.966$).

At this point we can use equation (6) to estimate the critical temperatures T_c . Figure 3 presents the scaling behaviour of the pseudocritical temperatures T_c^L of the $S = 1$ and $S = 3/2$ BC model at two values of the crystal field, as indicated. The numerical data are plotted against $L^{-1/\nu}$, with the ratio $1/\nu$ taken from table 1. Here, there is no significant change in the fits if we consider $L^{-(1/\nu) \pm \sigma(1/\nu)}$, where $\sigma(1/\nu)$ is the corresponding error in the critical exponent estimate. In each panel we show three separate fits: two linear fits (assuming $b' = 0$ in equation (6)) with $L > 24$ (red line) and $L > 30$ (blue line), and an additional fit taking into account corrections to scaling, by fixing the

Universal energy and magnetisation distributions in the Blume-Capel and Baxter-Wu models

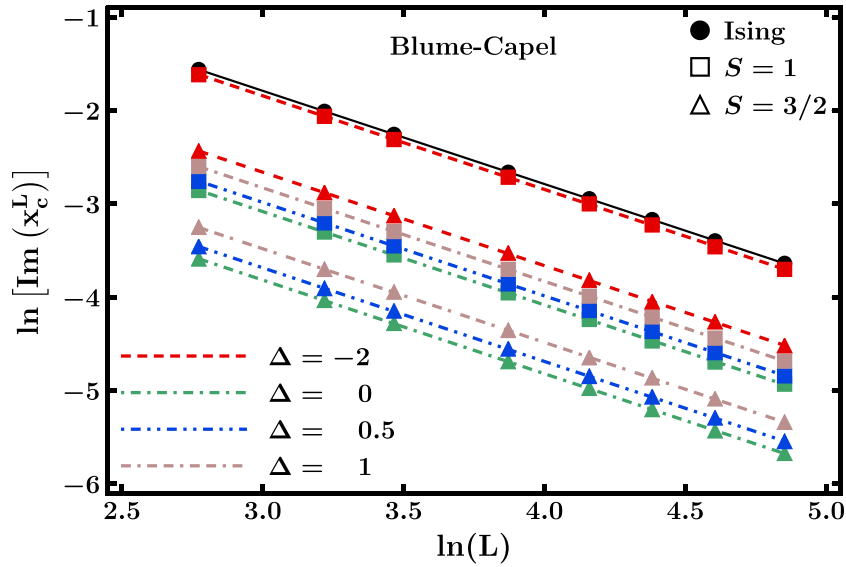


Figure 2. Finite-size scaling behaviour of the imaginary part $\text{Im}(x_c^L)$ of the dominant EPD zero for the Blume–Capel model with spin $S = 1$ (squares) and $S = 3/2$ (triangles) at several values of the crystal-field coupling Δ . For comparison, data for the spin $S = 1/2$ case, i.e. the Ising ferromagnet, are also shown (circles). Note the doubly-logarithmic scale of the axes.

exponent ω to the value $7/4$ found for magnetic quantities in the Ising model¹⁰ (black line). Although for the case of $\Delta > 0$ ($\Delta = 1$ in this instance) the numerical data start to very slightly deviate from a straight line, all results for T_c are quite comparable and their average is shown in table 1.

We note that, for technical reasons, we did not systematically study the statistical fluctuations in the location of the leading zero¹¹. Instead, we merely estimate the statistical uncertainty in the estimates for $1/\nu$ and T_c from the error estimates of fits of the functional forms (6), (7) and (8) to the data. Note that in table 1 we also include previous results from series expansion [19] and conformal invariance [9, 10], clearly suggesting an overall acceptable agreement regarding the critical temperatures of the BC model along the second-order transition line.

While there is consistency in the value of $1/\nu$ along the transition line, cf the data in table 1, further information is required to uniquely characterise a universality class. Here, we turn our attention to the universal PDFs of the main thermodynamic observables, in particular the energy and magnetisation, to achieve a fuller characterisation. In figure 4 we show our estimates of the energy and magnetisation PDFs for the BC model with spins $S = 1$ and $S = 3/2$ and crystal fields $\Delta = 0.5$ and $\Delta = 1$, respectively.

¹⁰ See, for example, the discussion in the supplementary material of [60]. We note, however, that other values of ω have also been reported for certain quantities in the 2D Ising model, most notably $\omega = 4/3$ and $\omega = 2$, and in some cases also the analytic corrections might be dominant. In our case, the observed corrections are so weak (compared to the statistical accuracy of our data) that numerically we hardly see a difference between these choices.

¹¹ The results of [61] for the spin-1/2 Ising model showed that, although the overall map of zeros fluctuates substantially as a result of noise in the histogram, the location of the dominant zero is relatively stable.

Universal energy and magnetisation distributions in the Blume-Capel and Baxter-Wu models

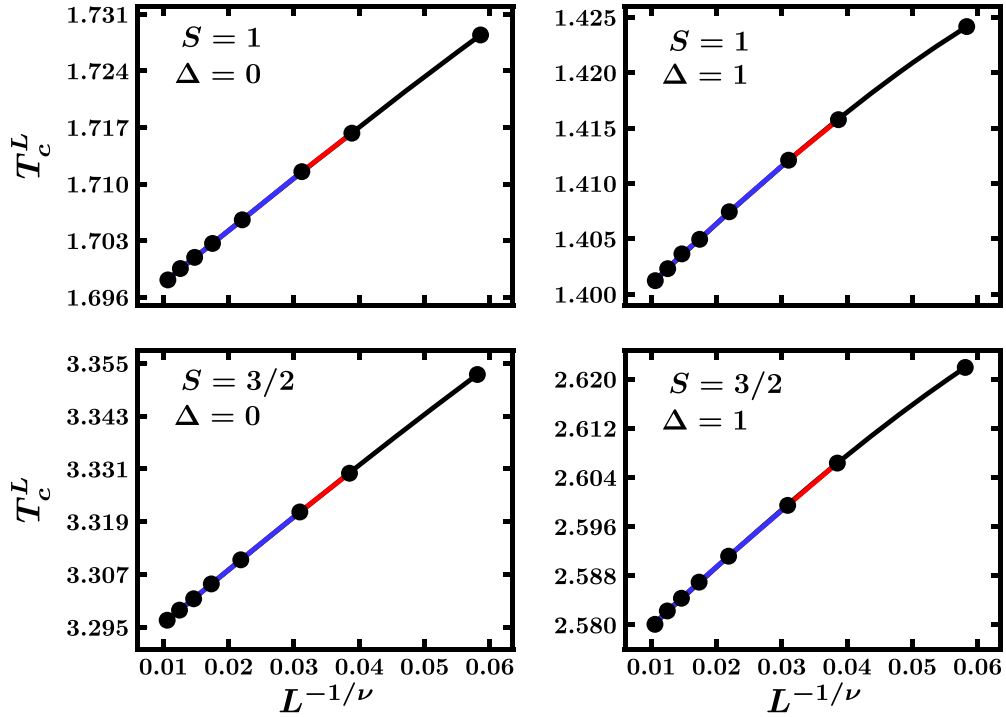


Figure 3. Finite-size scaling behaviour of the pseudocritical temperatures T_c^L as extracted from the EPD zeros for the $S=1$ (upper panels) and $S=3/2$ (lower panels) Blume–Capel models at two values of the crystal field, $\Delta=0$ (left panels) and $\Delta=1$ (right panels). The lines show fits of the functional form (6) to the data (see main text for details).

These distributions were computed for the lattice size $L=128$ at the corresponding pseudocritical temperatures of the system. We underline that on the scale of figure 4, the results for $L=80$ and $L=100$ (not shown) fall on top of those for $L=128$, in particular for the energy distribution. For reference, also the PDFs for the spin $S=1/2$ Ising ferromagnet are included in both panels of figure 4.

Without doubt, the energy PDFs shown in figure 4 constitute a strong indication of Ising universality. Although the same occurs for the magnetisation distribution functions, some variations can be observed around the two symmetric peaks. These might be due to increased fluctuations implied by critical slowing down in the Metropolis (single-spin flip) dynamics. This problem could certainly be alleviated by using hybrid algorithms such as single-spin flips combined with Wolff cluster updates, a practice that was shown to effectively improve the simulations in the BC model [62, 63]. However, we decided to implement in this work only the Metropolis algorithm for reasons of consistency with the parallel study of the BW model, for which an effective hybrid procedure is harder to establish.

In summary, with the help of only the Metropolis algorithm and investing a rather moderate computational effort, the energy PDF proves to be a robust tool in ascertaining the critical behaviour and universality of the BC model. This suggests that the energy PDF could be an underestimated device in numerical studies of critical phenomena.

Universal energy and magnetisation distributions in the Blume-Capel and Baxter-Wu models

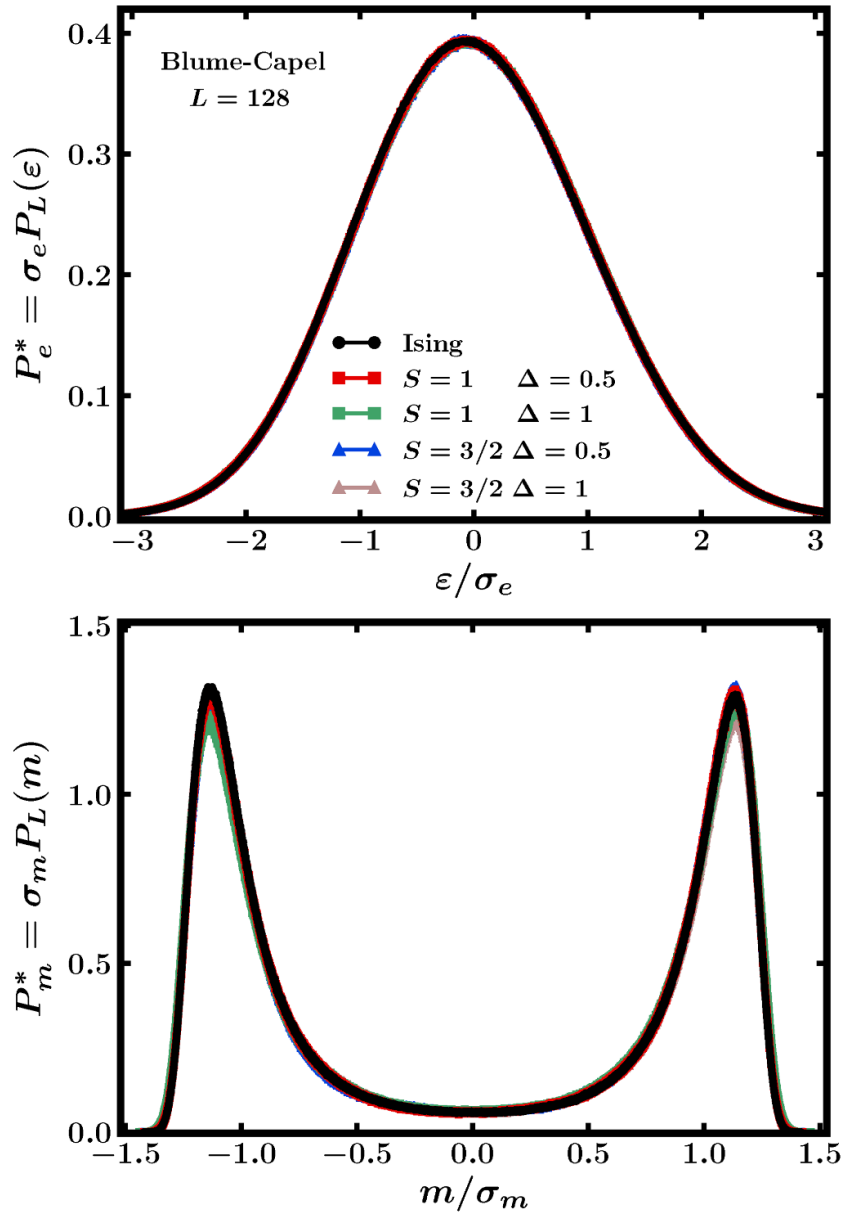


Figure 4. Universal PDFs of the shifted energy density $\varepsilon = e - e_0$ (upper panel) and the magnetisation density m (lower panel) in the Blume–Capel model for a system of linear size $L = 128$. Several distributions are illustrated for spin $S = 1$ (squares) and $S = 3/2$ (triangles) and two values of the crystal field, namely $\Delta = 0.5$ and $\Delta = 1$. For comparison, the reference distributions of the Ising ferromagnet (circles) are also sketched. Here, σ_E and σ_M denote the standard deviations of the energy and magnetisation histograms, respectively, see section 2.2 for details.

4.2. The BW model

In a previous work [38], we already studied the $S = 1$ BW model with the help of the EPD zeros method, and we will use some of the previously obtained numerical estimates

Table 1. Summary of the main results obtained in the current work from the recently developed EPD zeros method [43–45] for the two-dimensional Blume–Capel and Baxter–Wu models. For comparison the third column of the table includes some earlier reference estimates of critical temperatures ($T_c^{(\text{ref})}$) obtained from series expansion [19] and conformal invariance [9, 10]. The result $T_c^{(\text{ref})} = 1.5300$ for the $S = 1$ Baxter–Wu model at $\Delta = 0.5$ has been privately communicated to us by the authors of [10]. We note the expected values $1/\nu = 1$ and 1.5 for the Blume–Capel and Baxter–Wu models, respectively.

Δ	T_c	$T_c^{(\text{ref})}$	$1/\nu$
Blume–Capel			1
$S = 1$			
–2	2.0013(3)		1.001(2)
0	1.6938(1)	1.69 378(4) [19]	1.001(2)
0.5	1.5662(1)	1.5664(1) [19]	1.002(2)
1	1.3977(1)	1.3986(1) [19]	1.005(2)
$S = 3/2$			
–2	4.1187(2)		1.002(2)
0	3.2884(6)	3.287(2) [9]	1.004(2)
0.5	2.9727(3)	2.972(3) [9]	1.003(2)
1	2.5740(3)		1.004(2)
Baxter–Wu			1.5
$S = 1$			
–2	1.9796(4)		1.503(1)
–1	1.8502(3)	1.8503 [10]	1.515(2)
0	1.6606(5)	1.6606 [10]	1.541(2)
0.5	1.5301(3)	1.5300	1.605(3)
$S = 3/2$			
–2	5.6645(5)		1.523(2)
–1	5.2576(2)	5.2661 [10]	1.543(1)
0	4.7057(6)		1.607(2)
0.5	4.3839(5)		1.667(4)

to facilitate the discussion. A summary of results for both the $S = 1$ and $S = 3/2$ models is shown in table 1, together with previous estimates from conformal invariance [10].

When we apply the EPD zeros method to the $S = 3/2$ model, the distribution of zeros in the complex plane and the corresponding scaling plots of $\text{Im}(x_c^L)$ and T_c^L (for the latter using now the putative correction term with $\omega = 2$) all appear very similar to those for the $S = 1$ case (not shown), with the exception of the asymptotic values of non-universal quantities such as the transition temperatures. Comparing to previous

Universal energy and magnetisation distributions in the Blume-Capel and Baxter-Wu models

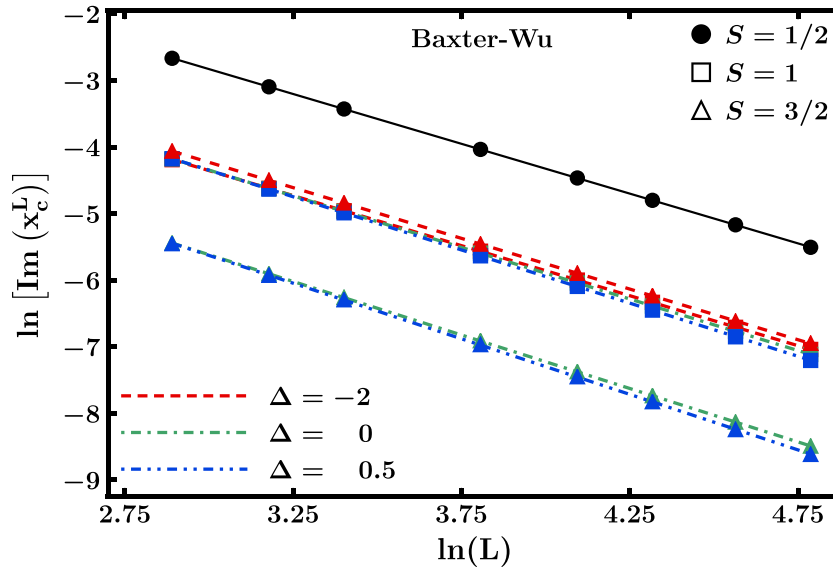


Figure 5. Finite-size scaling behaviour of the imaginary part $\text{Im}(x_c^L)$ for the Baxter–Wu model with spin $S=1$ (squares) and $S=3/2$ (triangles) at several values of the crystal-field coupling Δ . The circles in this case refer to the spin $S=1/2$ model.

results, we find that the critical-temperature estimates from the EPD zeros method are comparable to those from conformal invariance within error bars for the $S=1$ model, while the agreement for $S=3/2$ is a bit less convincing, cf the data collected in table 1. Increasing the number of spin states seems to require longer simulations¹².

On the other hand, by renormalisation-group arguments the critical exponent ν is expected to maintain its original value of $2/3$ (or $1/\nu=3/2$ in the notation used in the present work), independent of S and Δ , as long as we move along the second-order transition line of the phase boundary. A typical illustration that combines data for all spin values S studied and various values of Δ is given in figure 5, which is the analogue of figure 2 for the BW model. For comparison, results for the spin $S=1/2$ model are also shown. In contrast to figure 2, the fits for the BW model appear to show slight deviations from the straight line as both S and Δ increase and, in particular, for $\Delta \gtrsim 0$, which is also evident from the actual extrapolated $1/\nu$ values recorded in table 1. A similar behaviour was also observed for the $S=1$ model at $\Delta=0$ in [38], where it was attributed to the presence of strong finite-size effects due to the proximity to the putative multicritical point. Preliminary simulations of hybrid type consisting of suitable cluster updates [64, 65] with the heat-bath algorithm [66, 67] showed that the critical exponent ν approaches the expected result when considering very large system sizes [38]. However, we should note that for negatives values of Δ a good agreement with the $S=1/2$ model is achieved, both for $S=1$ and for $S=3/2$, as is evident from table 1.

¹² Since the transition temperatures for this model were obtained considering $\eta=10^{-4}$, errors have been estimated by $(2-3)\sigma_f$, with $\sigma_f \sim 10^{-5}$ the variance of the corresponding fits.

In order to resolve this conundrum, it is worthwhile to explore in detail the universal PDFs of the energy and magnetisation of the BW model, a task involving considerably less computational effort than the high-precision studies of the critical exponents. To set the stage, we first consider these distributions for the case $S = 1/2$, where there is some previous work for the energy [47, 49] and total magnetisation [46, 48]. Here, we provide more accurate data for larger systems, and we also include an analysis based on the sublattice magnetisations [21, 38].

The corresponding PDFs of the pure spin $S = 1/2$ BW model, computed at the exact critical temperature $T_c = 2.26918\dots$, are shown in figure 6 for several lattice sizes. On the scale of the graph, the energy universal PDF is achieved for $L \geq 60$, while for the magnetisation, a universal PDF is achieved only for the larger lattices $L \geq 120$. While the total magnetisation has a higher peak for a negative value of m (reflecting the fact that two out of the three sublattices have negative spin orientation), the sublattice magnetisations do show a symmetric distribution¹³.

It is worth noting that for a temperature just above the critical one, $T = 2.27055 > T_c = 2.26918\dots$ and system size $L = 150$, the right shoulder in the energy PDF shown in the upper panel of figure 6 evolves into a second peak of the same height as the left one (not shown). This double-peaked function in the energy distribution has been previously interpreted as a sign of a first-order transition in the model [39]. Using histogram reweighting [58] we show in figure 7 for the system sizes studied the energy PDFs computed at the (system-size dependent) temperature where the two peaks are of equal height. There is a clear agreement with the previous results of figure 6, as also here we document graphically the convergence towards a unique density function for $L \geq 60$. This establishes the equal-height temperature as a new pseudocritical temperature of the system. Fitting the functional form of equation (6) to this sequence of pseudocritical points one arrives at the estimate $T_c = 2.2692(1)$,¹⁴ in excellent agreement with the exact result.

Reviewing this first part of results for the spin-1/2 BW model, we should emphasise that figure 7 represents an extension to the energy PDF of a method originally proposed for the magnetisation [68] in determining the critical temperature when one does not know, *a priori*, the universal function. Despite the presence of the double peaks, the analysis in figure 7 also confirms the expected second-order character of the transition, corroborating recent results for the spin-1 model based on a scaling analysis of the surface tension and latent heat at $\Delta \leq 0.5$ [21, 38].

We now turn to the PDFs of the spin-1 and spin-3/2 BW models. These particular PDFs have been computed with much longer simulation times¹⁵ at the estimated critical temperatures as listed in table 1; these PDFs are shown in figure 8. For comparison,

¹³ As a comment we note that in this particular case of the $S = 1/2$ Baxter-Wu model we extended our simulations to the size $L = 180$. However, we observed that while the PDFs for the energy and total magnetisation are almost identical to those of $L = 150$, the sublattice magnetisations have peaks of slightly different heights that alternate depending on the number of Monte Carlo steps (typical of the single spin-flip nature of the Metropolis algorithm). It appears possible that with increasing L , the system spends more time in one of the sublattice phases.

¹⁴ The result $T_c = 2.2692(1)$ comes as an average over the three complementary fitting estimations.

¹⁵ Except for the $S = 1/2$ and $S = 1$ models at $\Delta = -2$ where we used as a reference the system with linear size $L = 150$, for all the other cases we restricted our analysis to the size $L = 120$. This is due to the fact that upon increasing S and Δ simultaneously the necessary computational time to obtain a reasonable distribution becomes prohibitive.

Universal energy and magnetisation distributions in the Blume-Capel and Baxter-Wu models

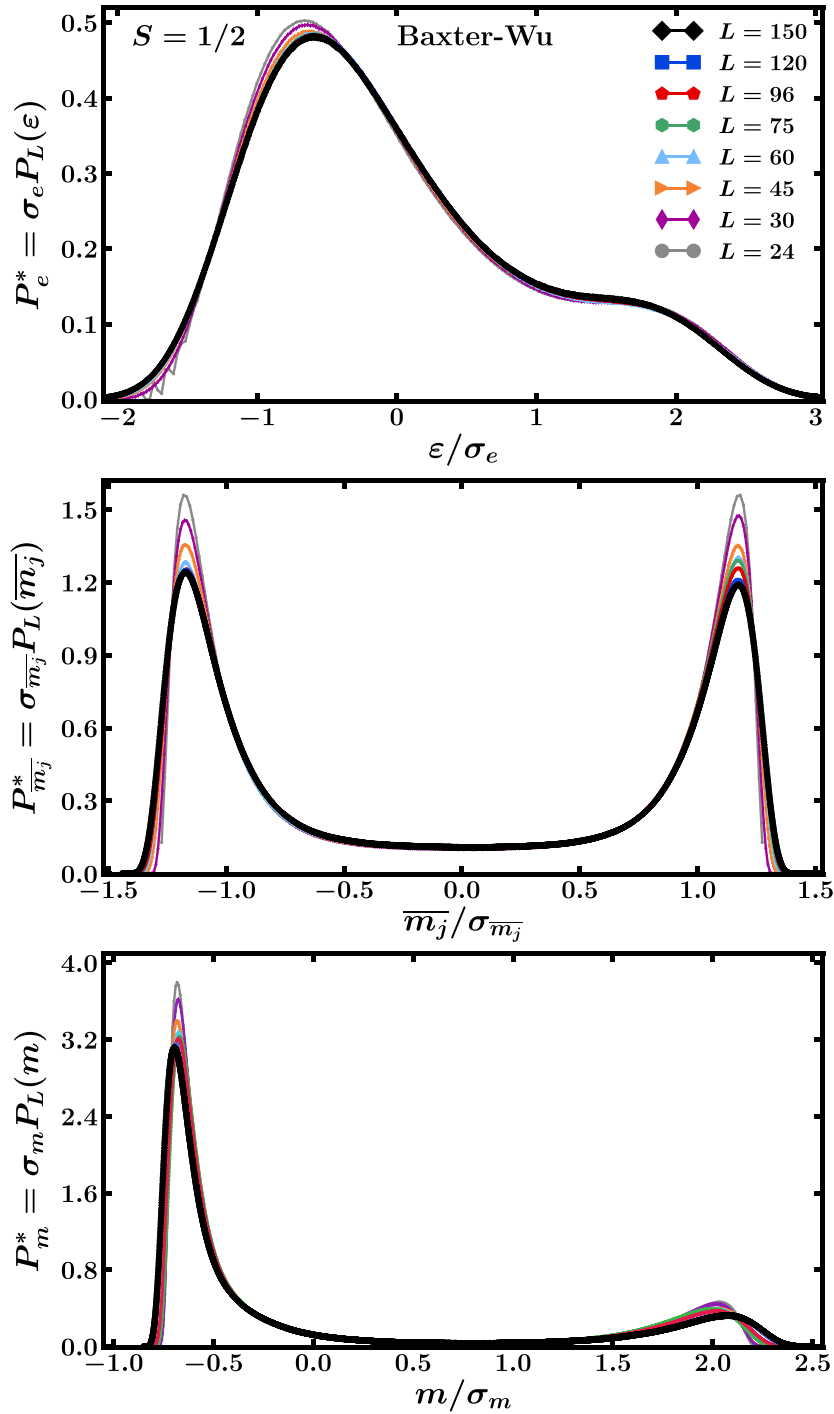


Figure 6. Energy and magnetisation PDFs of the spin-1/2 Baxter–Wu model at the exact critical temperature for different lattice sizes L , as indicated. In particular: the upper panel illustrates the energy PDF (P_e^*), the middle panel that of the average over the three sublattice magnetisations ($P_{\bar{m}_j}^*$ with $j = 1, 2, 3$), and the lower panel that of the total magnetisation (P_m^*).

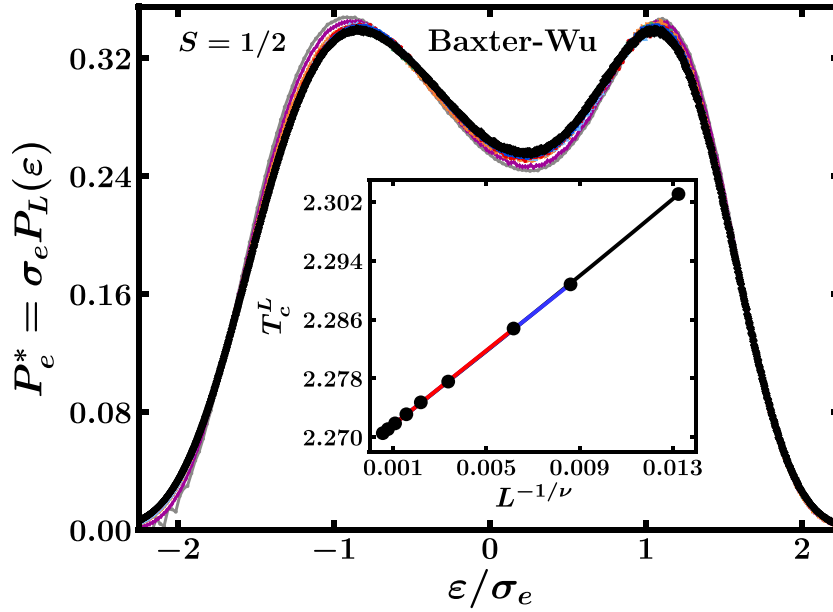


Figure 7. Energy PDFs of the spin-1/2 Baxter–Wu model for the same sequence of lattice sizes as in figure 6. The PDFs were computed at the temperatures where the distributions show two peaks of equal height. The inset shows the finite-size scaling behaviour of the equal-height pseudocritical temperatures T_c^L , where the different coloured lines correspond to the three fits corresponding to figure 3 that were outlined in the previous section.

we also show the PDFs of the spin-1/2 model. While for $\Delta \lesssim 0$ and smaller S the PDFs of different models collapse onto the same universal functions, we observe some deviations in particular for $S = 3/2$ and $\Delta = 0.5$. In order to gauge these, we show in figure 9 the system-size dependence of the observed PDFs, which is seen to be much more pronounced here than for the pure $S = 1/2$ BW model, cf figure 6. Nevertheless, it appears that for the largest system sizes considered, the PDFs have already stabilised to a certain degree, but this impression might be deceptive.

Inspecting the results of figure 8, we hence come to the following conclusions: (i) For $\Delta = -2$ and both values of the spin, all three PDFs manifest a reasonable agreement with the universal ones coming from the spin-1/2 case. We note that this trend is more apparent for the magnetisation PDFs and becomes even more definite for crystal-field values $\Delta < -2$. (ii) For positive values of Δ (as shown in the insets of figure 8) the situation appears to be much more involved. For example, at $\Delta = 0.5$ the distributions of both spin $S = 1$ and $S = 3/2$ models appear to show deviations from that observed for the spin-1/2 model. In fact, the energy PDF starts to develop a secondary peak, where initially one has a shoulder and the sublattice magnetisation PDF presents an additional peak at zero magnetisation ($m_j = 0$). We attribute these discrepancies among the PDFs, which appear to become more pronounced upon increasing the crystal-field Δ in the direction of the pentacritical point and the spin S value, to the same finite-size effects that obscured the analysis of the EPD zeros method in the previous section.

Universal energy and magnetisation distributions in the Blume-Capel and Baxter-Wu models

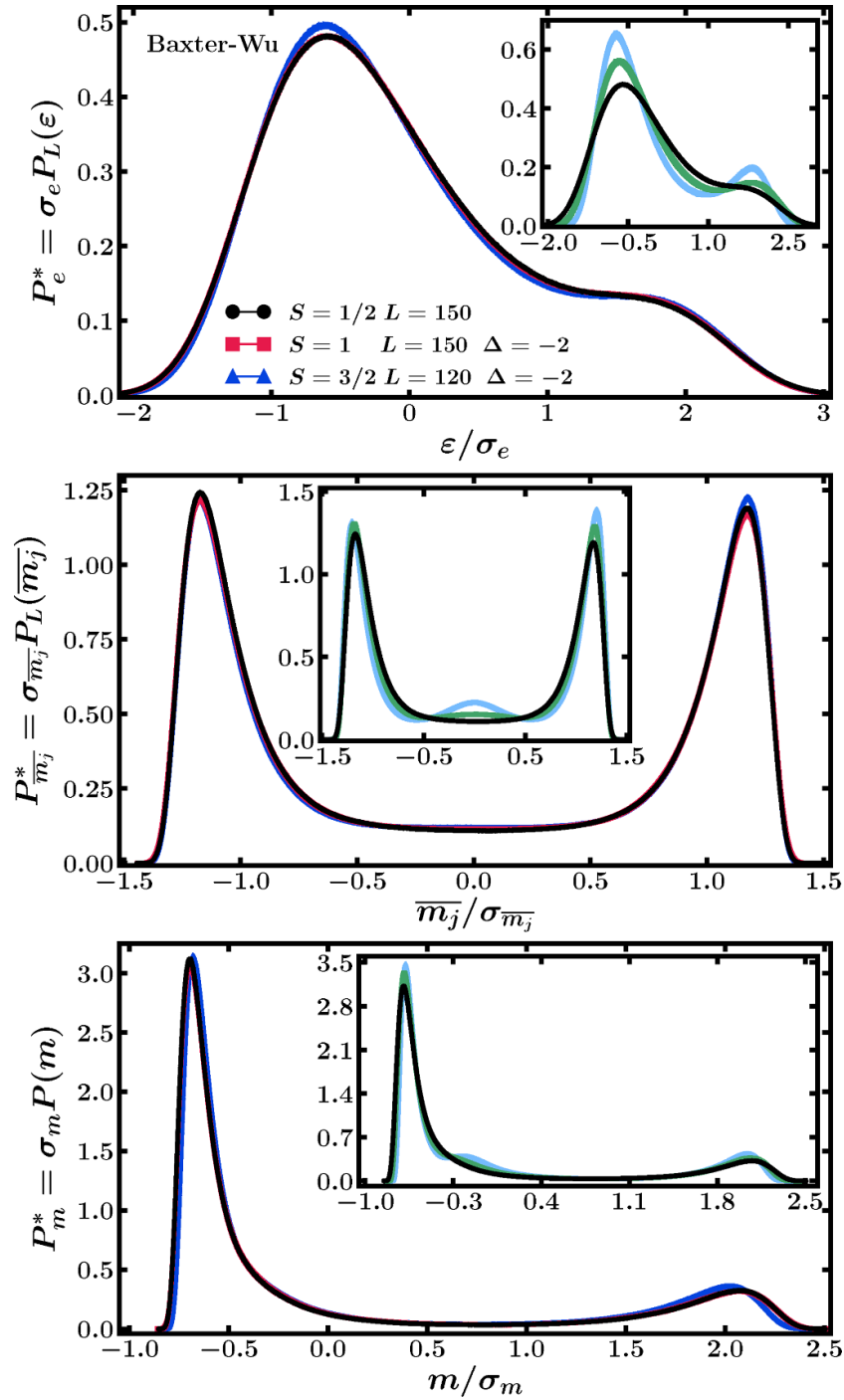


Figure 8. Energy and magnetisation PDFs of the Baxter–Wu model with $S = 1$ (squares) and $S = 3/2$ (triangles) at two values of the crystal field, namely $\Delta = -2$ (main panels) and $\Delta = 0.5$ (insets: green symbols for $S = 1$ and blue symbols for $S = 3/2$, respectively). The upper panel illustrates the energy PDF (P_e^*), the middle panel that of the average over the three sublattice magnetisations ($P_{\bar{m}_j}^*$ with $j = 1, 2, 3$), and the lower panel that of the total magnetisation (P_m^*). The universal PDFs of the spin-1/2 model (circles) are also plotted for reference.

Universal energy and magnetisation distributions in the Blume-Capel and Baxter-Wu models

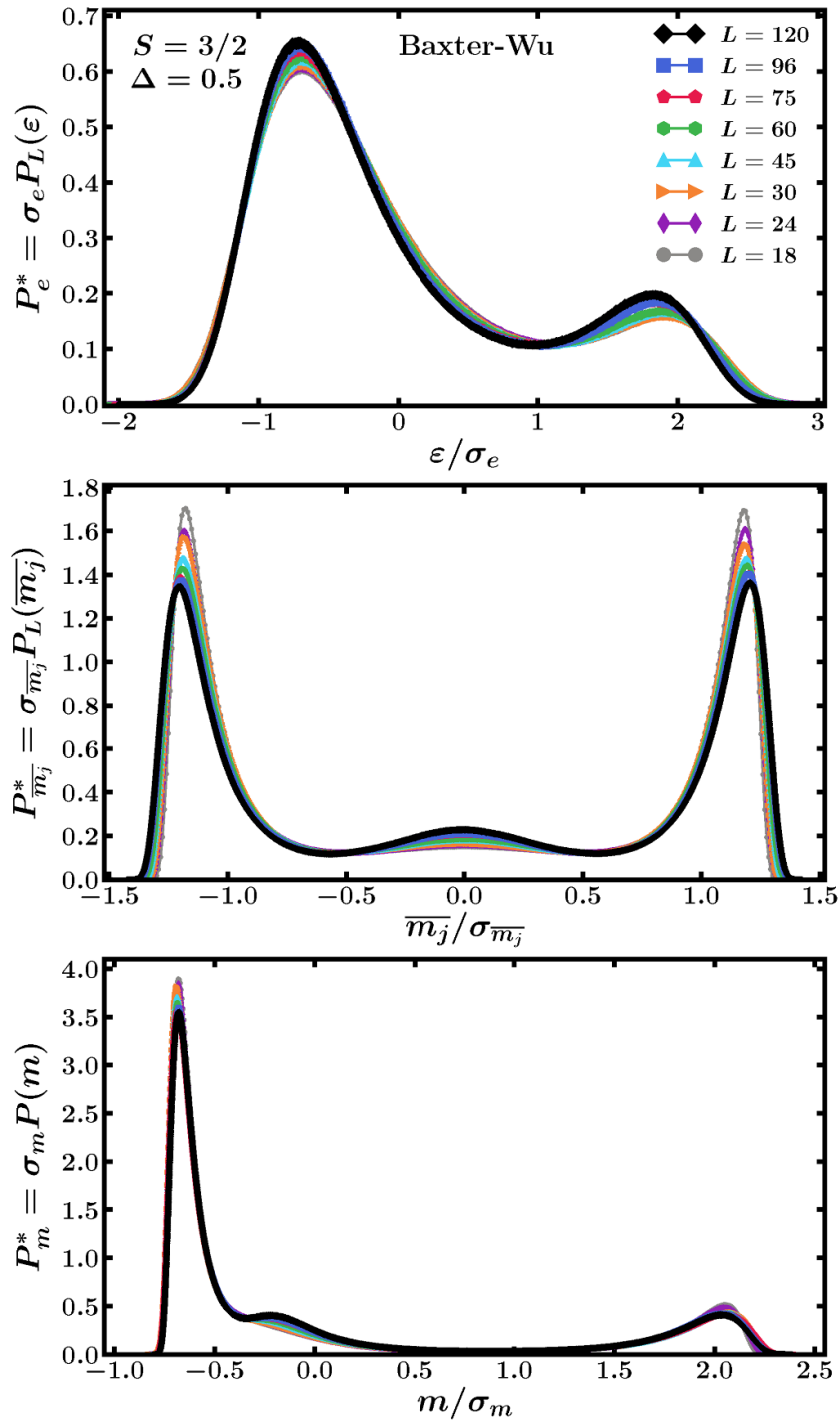


Figure 9. Energy and magnetisation PDFs of the Baxter–Wu model with $S = 3/2$ and $\Delta = 0.5$ for several values of the lattice size L . The upper panel illustrates the energy PDF (P_e^*), the middle panel that of the average over the three sublattice magnetisations ($P_{\bar{m}_j}^*$ with $j = 1, 2, 3$), and the lower panel that of the total magnetisation (P_m^*).

5. Concluding remarks

In the present paper we analysed several critical aspects of the two-dimensional BC and BW models in the presence of a crystal-field coupling Δ and for various values of the spin S . We benefited from a recently proposed method utilising the zeros of the EPD as well as from the physical information encoded in the universal PDFs of the energy and magnetisation. Numerically, we employed extensive Monte Carlo simulations based on the Metropolis algorithm in combination with single-histogram techniques.

For the BC ferromagnet, the reported original results are in excellent agreement with the expected behaviour. Namely, our estimates for the critical exponent ν of the correlation length are fully consistent with the Ising universality class, a result which is further reinforced by the considered probability density functions of both the energy and magnetisation. Additionally, the critical temperatures $T_c(\Delta)$ obtained from standard finite-size scaling are comparable to some of the best known estimates from the recent literature. Similar conclusions in general apply also for the BW model, where both the computation of the critical exponent ν but also the universal shape of the probability density functions suggest that all studied spin- S models share the universality class of the 4-state Potts model. We remind the reader that this in principle anticipated from symmetry arguments [26] and is also in agreement with recent high-accuracy numerical results for the spin-1 model [21]. Still, an intriguing observation emerging from our simulations is the slight deviation of the exponent ν from the expected $2/3$ result as well as various mismatches in the probability density functions upon increasing Δ and S , most strongly visible for $S = 3/2$ and $\Delta = 0.5$. Apparently, the problem becomes much more involved for positive values of Δ , requiring simulations of much larger system sizes, a task which goes beyond the scope of the present work. In this regime, there appear to be strong finite-size effects that were also observed in previous studies of the model [21, 38].

One possible explanation for these deviations arises from the concept of *field mixing* [54]. In studying first-order phase transitions close to a second-order line, with an intervening multicritical point, a mixing of scaling fields (resp. a demixing) turns out to be of paramount importance for identifying a suitable *direction* that minimises corrections to scaling. As the crystal field increases, the second-order transition line gets steeper, bringing about a higher degree of asymmetry in the thermodynamic fields. In this respect, the process of a mixing of such thermodynamic fields may also be relevant along the tetracritical line. Hence, taking such effects into account might be crucial in order to accurately obtain the universal PDFs. This aspect is a worthy subject for future investigations.

Acknowledgments

We would like to thank Prof. Lucas Mól for fruitful discussions on the use of the EPD zeros method and Prof. Gerald Weber for invaluable assistance in the use of

the Statistical Mechanics Computer Lab facilities at the Universidade Federal de Minas Gerais. The work of A Vasilopoulos and N G Fytas was supported by the Engineering and Physical Sciences Research Council (Grant EP/X026116/1 is acknowledged). This research was supported by CNPq, CAPES, and FAPEMIG (Brazilian agencies).

References

- [1] Blume M 1966 *Phys. Rev.* **141** 517
- [2] Capel H W 1966 *Physica* **32** 966; Capel H W 1967 *Physica* **33** 295; Capel H W 1967 *Physica* **37** 423
- [3] Lawrie I D and Sarbach S 1984 *Phase Transitions and Critical Phenomena* vol 9, ed C Domb and J L Lebowitz (Academic Press)
- [4] Plascak J A, Moreira J G and Sá Barreto F C 1993 *Phys. Lett. A* **173** 360
- [5] Costabile E, Roberto Viana J R, Ricardo de Sousa J and Plascak J A 2014 *Physica A* **393** 297
- [6] Moss de Oliveira S, de Oliveira P M C and de Sá Barreto F C 1995 *J. Stat. Phys.* **78** 1619
- [7] Alcaraz F C, Felicio J R D, Köberle R and Stilck J F 1985 *Phys. Rev. B* **32** 7469
- [8] Beale P D 1986 *Phys. Rev. B* **33** 1717
- [9] Xavier J C, Alcaraz F C, Penã Lara D and Plascak J A 1998 *Phys. Rev. B* **57** 11575
- [10] Dias D A, Xavier J C and Plascak J A 2017 *Phys. Rev. E* **95** 012103
- [11] Jung M and Kim D H 2017 *Eur. Phys. J. B* **90** 245
- [12] Jain A K and Landau D P 1980 *Phys. Rev. B* **22** 445
- [13] Wilding N B and Nielaba P 1996 *Phys. Rev. E* **53** 926
- [14] Silva C J, Caparica A A and Plascak J A 2006 *Phys. Rev. E* **73** 036702
- [15] Malakis A, Berker A N, Hadjiagapiou I A, Fytas N G and Papakonstantinou T 2010 *Phys. Rev. E* **81** 041113
- [16] Zierenberg J, Fytas N G and Janke W 2015 *Phys. Rev. E* **91** 032126
- [17] Kwak W, Jeong J, Lee J and Kim D H 2015 *Phys. Rev. E* **92** 022134
- [18] Zierenberg J, Fytas N G, Weigel M, Janke W and Malakis A 2017 *Eur. Phys. J. Spec. Top.* **226** 789
- [19] Butera P and Pernici M 2018 *Physica A* **507** 22
- [20] Wood D W and Griffiths H P 1972 *J. Phys. C* **5** L253
- [21] Vasilopoulos A, Fytas N G, Vatansever E, Malakis A and Weigel M 2022 *Phys. Rev. E* **105** 054143
- [22] Baxter R J and Wu F Y 1973 *Phys. Rev. Lett.* **31** 1294; Baxter R J and Wu F Y 1974 *Aust. J. Phys.* **27** 357; Baxter R J 1974 *Aust. J. Phys.* **27** 369
- [23] Baxter R J 1982 *Exactly Solved Models in Statistical Mechanics* (Academic Press)
- [24] Alcaraz F C and Xavier J C 1997 *J. Phys. A: Math. Gen.* **30** L203
- [25] Alcaraz F C and Xavier J C 1999 *J. Phys. A: Math. Gen.* **32** 2041
- [26] Domany E and Riedel E K 1978 *J. Appl. Phys.* **49** 1315
- [27] Wu F-Y 1982 *Rev. Mod. Phys.* **54** 235
- [28] Barber M N 1976 *J. Phys. A: Math. Gen.* **9** L171
- [29] Turban L 1982 *J. Phys. Lett.* **43** 259
- [30] Iglói F 1987 *J. Phys. A: Math. Gen.* **20** 2651
- [31] Nienhuis B, Berker A N, Riedel E K and Schick M 1979 *Phys. Rev. Lett.* **43** 737
- [32] Dias D A, Lima F W S and Plascak J A 2022 *Entropy* **24** 63
- [33] Kinzel W, Domany E and Aharony A 1981 *J. Phys. A: Math. Gen.* **14** L417
- [34] Costa M L M, Xavier J C and Plascak J A 2004 *Phys. Rev. B* **69** 104103
- [35] Jorge L N, Martins P H L, Da Silva C J, Ferreira L S and Caparica A A 2021 *Physica A* **576** 126071
- [36] Costa M L M and Plascak J A 2004 *Braz. J. Phys.* **34** 419
- [37] Costa M L M and Plascak J A 2016 *J. Phys.: Conf. Ser.* **686** 012011
- [38] Macêdo A R S, Vasilopoulos A, Akritidis M, Plascak J A, Fytas N G and Weigel M 2023 *Phys. Rev. E* **108** 024140
- [39] Jorge L N, Ferreira L S and Caparica A A 2020 *Physica A* **542** 123417
- [40] Cavalcante M F and Plascak J A 2019 *Physica A* **518** 111
- [41] Metropolis N, Rosenbluth A W, Rosenbluth M N, Teller A H and Teller E 1953 *J. Chem. Phys.* **21** 1087
- [42] Landau D P and Binder K 2021 *A Guide to Monte Carlo Simulation in Statistical Physics* 5th edn (Cambridge University Press)
- [43] Costa B V, Mól L A S and Rocha J C S 2017 *Comput. Phys. Commun.* **216** 77
- [44] Costa B V, Mól L A S and Rocha J C S 2019 *Braz. J. Phys.* **49** 271

- [45] Rodrigues R, Costa B V and Mól L A S 2021 *Phys. Rev. E* **104** 064103
- [46] Martinos S S, Malakis A and Hadjiagapiou I 2004 *Physica A* **331** 182
- [47] Schreiber N and Adler J 2005 *J. Phys. A: Math. Gen.* **38** 7253
- [48] Velonakis I N and Martinos S S 2011 *Physica A* **390** 3369
- [49] Velonakis I N 2014 *Physica A* **399** 171
- [50] Fisher M E 1965 in *Lectures in Theoretical Physics, Vol VII C - Statistical Physics, Weak Interactions, Field Theory*, ed W E Brittin (University of Colorado Press) p 1
- [51] Binder K 1981 *Z. Phys. B* **43** 119
- [52] Milchev A, Binder K and Heermann D W 1986 *Z. Phys. B* **63** 521–35
- [53] Bruce A D 1981 *J. Phys. C: Solid State Phys.* **14** 3667
- [54] Bruce A D and Wilding N B 1992 *Phys. Rev. Lett.* **68** 193
- [55] Wilding N B and Bruce A D 1992 *J. Phys.: Condens. Matter* **4** 3087
- [56] Wilding N B 1995 *Phys. Rev. E* **52** 602
- [57] Plascak J A and Martins P H L 2013 *Comput. Phys. Commun.* **184** 259
- [58] Ferrenberg A M and Swendsen R H 1988 *Phys. Rev. Lett.* **61** 2635
- [59] Galassi M, Davies J, Theiler J, Gough B, Jungman G, Alken P, Booth M and Rossi F 2009 *GNU Scientific Library - Reference Manual* (Network Theory), 3rd edn for GSL Version 1.12
- [60] Shao H, Guo W and Sandvik A W 2016 *Science* **352** 213
- [61] Rodrigues R G M and Mól L A S 2020 *J. Phys.: Conf. Ser.* **1483** 012007
- [62] Plascak J A, Ferrenberg A M and Landau D P 2002 *Phys. Rev. E* **65** 066702
- [63] Fytas N G, Zierenberg J, Theodorakis P E, Weigel M, Janke W and Malakis A 2018 *Phys. Rev. E* **97** 040102(R)
- [64] Swendsen R H and Wang J-S 1987 *Phys. Rev. Lett.* **58** 86
- [65] Novotny M A and Evertz H G 1993 in *Computer Simulation Studies in Condensed-Matter Physics VI* ed D P Landau, K K Mon and H-B Schüttler (Springer) p 188
- [66] Miyatake Y, Yamamoto M, Kim J J, Toyonaga M and Nagai O 1986 *J. Phys. C: Solid State Phys.* **19** 2359
- [67] Loison D, Qin C L, Schotte K D and Jin X F 2004 *Eur. Phys. J. B* **41** 395
- [68] Martins P H L and Plascak J A 2004 *Braz. J. Phys.* **34** 433