

**Simulação Monte Carlo  
e Percolação no modelo  $XY$   
Completamente Frustrado.**

*Anderson Barbosa Lima*

# Simulação Monte Carlo e Percolação no modelo $XY$ Completamente Frustrado.

Anderson Barbosa Lima

Orientador: Prof. Bismarck Vaz da Costa

Tese apresentada à Universidade Federal de Minas Gerais como requisito parcial  
para a obtenção do grau de Doutor em Ciências.

Fevereiro de 2005

Aos meus pais Albany e Expedita  
à minha querida esposa Tatiana  
e aos meus irmãos e amigos.

# Agradecimentos

Ao Bismarck pela boa orientação desde a iniciação científica e por conduzir o trabalho de maneira sensata e eficiente.

À Tatiana por todo o apoio, compreensão, por noites mal dormidas e por tolerar meu mau humor enquanto da execução desse trabalho.

Aos amigos do grupo de simulação Flávio(“Baixinho”), Rodrigo(“Queima Índio”), Marcella e o Júlio por me incentivarem a contar piadas construtivas a respeito deles.

Ao grande amigo Rodrigo.

Aos professores que ajudaram na minha formação e a todo o pessoal técnico-administrativo da UFMG.

Aos professores Jafferson e João Plascack.

Agradeço às agências CNPq e FAPEMIG que financiaram o Laboratório de Simulação e este trabalho.

Aos criadores e mantenedores do “LINUX” por possibilitarem a execução desse trabalho a um custo razoável.

Aos fabricantes de computadores da china por produzirem clones baratos de PC's.

# Resumo

Usando técnicas de Monte Carlo e dinâmica de spins estudamos os Modelos Rotor Planar completamente frustrado e  $XY$  completamente frustrado em duas dimensões em redes quadradas de tamanhos até 256. Nossos resultados mostram que os modelos têm duas transições de fase: - Uma transição do tipo Berezinskii-Kosterlitz-Thouless à temperatura  $T_{BKT} = 0.3655(5)$  e outra do tipo Ising à temperatura  $T_I = 0.3690(3)$  para o modelo  $XY$  completamente frustrado e para o modelo Rotor Planar completamente frustrado uma a  $T_{BKT} = 0.4410(5)$  do tipo Berezinskii-Kosterlitz-Thouless e outra do tipo Ising à temperatura  $T_I = 0.4505(5)$ .

A seguir simulamos a transição Ising em ambos os modelos. Mostramos como esses modelos podem ser entendidos como um problema de percolação se definirmos corretamente a conectividade do sistema. Obtivemos os expoentes para o tamanho médio do cluster,  $\gamma = 2.2(2)$ , muito próximo ao valor teórico  $\gamma = 2.389$ , e o expoente de Fisher,  $\tau = 1.8(1)$ , próximo ao valor teórico  $\tau = 2.055$ . Também obtivemos a temperatura crítica  $Z_2$  através do critério de percolação, que esta bem próxima da temperatura crítica calculada anteriormente.

Realizamos alguns cálculos preliminares da dinâmica do modelo  $XY$  completamente frustrado, para o qual obtivemos a função de espalhamento de neutrons,  $S(q, \omega)$ , e a relação de dispersão.

# Abstract

Using Monte Carlo and spin dynamics techniques we have investigated the critical behavior of the classical fully frustrated  $XY$  and fully frustrated Planar Rotor models in two dimensions in square lattices of size up to 256. We have found that the models have two transitions a Berezinskii-Kosterlitz-Thouless transition at  $T_{BKT} = 0.3655(5)$  and an Ising transition at  $T_I = 0.3690(3)$  for the fully frustrated  $XY$  model and a Berezinskii-Kosterlitz-Thouless transition at  $T_{BKT} = 0.4410(5)$  and an Ising transition at  $T_I = 0.4505(5)$  for the fully frustrated Planar Rotor model.

After this first step we have simulated the  $Z_2$  (Ising) transition in both fully frustrated Planar Rotator and fully frustrated  $XY$  models. We have shown that they can be understood as a percolation problem if we define properly the connectivity of the system. The critical exponent of the mean cluster size, is found as  $\gamma = 2.2(2)$  close to the two dimensional Ising case,  $\gamma = 2.389$ . The critical Fisher's exponent is obtained as  $\tau = 1.8(1)$ , close to the two dimensional Ising value  $\tau = 2.055$ . Also, we obtain the critical  $Z_2$  temperatures for both models using the percolation criterion which agree very well with other calculations.

Some preliminary calculations was done in the  $XY$  model in order to obtain the neutron scattering correlation function  $S(q, \omega)$  and the dispersion relation.

# Conteúdo

|          |                                                         |           |
|----------|---------------------------------------------------------|-----------|
| <b>1</b> | <b>Introdução</b>                                       | <b>1</b>  |
| <b>2</b> | <b>Modelos Frustrados</b>                               | <b>4</b>  |
| 2.1      | Os Modelos . . . . .                                    | 8         |
| 2.2      | Resultados Esperados . . . . .                          | 9         |
| <b>3</b> | <b>Simulação</b>                                        | <b>14</b> |
| 3.1      | Método de Monte Carlo . . . . .                         | 15        |
| 3.1.1    | Algoritmo de Metropolis . . . . .                       | 17        |
| 3.2      | Números Pseudo-aleatórios . . . . .                     | 19        |
| 3.3      | Simulação. . . . .                                      | 20        |
| 3.3.1    | Equilíbrio . . . . .                                    | 20        |
| 3.3.2    | Cálculo de médias e erros . . . . .                     | 21        |
| 3.3.3    | Quantidades termodinâmicas . . . . .                    | 22        |
| 3.3.4    | Finite Size Scaling . . . . .                           | 25        |
| 3.3.5    | Dinâmica . . . . .                                      | 27        |
| <b>4</b> | <b>Simulação Monte Carlo - Resultados</b>               | <b>29</b> |
| 4.1      | O Modelo Rotor Planar Completamente Frustrado . . . . . | 29        |
| 4.1.1    | Simetria do tipo Ising ( $Z_2$ ) . . . . .              | 30        |
| 4.1.2    | Simetria do tipo XY ( $U(1)$ ) . . . . .                | 34        |
| 4.2      | O Modelo XY Completamente Frustrado . . . . .           | 36        |
| 4.2.1    | Simetria do tipo Ising ( $Z_2$ ) . . . . .              | 37        |
| 4.2.2    | Simetria do tipo XY ( $U(1)$ ) . . . . .                | 42        |

|          |                                             |           |
|----------|---------------------------------------------|-----------|
| 4.2.3    | Dinâmica . . . . .                          | 44        |
| 4.2.4    | Conclusão . . . . .                         | 48        |
| <b>5</b> | <b>Percolação</b>                           | <b>49</b> |
| 5.1      | Definição . . . . .                         | 49        |
| 5.2      | Parâmetros Críticos em Percolação . . . . . | 50        |
| 5.3      | Resultados . . . . .                        | 52        |
| 5.3.1    | Conclusão . . . . .                         | 58        |
| <b>6</b> | <b>Conclusão e Perspectivas</b>             | <b>61</b> |

# Capítulo 1

## Introdução

Transições de fase são fenômenos comuns na natureza. A maneira mais fácil de caracterizar uma transição de fase é como uma manifestação de uma singularidade ou descontinuidade na equação de estado.

Particularmente, um dos mais interessantes fenômenos em física do estado sólido é o ferromagnetismo. Em alguns metais uma fração dos spins dos átomos podem se tornar espontaneamente polarizados em uma mesma direção, com a variação da temperatura. Dizemos que o sistema sofreu uma quebra espontânea de simetria. Esta quebra espontânea da simetria caracteriza uma transição de fase de um estado paramagnético para outro magnetizado.

Existem vários modelos que descrevem uma transição de fase magnética. O mais simples é o bem conhecido modelo de Ising [1], onde spins residem em sítios de uma rede formando um arranjo  $d$ -dimensional. A estrutura geométrica da rede pode ser por exemplo hexagonal, quadrada etc. A cada sítio da rede associamos uma variável de spin  $S_i$  ( $i = 1, 2, \dots, N$ ) que pode ter valor  $\pm\mu$  (Simetria  $Z_2$ ).

Mais interessantes são modelos de spin contínuos, onde cada variável  $S_i$  pode assumir valores na borda de um disco ou na superfície de uma esfera. No primeiro caso, chamamos o modelo de Rotor Planar (PR) e no segundo Heisenberg.

Alguns destes modelos têm solução analítica. Resultados rigorosos mostram que em uma dimensão ( $d = 1$ ) e interação de curto alcance entre os spins, não pode haver transição de fase a temperatura finita [2]. Em 1944 Lars Onsager [3] obteve a

solução exata para o modelo de Ising em duas dimensões, mostrando que o modelo têm uma transição de fase do tipo ordem-desordem.

Para modelos cujos spins têm simetria contínua, como o Rotor Planar (PR) e Heisenberg <sup>1</sup>, apesar de haver uma grande quantidade de resultados gerais, no que diz respeito a transições de fase, há uma grande dificuldade em se obter resultados analíticos em  $d > 1$ . Nestes casos um tratamento numérico se torna necessário, como um complemento a outras técnicas analíticas aproximadas.

Neste trabalho iremos estudar dois modelos, o modelo Rotor Planar completamente frustrado (*FFPR*) e o modelo *XY* completamente frustrado (*FFXY*) definidos a seguir, que devido às interações, muito peculiares, entre spins, não têm solução analítica. Por isto, nosso tratamento se baseará em técnicas numéricas de simulação como o método de Monte Carlo através do algoritmo de Metrópolis. Faremos simulações em redes de diversos tamanhos, até o maior tamanho possível para cada modelo dentro de nossa limitação de tempo e recurso computacional, e usando o método de tamanho de escala finita “Finite Size Scaling” faremos a extrapolação para redes de tamanho infinito.

Este trabalho está dividido em duas partes. Na primeira parte calculamos as temperaturas críticas dos modelos e alguns expoentes críticos. Para obter as temperaturas críticas, calculamos o calor específico, a susceptibilidade magnética, o cumulante de binder e o módulo da helicidade para ambas as simetrias, Ising e *XY*, quando couber e para diversos tamanhos  $L$  de rede. Todas essas grandezas estão definidas a seguir. Usamos então a técnica de “Finite Size Scaling” para extrapolar todas as grandezas para  $L \rightarrow \infty$ , e então estimar as temperaturas críticas.

Nesta etapa realizamos também cálculos preliminares da dinâmica do modelo *FFXY*. Para calcular a dinâmica do modelo *FFXY*, calculamos a função de espalhamento de neutrons, conforme definida no capítulo 3, que é um observável experimental fundamental para o estudo da dinâmica de spins.

Na segunda parte do trabalho discutimos como a transição de fase do tipo Ising presente nos dois modelos pode ser compreendida e obtida como um problema

---

<sup>1</sup>No Rotor Planar o spin tem simetria  $O(2)$  e o spin de Heisenberg simetria  $SU(1)$ .

de percolação. Fizemos novas simulações nos tamanhos de rede de  $L = 20$  até  $L = 160$  para ambos os modelos para obter quantidades tais como: 1) o número de vórtices e anti-vórtices, (definidos no capítulo 5) para obtermos a densidade crítica  $\rho_c$  onde ocorre a percolação, 2) calculamos o número de cluster  $n_s$  através do algoritmo de Hoshen e Kolpeman [4] 3) obtivemos o tamanho médio do cluster  $S_{av}$  e 4) calculamos a probabilidade de percolação. As quantidades número de cluster, tamanho médio do cluster e probabilidade de percolação estão definidas no capítulo 5.

Nas próximas páginas discutiremos os modelos nos quais trabalharemos. Faremos uma breve introdução sobre modelos com transições do tipo Berezinskii-Kosterlitz-Thouless (*BKT*) e uma rápida discussão sobre percolação, com ênfase nos resultados necessários para a compreensão dos capítulos seguintes.

## Capítulo 2

# Modelos Frustrados

Em 1971 Berezinskii [5] e a seguir, em 1972 Kosterlitz em Thouless [6, 7] mostraram que modelos contínuos podiam sofrer uma transição de fase (de um tipo especial) mesmo em  $d = 2$ . Esta transição, que ficou conhecida como transição de Berezinskii-Kosterlitz-Thouless (BKT), é caracterizada pelo desligamento de pares vórtices-anti-vórtices. Vórtice (anti-vórtices) sendo definido como uma excitação em que a soma da diferença dos ângulos formados pelos spins em um caminho fechado em torno da excitação varia por  $n\pi$ ,  $n = \pm 1, \pm 2, \dots$ . O inteiro,  $n$ , é conhecido como a vorticidade, ou chiralidade, da excitação. Durante este trabalho usaremos indistintamente as duas nomenclaturas. A figura 2.1 mostra o exemplo de um vórtice (fig 2.1a) e um anti-vórtice (fig 2.1b) com chiralidades  $f = +1$  e  $f = -1$ , respectivamente. A chiralidade  $f$  é calculada como

$$f = \frac{1}{n\pi} \sum_{\text{plaqueta}} (\theta_j - \theta_i), \quad (2.1)$$

onde  $\theta_i$  e  $\theta_j$  são ângulos formados a partir de uma direção fixa no plano.

Como consequência imediata do aparecimento de pares vórtices-anti-vórtices no modelo, Berezinskii-Kosterlitz-Thouless mostraram que a uma temperatura abaixo de um determinado valor ( $T \leq T_{BKT}$ ) a correlação entre os spins da rede se comporta como uma lei de potência e acima deste valor, ( $T > T_{BKT}$ ), tem um comportamento exponencial. Esta mudança de comportamento da correlação espacial caracteriza uma

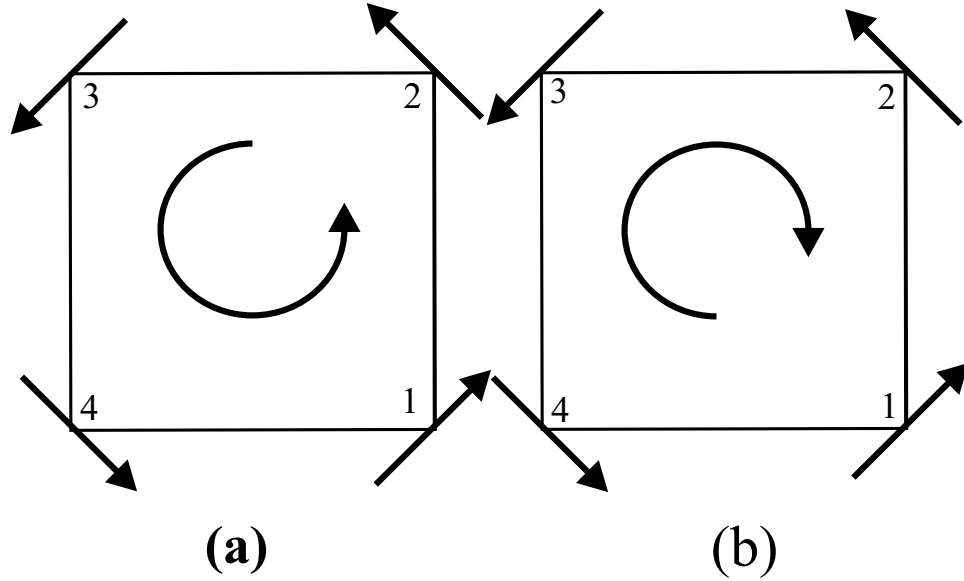


Figura 2.1: Figura 1 : Exemplo de um vórtice (a) e um anti-vórtice (b) com chiralidades  $f = +1$  e  $f = -1$ . A plaqueta é definida pelos sítios 1, 2, 3, 4.

transição de fase sem qualquer parâmetro de ordem aparente.

Em 1976 Villain [8] estudou alguns modelos de spin contínuos que podiam conter frustração. Dentre os modelos discutidos por Villain nos interessam o que ele denominou: *modelos completamente frustrados*. Como exemplo vamos considerar o Rotor Planar completamente frustrado (*FFPR*), definido como o Rotor Planar, discutido anteriormente, exceto que os acoplamentos entre spins podem ser ferromagnéticos ou anti-ferromagnéticos. Villain mostrou que se existir um número ímpar de ligações ferromagnéticas ou anti-ferromagnéticas em um polígono elementar da rede cristalina em que os modelos estão definidos, a minimização da energia para cada polígono leva o estado fundamental ( $T = 0$ ) dos modelos a ter uma distribuição duplamente degenerada conforme mostra a figura 2.2 para uma rede quadrada.

A frustração nos modelos surge pelo fato de termos um número ímpar de ligações ferro(anti-ferro)magnéticas em uma plaqueta, dessa maneira os spins podem ser paralelos ou anti-paralelos com a mesma energia conforme mostrado na figura 2.3.

O estado fundamental do modelo é composto por um arranjo de vórtices e anti-vórtices, distribuídos como em um tabuleiro de xadrez, mostrado na figura 2.4.

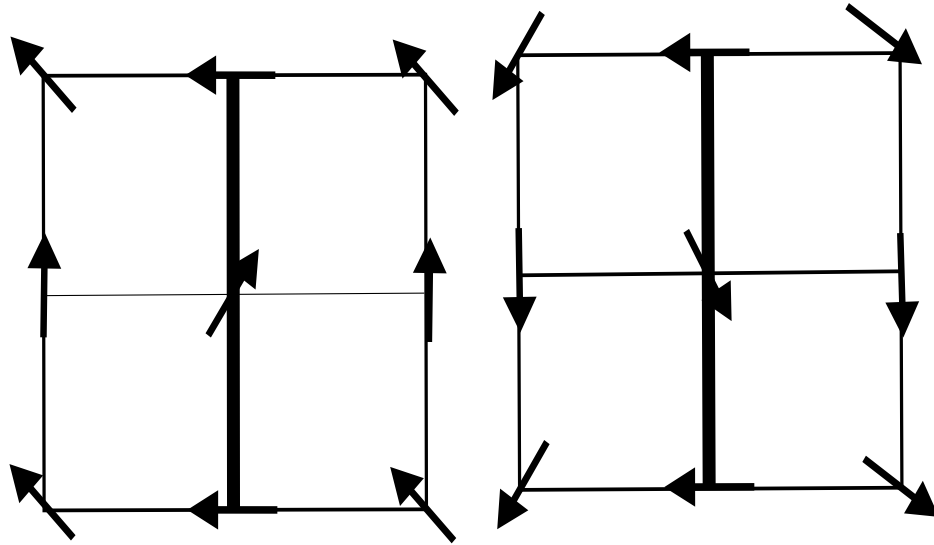


Figura 2.2: Estado fundamental dos modelos  $XY$  Completamente Frustrado e Rotor Planar Completamente Frustrado. A linha mais escura na rede significa um acoplamento anti-ferromagnético e as linhas mais claras são acoplamentos ferromagnéticos. Não existe nenhuma rotação que leve a figura da direita na figura da esquerda.

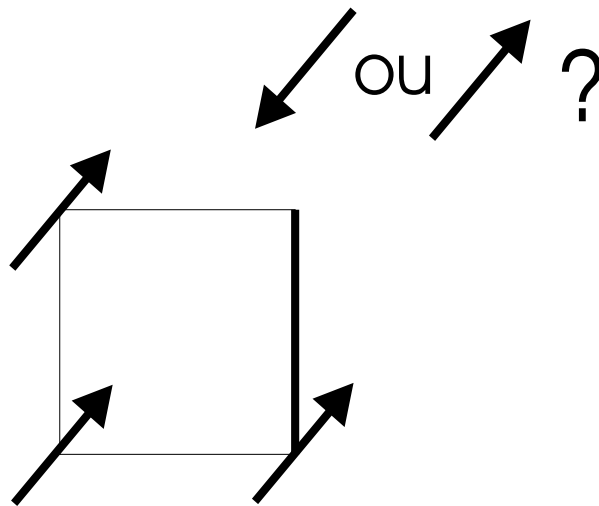


Figura 2.3: A frustração dos modelos ocorre pelo fato de termos um número ímpar de ligações ferro(anti-ferro)magnéticas em uma plaqueta, dessa maneira o spin pode assumir uma direção paralela ou anti-paralela com a mesma energia.

De acordo com a definição de quiralidade dada pela equação 2.1, a cada plaqueta de rede associamos um número  $+1$  ou  $-1$ . Assim, se considerarmos a rede dual, e associarmos o valor  $\pm 1$  a cada sítio da rede dual temos uma simetria no problema semelhante a uma simetria do tipo Ising com acoplamento antiferromagnético. A

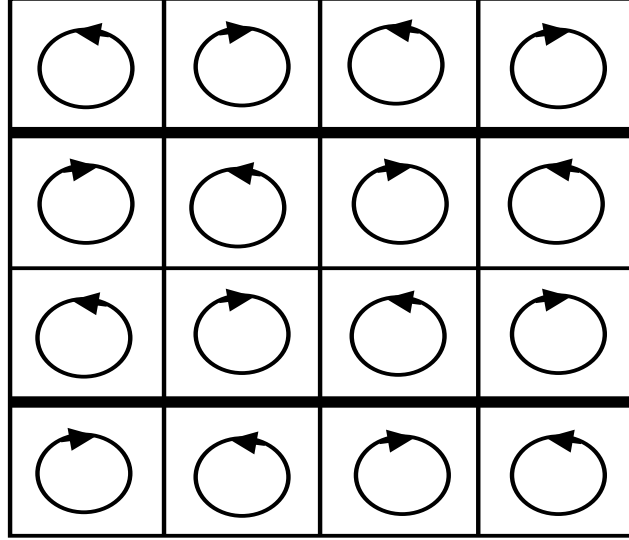


Figura 2.4: No estado fundamental dos modelos FFX e FFPR temos um número ímpar de ligações ferromagnéticas alternadas com linhas de ligações anti-ferromagnéticas em uma plaqueta, com isso o modelo torna-se frustrado e composto por um arranjo de vórtices e anti-vórtices como simbolizado por uma rotação no sentido horário e anti-horário.

partir do trabalho seminal de Villain, houve uma grande atividade de pesquisa acerca de modelos completamente frustrados [9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19]. Muitos desses trabalhos chegaram a resultados controversos a respeito da natureza da transição de fase. Sendo duas as principais hipóteses postas para o modelo:

- Existem duas transições de fase, uma do tipo Ising e outra do tipo BKT a diferentes temperaturas ( $T_I$  e  $T_{BKT}$ ).
- As transições do tipo Ising e do tipo BKT ocorrem à mesma temperatura, que podem ou não definir uma nova classe de universalidade.

Existe ainda as hipóteses de que a transição do tipo Ising pode ocorrer primeiro do que a transição do tipo BKT e vice-versa. Nos parece que muitas das questões levantadas a respeito desses modelos não obtiveram respostas adequadas porque nenhum trabalho

até então publicado obteve, com precisão suficiente, a temperatura e os expoentes críticos do modelo. As dificuldades residem principalmente no fato que, se existem realmente duas transições, as temperaturas críticas estão muito próximas, exigindo o uso de técnicas numéricas especialmente onerosas para a determinação das quantidades de interesse. Este será um dos desafios deste trabalho.

Nas seções seguintes definiremos os modelos que nos interessam, ajuntando os resultados principais que se encontram na literatura

## 2.1 Os Modelos

Neste trabalho estaremos envolvidos com dois modelos. O Rotor Planar Completamente Frustrado (*FFPR*) e o modelo *XY* Completamente Frustrado (*FFXY*). Os dois modelos estão na mesma classe de universalidade, por isso esperamos resultados compatíveis entre eles. O Modelo Rotor Planar Completamente Frustrado já foi estudado em outros trabalhos, enquanto para o modelo *XY* Completamente Frustrado, desconhecemos resultados anteriores.

O modelo *FFPR* é definido pelo Hamiltoniano:

$$H = \sum_{\langle i,j \rangle} J_{i,j} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \quad (2.2)$$

onde  $\vec{S}_i = |\vec{S}_i| \{\cos \theta_i, \sin \theta_i\}$  é um vetor de spin no sítio  $i$ ,  $\theta$  é um ângulo formado com uma direção fixa.  $J_{i,j}$  é o acoplamento de exchange, definido de modo que em uma plaqueta haja sempre um número ímpar de acoplamentos anti-ferromagnéticos. As somas são sobre vizinhos mais próximos.

O Modelo *FFXY* é definido pelo Hamiltoniano:

$$H = \sum_{\langle i,j \rangle} J_{i,j} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j + \sum_{\langle i,j \rangle} A_{i,j} S_i^z S_j^z, \quad (2.3)$$

onde  $\vec{S}_i = |\vec{S}_i| \{\sin \theta_i \cos \phi_i, \sin \theta_i \sin \phi_i, \cos \theta_i\}$  é um vetor de spin no sítio  $i$ ,  $\theta$  e  $\phi$  são ângulos esféricos e  $A_{i,j} > 0$ , é uma anisotropia. Em nosso trabalho  $|A_{i,j}| = |J_{i,j}|$ .

Em particular estamos interessados em modelos definidos em uma rede quadrada com interação de troca,  $J_{ij}$ , que promova ligações ferromagnéticas em todas as linhas na direção  $y$  e, na direção  $x$ , linhas de ligações ferromagnéticas alternadas com linhas de ligações anti-ferromagnéticas conforme prescrito no trabalho do Villain e como mostra a figura 2.2.

## 2.2 Resultados Esperados

Conforme citado antes, após a publicação do artigo do Villain [8] diversos trabalhos foram publicados baseados em modelos de spin com frustração uniforme. Dentre esses vários trabalhos estamos interessados naqueles que trataram o modelo *FFPR* e modelos que estão na mesma classe de universalidade dos modelos de nosso interesse. A partir desses trabalhos guiaremos nossas simulações para obter uma base de comparação.

O primeiro estudo importante realizado a partir do trabalho de Villain sobre o modelo FFPR foi feito por Teitel e Jayaprakash [20] em 1983. Neste trabalho Teitel e Jayaprakash estudaram o modelo Rotor Planar frustrado e não frustrado conforme definido pela equação 2.2. Eles simularam o modelo usando o método de Monte Carlo através do algoritmo de Metrópolis em redes de tamanho  $L = 8, 12, 16, 22$  e  $32$  usando de 25000 a 50000 passos de Monte Carlo (mcs) e ignorando de 2.000 a 5.000 mcs para atingir o equilíbrio entre cada passo de temperatura. Os autores computaram a energia média por site  $\langle u \rangle$ , o calor específico  $C$  e o módulo da helicidade  $\Upsilon$  dado por

$$\Upsilon = -\frac{1}{2} \langle u \rangle - \frac{J_0}{k_B T N^2} \left\langle \left[ \sum_{\langle ij \rangle} \sin(\theta_i - \theta_j - \psi_{ij}) (\vec{e}_{ij} \cdot \vec{x}) \right]^2 \right\rangle. \quad (2.4)$$

Para modelo Rotor Planar não frustrado o módulo da helicidade tem um salto universal [21] em  $T = T_{BKT}$ :

$$\lim_{T \rightarrow T_{BKT}} \frac{\Upsilon(T)}{k_B T} = \frac{2}{\pi}. \quad (2.5)$$

Os resultados de Teitel e Jayaprakash para o modelo *FFPR* mostram uma

transição de fase a uma temperatura  $T_{BKT} \simeq 0.45J$ . Eles estimaram esta temperatura no limite  $\Upsilon \rightarrow 0$ . Eles observaram também que  $\Upsilon$  vai a zero mais rápido que no modelo não frustrado e que também está consistente com um salto universal.

Os resultados para o calor específico apresentaram uma grande diferença entre os modelos frustrados e não frustrados. No modelo frustrado o calor específico apresentou máximos que aumentaram com o tamanho da rede, que está em contraste com os valores para o modelo não frustrado que saturaram em um valor finito. No modelo frustrado os máximos do calor específico apresentaram uma divergência logarítmica ( $\alpha = 0$ ) caracterizando uma transição do tipo Ising.

Teitel e Jayaprakash observaram também que os máximos do calor específico ocorrem a uma temperatura 10% acima da temperatura crítica obtida através do módulo da helicidade e para o modelo frustrado eles ocorriam a uma temperatura muito próxima a temperatura de transição.

Em suas conclusões, Teitel e Jayaprakash propõem as duas hipóteses: 1) Existem duas temperaturas críticas, uma do tipo Ising e outra do tipo Berezinskii-Kosterlitz-Thouless ou; 2) existe uma única temperatura crítica com os expoentes críticos formando uma nova classe de universalidade. Devido ao pequeno número de configurações de suas simulações os autores não puderam distinguir entre as duas hipóteses.

No trabalho de Berge e Diep [22] de 1986 eles estudaram o modelo Rotor Planar com frustração uniforme em redes triangulares e quadradas, entre eles o modelo *FFPR*. Para obter melhor controle sobre as transições do tipo Ising e do tipo BKT, eles variaram o valor da frustração, fazendo  $J_{ij} = \eta J_{ij}$  na ligação antiferromagnética. Os autores realizaram simulações de Monte Carlo através do algoritmo de Metrópolis em redes de tamanhos  $L = 20, 30, 40, 50, 70$  e  $100$  e para vários valores de  $\eta$ . Para cada passo de temperatura foram descartados 20.000 mcs para obter o equilíbrio e foram guardados 50.000 configurações para o cálculo das médias.

Analisando o comportamento do calor específico os autores obtiveram para o modelo *FFPR* um pico muito bem definido, enquanto variando o valor de  $\eta$  para  $\eta < 1$ , eles obtiveram 2 picos, um a baixa temperatura e outro em temperatura mais alta. Quando o valor de  $\eta$  vai se aproximando de 1 os picos de baixa e alta temperatura

também vão se aproximando até se fundirem em  $\eta = 1$ . Para investigar a natureza das transições associadas aos picos os autores usaram a técnica de escala de tamanho finito (“Finite Size Scaling”). Fazendo  $C_{max}$  em função do  $\ln(L)$  os autores observaram para os picos em baixa temperatura uma relação linear entre  $C_{max}$  e  $\ln(L)$ , indicando um expoente crítico ( $\alpha = 0$ ) compatível com uma transição do tipo Ising. Para os picos de alta temperatura  $C_{max}$  é independente de  $L$  para  $L$  suficientemente grande, o que é uma característica de uma transição do tipo *BKT* [23, 24]

Variando  $\frac{1}{3} \leq \eta \leq 2$  os autores montaram um diagrama de fase da temperatura  $T$  em função de  $\eta$ . Este diagrama de fase apresentou duas linhas de transição de fase distintas, uma do tipo Ising e outra do tipo *BKT*. Em  $\eta = 1$  estas linhas parecem se encontrar em um único ponto definindo uma única temperatura de transição quando o sistema é completamente frustrado. Os autores concluíram que ambas as transições estão presentes quando  $\eta = 1$  e que elas ocorrem a uma mesma temperatura, mas que as características da transição do tipo Ising dominam.

Um estudo bastante detalhado do modelo *FFPR* foi feito por José e Ramirez-Santiago [12]. Os autores estudaram as propriedades termodinâmicas do modelo através do módulo da helicidade para a transição do tipo *BKT* conforme definido anteriormente e através da magnetização staggered  $m_S$  e da respectiva susceptibilidade  $\chi_S$  para a transição do tipo Ising. A magnetização staggered  $m_S$  é definida como:

$$m_s = \frac{1}{L^2} \left| \sum_{\vec{r}} (-1)^{r_x+r_y} f \hat{r} \right|, \quad (2.6)$$

onde  $f$  é a chiralidade conforme definido pela equação 2.1. A magnetização staggered é um parâmetro de ordem para a transição do tipo Ising.

Os autores utilizaram redes quadradas de tamanhos até  $L = 240$  e utilizaram  $10^4$  passos de Monte Carlo. Na prática as análises de tamanho finito foram realizadas para redes de até  $L = 60$ . Para a transição do tipo *BKT* eles obtiveram uma temperatura de transição  $T_{BKT} = 0.44J$ . Para a transição do tipo Ising eles obtiveram uma temperatura de transição  $T_I = 0.42J$  e também os expoentes críticos  $\beta = 0.0968(35)$ ,  $\gamma = 0.91(13)$  e  $\gamma' = 0.5125(79)$ . Estes expoentes estão bem diferentes

dos correspondentes para o modelo de Ising, onde  $\beta = 0.125$ ,  $\gamma = \gamma' = 1.75$ . Em suas conclusões os autores sugerem que simulações com estatísticas melhores devem ser feitas.

Em 1995 Peter Olson publicou um trabalho sobre o modelo *FFPR* [13]. Neste trabalho Olson obteve para o modelo *FFPR* duas transições, uma do tipo *BKT* a uma temperatura  $T_{BKT} = 0.4460(1)J$  e outra, a seguir, a uma temperatura  $T_I = 0.4576(13)J$ . Em seu trabalho Olson realiza simulações em redes quadradas de tamanho até  $L = 128$  utilizando o algoritmo de Metrópolis.

Para obter as temperaturas onde ocorrem as transições Olson analisa as seguintes quantidades:

- O módulo da helicidade que através da relação de Weber-Minnhagen [25]

$$\frac{\Upsilon_L \pi}{2T_{BKT}} = 1 + \frac{1}{2(\ln L + l_0)}, \quad (2.7)$$

onde  $L$  é o tamanho do sistema,  $\Upsilon_L$  é o módulo da helicidade para o sistema de tamanho  $L$  e  $l_0$  é um parâmetro a ser determinado, para obter a temperatura de transição da simetria contínua. A relação de Weber-Minnhagen pode ser usada como uma relação de tamanho finito para o módulo da helicidade.

- O cumulante de Binder

$$U = 1 - \frac{\langle M^4 \rangle}{3 \langle M^2 \rangle^2}, \quad (2.8)$$

onde  $M$  é a magnetização staggered, para obter a temperatura de transição da simetria Ising. O cumulante de Binder tem a propriedade de ser uma quantidade que independente do tamanho da rede tem um valor único na temperatura crítica,  $U_L = U^*$ .

Em suas conclusões Olson acredita que o modelo tem duas temperaturas críticas, sendo que a transição contínua acontece um pouco antes da transição do tipo Ising, e que os expoentes críticos não-Ising obtidos em trabalhos anteriores estão relacionados com os tamanhos de redes utilizados nestes trabalhos.

Os trabalhos citados acima são os que apresentam os melhores resultados dentre

os muito publicados sobre o modelo  $FFPR$ . Usando as técnicas de simulação que serão descritas no capítulo seguinte esperamos obter resultados melhores para o modelo  $FFPR$  e resultados para o até então nunca estudado, modelo  $FFXY$ .

# Capítulo 3

## Simulação

O objetivo básico da mecânica estatística de equilíbrio é calcular médias termodinâmicas de grandezas físicas, tais como a energia e a magnetização de um sistema. No ensemble canônico e no equilíbrio o valor médio de uma quantidade  $A$  [26, 27] é dado por:

$$\langle A \rangle = \frac{\sum_i A_i e^{-\beta E_i}}{Z}, \quad (3.1)$$

onde  $\langle \dots \rangle$  denota média térmica,  $A_i$  é o valor de  $A$  no  $i$ -ésimo estado e  $E_i$  é a energia deste estado. A soma sobre  $i$  percorre todos os estados (configurações) do sistema,  $Z$  é a função partição no ensemble canônico:

$$Z = \sum_i \exp(-\beta E_i), \quad (3.2)$$

onde  $\beta = 1/k_B T$ .

A quantidade

$$p_i = \frac{e^{-\beta E_i}}{Z}, \quad (3.3)$$

representa a probabilidade de que ocorra a configuração  $i$  no equilíbrio térmico. A soma na equação (3.1) só pode ser feita exatamente em alguns casos especiais devido ao grande número de configurações e da complexidade das interações envolvidas no cálculo. Como solução para este problema podemos usar métodos estatísticos tal como o método de Monte Carlo descrito abaixo.

### 3.1 Método de Monte Carlo

A idéia básica no método de Monte Carlo é aproximar a soma 3.1, sobre todas as configurações, por uma soma sobre um subconjunto de  $M$  configurações aleatoriamente escolhidas [26]

$$\langle A \rangle \approx \bar{A} \equiv \frac{\sum_{i=1}^M A_i e^{-\beta E_i}}{\sum_{i=1}^M e^{-\beta E_i}} \quad (3.4)$$

Intuitivamente, quanto maior o valor de  $M$  melhor a aproximação. Contudo este método de amostragem é ineficiente e de difícil realização devido à rápida variação da densidade de probabilidade (3.3) com a energia; muitas das configurações escolhidas são fisicamente improváveis e contribuem pouco para a média enquanto poucas são suficientemente importantes e trazem contribuições significativas.

Se escolhermos convenientemente configurações de acordo com uma distribuição de probabilidades,  $P_i$ , a equação (3.4) pode ser reescrita como

$$\langle A \rangle \approx \bar{A} \equiv \frac{\sum_{i=1}^M A_i P_i^{-1} e^{-\beta E_i}}{\sum_{i=1}^M P_i^{-1} e^{-\beta E_i}} \quad (3.5)$$

Uma escolha simples para  $P_i$  é usar a distribuição de probabilidade de equilíbrio  $p_i$

$$P_i = p_i \propto e^{-\beta E_i}, \quad (3.6)$$

e, com esta escolha, a equação (3.5) se reduz a uma simples média

$$\langle A \rangle \approx \bar{A} \equiv \frac{\sum_{i=1}^M A_i}{M}. \quad (3.7)$$

Esta soma pode ser feita segundo um processo de Markov considerando todas as prováveis configurações [27]. O processo de Markov pode ser visto como um caminho aleatório entre configurações onde a mudança da configuração  $i$  para  $j$  é governada por uma taxa de transição  $W(i \rightarrow j)$ .

É possível construir uma cadeia de Markov de configurações com uma proba-

bilidade de transição adequada, tal que no limite  $M \rightarrow \infty$  a função distribuição  $P_i$  de configurações na cadeia tende para a distribuição de equilíbrio  $p_i$  como desejado ( $P_i \rightarrow p_i$ ).

Considerando que  $P_i$  obedece a equação Master

$$\frac{dP_i}{dt} = - \sum_j P_i W(i \rightarrow j) + \sum_j P_j W(j \rightarrow i), \quad (3.8)$$

e que no equilíbrio  $\frac{dP_i}{dt} = 0$ , uma condição suficiente para que o equilíbrio seja atingido ( $P_i \rightarrow p_i$ ) é o balanço detalhado

$$P_i W(i \rightarrow j) = P_j W(j \rightarrow i). \quad (3.9)$$

Utilizando (3.6) e a condição de balanço detalhado 3.9 temos:

$$\frac{W(i \rightarrow j)}{W(j \rightarrow i)} = e^{-\beta \Delta E_{ij}}, \quad (3.10)$$

onde

$$\Delta E_{ij} = E_j - E_i. \quad (3.11)$$

Ou seja, a razão de probabilidades de transição entre as configurações  $i$  e  $j$  depende apenas da variação da energia entre estas configurações.

Como a relação (3.10) não especifica as probabilidades de transição de maneira unívoca uma escolha possível é a prescrição de Metropolis [28]

$$W(i \rightarrow j) = \begin{cases} e^{-\beta \Delta E_{ij}} & : \Delta E_{ij} > 0 \\ 1 & : \Delta E_{ij} < 0 \end{cases}$$

Nesta escolha, para qualquer  $i$ ,  $W(i \rightarrow j)$  é sempre positivo. Portanto, podemos atingir qualquer configuração do sistema a partir de um número finito de passos, esses critérios são chamados de ergodicidade. A ergodicidade está garantida, pois existe sempre uma probabilidade diferente de zero para qualquer possível configuração do sistema ser atingida.

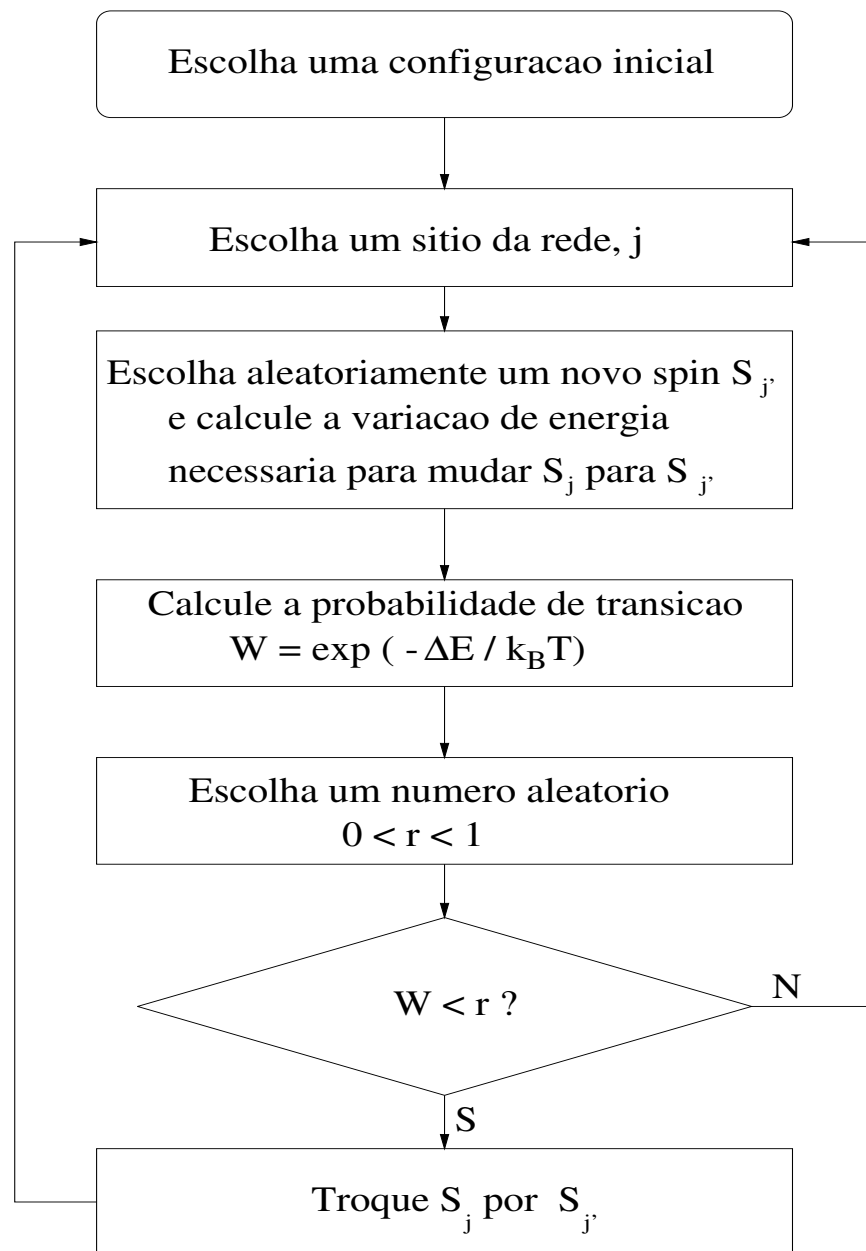
### 3.1.1 Algoritmo de Metropolis

O algoritmo de Metropolis [26, 28, 29, 30] convencional para um sistema de spins pode ser organizado como se segue. Estabelecidos o tipo e o tamanho da rede e com condições de contorno determinadas, especifica-se uma configuração de spins inicial; usualmente completamente ordenada ou completamente desordenada (aleatória). Um spin é então escolhido (aleatoriamente ou sequencialmente) e calcula-se a diferença em energia  $\Delta E$  necessária para mudar o spin para um novo valor. Um número aleatório  $r$  uniformemente distribuído entre zero e um é sorteado e comparado com a probabilidade de transição  $e^{-\beta\Delta E}$ . Se  $e^{-\beta\Delta E} > r$ , então o spin é alterado para o novo valor, caso contrário o spin permanece inalterado. Um diagrama é mostrado na figura 3.1. Este procedimento é repetido muitas vezes e assim uma cadeia de Markov de configurações é construída. Usualmente algumas configurações do início do processo devem ser descartadas para o equilíbrio térmico.

No estudo de fenômenos críticos através do método de Monte Carlo, uma desvantagem do algoritmo de Metropolis é que configurações sucessivas obtidas por este algoritmo são correlacionadas. Na região crítica este problema é particularmente grave devido ao "critical slowing down" (CSD). Na vizinhança do ponto crítico,

$$\tau \sim L^z, \quad (3.12)$$

onde  $L$  é a dimensão do sistema e, para o algoritmo de Metropolis,  $z \sim 2$ . Para sistemas com  $L$  grande, que são os de maior relevância, o efeito da divergência do tempo de correlação  $\tau$  (CSD) provoca um grande aumento no tempo necessário para equilibrar o sistema e para gerar configurações estatisticamente independentes. Algoritmos alternativos têm sido desenvolvidos para reduzir os problemas relacionados com o efeito CSD [31, 32]. No entanto, nenhum deles é exequível no nosso caso, por



**Fig.3.1:** Diagrama de fluxo para o algoritmo de Metropolis.

tratarmos com modelo frustrado.

## 3.2 Números Pseudo-aleatórios

Como discutido na seção anterior, simulações numéricas, através do método de Monte Carlo, usam intensamente sequências de números aleatórios. Uma definição formal de aleatoriedade é difícil de se estabelecer pois isto significa definir a ausência de correlações. Entretanto pode-se dizer que uma sequência de números é aleatória se ela passa por testes estatísticos de aleatoriedade e se o intervalo entre repetições é grande. Este intervalo é conhecido como período e tem um papel importante na teoria [33, 34, 35, 36].

Diversos algoritmos foram criados para operar como geradores de números aleatórios [34, 35, 36]. Como estes algoritmos baseiam-se em operações determinísticas, os números gerados são considerados pseudo-aleatórios e passam por alguns dos testes estatísticos tradicionais [33, 34, 35, 36] mas as sequências geradas são cíclicas ou periódicas.

Alguns critérios foram estabelecidos para julgar a qualidade dos geradores de números aleatórios, entre os critérios que determinam um bom gerador destacam-se:

(a) *Confiabilidade* - O gerador deve passar por todos os testes estatísticos e ter um período extremamente longo (Baixa correlação nas sequências geradas).

(b) *Eficiência* - A execução deve ser rápida e a exigência de memória deve ser mínima.

(c) *Repetitividade* - Especificando-se as mesmas condições iniciais, a sequência de números aleatórios gerada deve ser sempre a mesma.

(d) *Independência em relação à máquina* - O algoritmo deve executar da mesma maneira em diferentes tipos de computadores, ou seja a mesma sequência de números aleatórios deve ser gerada em diferentes tipos de computadores com as mesmas condições iniciais.

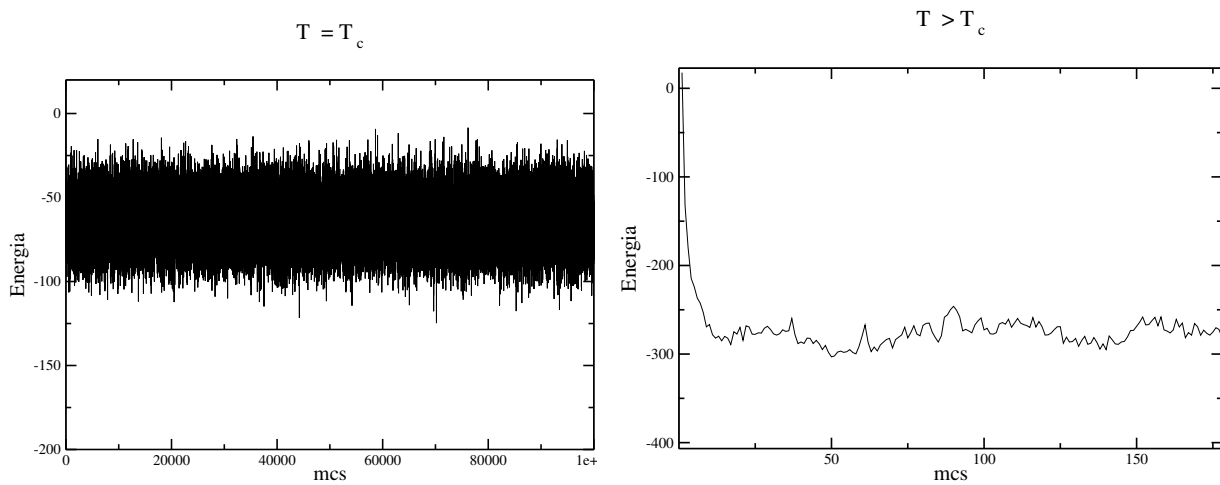
(e) *Simplicidade* - O algoritmo deve ser fácil de se implementar e usar.

## 3.3 Simulação.

### 3.3.1 Equilíbrio

O processo de Monte Carlo tem como objetivo conduzir o sistema ao equilíbrio termodinâmico a uma certa temperatura, com um número finito de passos  $N$ , partindo de uma dada configuração inicial. A convergência ao equilíbrio depende de fatores como o tipo de sistema (interações, dimensionalidade da rede e do spin), a temperatura (distância a regiões críticas), o algoritmo MC usado etc.

Nestas simulações usamos somente o algoritmo de Metrópolis, uma vez que algoritmos de cluster do tipo Wolf não são adequados quando o sistema é frustrado.



**Fig.3.2:** Nas figuras são mostrados a energia para uma sequencia de passos de Monte Carlo. À esquerda  $T \simeq T_C$  e à direita  $T > T_C$ .

Estimando quantidades termodinâmicas tais como energia ou magnetização

em cada passo do processo MC podemos acompanhar a evolução do sistema e decidir quando o equilíbrio termodinâmico é atingido. A figura 3.2 mostra como exemplo o comportamento da energia total de um determinado sistema de spins como função de número de passos de Monte Carlo. A figura 3.2(a) mostra o sistema perto da temperatura de transição. As flutuações são muito grandes, como é de se esperar devido ao fenômeno de “Critical Slowing Down” descrito anteriormente. Na figura 3.2(b) mostramos o mesmo modelo, mas a uma temperatura acima de  $T_c$ . Neste caso as flutuações são pequenas e podemos ver que com poucos passos de Monte Carlo (mcs) a energia abaixa e parece convergir para um valor médio.

Um critério para se determinar se um dado sistema está ou não em equilíbrio consiste em calcular a média de uma quantidade termodinâmica,  $A$ , dentro de vários intervalos de passos MC. O sistema estará em equilíbrio quando a diferença entre os valores estiver dentro de flutuações esperadas para a quantidade medida.

### 3.3.2 Cálculo de médias e erros

O sistema é conduzido ao equilíbrio, em cada temperatura  $T$ , com um número  $N$  de passos de Monte Carlo. A partir do equilíbrio  $N_{est}$  conjuntos contendo  $N_{conf}$  configurações são construídos.

Calculamos a quantidade  $A_j$  em cada configuração  $A_1, A_2, A_j, \dots, A_{N_{conf}}$ :

$$\bar{A}_k = \frac{1}{N_{conf}} \sum_{j=1}^{N_{conf}} A_j, \quad (3.13)$$

assim o valor médio de  $A$  é a média sobre os  $N_{est}$  conjuntos  $\bar{A}_1, \bar{A}_2, \bar{A}_k, \dots, \bar{A}_{N_{est}}$

$$\langle \bar{A} \rangle = \frac{1}{N_{est}} \sum_{k=1}^{N_{est}} \bar{A}_k. \quad (3.14)$$

O erro estimado na medida de  $A$  é

$$\langle \delta A \rangle^2 = \frac{1}{N_{est}} \sum_{k=1}^{N_{est}} (\langle \bar{A} \rangle - \bar{A}_k)^2. \quad (3.15)$$

Neste trabalho as medidas de variáveis termodinâmicas são obtidas através de médias sobre  $N_{est} = 10$  e  $N_{conf} = 1 \times 10^6$  configurações independentes e os erros são também calculados sobre estas médias. O intervalo entre temperaturas  $\delta T$  é escolhido de acordo com cada situação. Neste trabalho todas as temperaturas estão em unidades de  $J/k_B$ .

Na seção seguinte descreveremos brevemente as principais quantidades termodinâmicas de interesse e sua importância para o objetivo do trabalho.

### 3.3.3 Quantidades termodinâmicas

Quantidades termodinâmicas de interesse são calculadas de forma descrita acima. A seguir definimos as mais importantes

#### Energia

A energia total de um sistema magnético é dada pelo Hamiltoniano  $H$  do sistema, isto é

$$E = \langle H \rangle. \quad (3.16)$$

Os Hamiltonianos dos modelos envolvidos em nosso trabalho estão definidos pelas equações 2.2 e 2.3.

O cálculo da energia do sistema é importante, pois a partir da flutuação da energia calculamos o calor específico [37], conforme definido a seguir.

#### Magnetização

Nos modelos tratados neste trabalho existem duas simetrias, uma contínua  $U(1)$  relativa aos spins, e outra discreta  $Z_2$ , formada pelos vórtices e anti-vórtices, conforme descrito no capítulo 2. Referindo-se à simetria  $Z_2$ , os modelos são anti-ferromagnéticos, de modo que devemos calcular a magnetização staggered definida como

$$M_I = \frac{1}{L^2} \left| \sum_{\vec{r}} (-1)^{r_x + r_y} f_{\vec{r}} \right|, \quad (3.17)$$

onde  $\hat{r}$  é um vetor unitário na direção perpendicular às plaquetas e  $f$  é a vorticidade conforme definida no capítulo 2 pela equação 2.1, e a soma é sob todas as plaquetas do sistema.

A magnetização relativa à simetria  $U(1)$  é obtida via

$$M_{XY} = \sqrt{\langle m_x \rangle^2 + \langle m_y \rangle^2}, \quad (3.18)$$

onde  $m_x$  e  $m_y$  são magnetizações em cada direção do plano.

Da mesma forma que a energia, a flutuação da magnetização fornece a susceptibilidade magnética que definimos a seguir [37].

### Módulo da Helicidade

O módulo de helicidade é definido como a resposta do sistema a uma torção dos spins na fronteira da rede [38]:

$$\Upsilon = \frac{\delta^2 F}{\delta \Delta^2}. \quad (3.19)$$

onde  $\Delta$  é uma pequena rotação do sistema ao longo de uma direção e  $F$  é a energia livre do sistema.

Em uma simulação de Monte Carlo o módulo da helicidade é obtido da função de correlação [38]. Nelson e Kosterlitz [21] mostraram que para o modelo  $XY$  a helicidade tem um comportamento universal dado por:

$$\lim_{T \rightarrow T_c} \frac{\Upsilon(T)}{k_B T} = \frac{2}{\pi} \quad (3.20)$$

Weber e Minnhagen [25] foram capazes de determinar a temperatura de transição  $T_{BKT}$  para o modelo Rotor Planar através da relação

$$\frac{\Upsilon_L \pi}{2T_{BKT}} = 1 + \frac{1}{2(\ln L + l_0)}, \quad (3.21)$$

onde  $L$  é o tamanho do sistema,  $\Upsilon_L$  é o módulo da helicidade para o sistema de

tamanho  $L$  e  $l_0$  é um parâmetro a ser determinado.

### Calor específico

O calor específico é a quantidade de calor necessária para aumentar a temperatura do sistema, e é definido como [29, 37]

$$C = \frac{1}{N} \left( \frac{dQ}{dT} \right). \quad (3.22)$$

O calor específico é obtido via flutuação da energia ou seja

$$C = \frac{1}{T^2} (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2), \quad (3.23)$$

onde  $T$  é a temperatura [29, 37].

### Susceptibilidade Magnética

A susceptibilidade magnética é calculada pela flutuação do parâmetro de ordem (magnetização) [29, 37]

$$\chi = \frac{1}{T} (\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2). \quad (3.24)$$

Obtem-se a estimativa, a média e o erro da susceptibilidade conforme descrito na seção 3.3.2. De maneira similar também são obtidos a estimativa, a média e o erro para o calor específico.

Em simulação o calor específico e a susceptibilidade magnética apresentam picos em determinadas temperaturas que podem ser utilizados para caracterizar as transições de fase conforme descreveremos a seguir.

### Cumulante de Binder $U_4$

Binder and Heerman definiram em 1987 [40] o cumulante reduzido de quarta ordem, também chamado de cumulante de Binder. O cumulante de Binder de quarta

ordem da magnetização  $U_4$  para uma rede de tamanho  $L$  é definido como

$$U_4 = 1 - \frac{\langle m_L^4 \rangle}{3 \langle m_L^2 \rangle^2}, \quad (3.25)$$

onde  $m_L$  é o valor da magnetização para uma rede de tamanho  $L$ .

O cumulante  $U_L$  é uma quantidade interessante porque para temperaturas  $T > T_c$  e para  $L \gg \xi$ , onde  $\xi$  é o comprimento de correlação, pode ser mostrado que  $U_L \rightarrow 0$ . Para  $T < T_c$  e para  $L \gg \xi$ ,  $U_L \rightarrow \frac{2}{3}$ . Na temperatura crítica  $T_c$  quando o comprimento de correlação  $\xi$  se torna infinito temos  $L \ll \xi$ . Neste caso  $U_L$  é praticamente constante para qualquer tamanho  $L$  da rede. Este comportamento do cumulante de Binder é muito útil, uma vez que podemos colocar em um gráfico o valor do cumulante  $U_L$  em função da temperatura  $T$  para vários tamanhos  $L$  de rede, e estimar a temperatura crítica a partir dos pontos de intreseções das curvas.

### 3.3.4 Finite Size Scaling

Em simulações usando Monte Carlo o número de spins envolvidos é tipicamente da ordem de  $10^4$ . Devido ao tamanho finito da rede, efeitos de tamanho finito devem ser considerados. Em 1971 Fisher [39] propôs uma hipótese de escala que considera o tamanho finito do sistema.

Seja uma certa quantidade termodinâmica  $A$  que no limite termodinâmico diverge como

$$A_\infty(\epsilon) \sim \epsilon^{-\alpha}, \quad (3.26)$$

quando  $\epsilon \rightarrow 0^+$ , onde  $\epsilon = (T - T_c)/T_c$ , é a temperatura reduzida e  $\alpha$  é o expoente crítico associado à quantidade  $A$ . De maneira semelhante o comprimento de correlação  $\xi$  do sistema infinito diverge

$$\xi_\infty(\epsilon) \sim \epsilon^{-\nu}. \quad (3.27)$$

Em sistemas finitos o comprimento de correlação  $\xi$  é limitado pelo tamanho  $L$  do sistema, o que acarreta um pico finito na grandeza  $A$  quando a mesma se aproxima da temperatura crítica, ou seja quando  $\epsilon \rightarrow 0^+$ .

A premissa básica da hipótese de Fisher é supor que a única variável importante que afeta o truncamento das quantidades termodinâmicas em tamanhos finitos é a razão  $L/\xi_\infty(\epsilon)$ . Assim quando  $L \gg \xi_\infty(\epsilon)$ , não se observa qualquer efeito de tamanho finito significativo. Ao contrário, quando  $L \ll \xi_\infty(\epsilon)$  os efeitos de tamanho finito se manifestam. Esses efeitos são mais intensos perto da temperatura crítica.

Próximo a uma transição de fase podemos escrever a parte singular da energia livre como [29]:

$$F(L, T) = L^{-(2-\alpha)/\nu} \mathcal{F}(\epsilon L^{1/\nu}), \quad (3.28)$$

onde  $\epsilon = (T - T_c)/T_c$ , é a temperatura reduzida e  $\mathcal{F}$ , é uma função de escala, onde a variável de escala  $x = \epsilon L^{1/\nu}$  foi escolhida dessa forma motivado pela observação de que o comprimento de correlação diverge com  $\epsilon^{-\nu}$ .

A partir dessa hipótese, podemos obter o comportamento de escala das diversas quantidades termodinâmicas de interesse [29]:

$$M = L^{-\beta/\nu} \mathcal{M}^0(\epsilon L^{1/\nu}), \quad (3.29)$$

$$\chi = L^{-\gamma/\nu} \chi^0(\epsilon L^{1/\nu}), \quad (3.30)$$

$$C = L^{-\alpha/\nu} \mathcal{C}^0(\epsilon L^{1/\nu}), \quad (3.31)$$

onde  $\mathcal{M}^0$ ,  $\chi^0$  e  $\mathcal{C}^0$  são funções de escala.

A temperatura crítica de transição  $T_c$  é aquela onde acontece a divergência ou discontinuidade de alguma função termodinâmica como  $C$  ou  $\chi$ . Esta divergência ocorre somente no limite termodinâmico, isto é, para  $L \rightarrow \infty$  conforme proposto por Fisher [39]. Para sistemas finitos estas quantidades apresentam, na região de transição, máximos que são arredondados e deslocados em relação a  $T_c$ . Para obter a temperatura crítica precisamos fazer uma extrapolação dos dados para o limite termodinâmico,  $L \rightarrow \infty$ .

Para estimar a temperatura crítica  $T_I$  da simetria Ising analisamos as temperaturas onde ocorrem os máximos do calor específico  $C$  e da susceptibilidade magnética  $\chi$ , e a interseção entre as curvas para o cumulante de Binder  $U_4$  que são obtidas para os diversos valores de  $L$ . Para realizar a extrapolação de  $L \rightarrow \infty$  colocamos os valores

dos máximos de  $C$  e de  $\chi$  e os valores das interseções entre as curvas para  $U_4$  em um gráfico em função de  $L^{-\nu}$  [40].

Para a temperatura crítica da simetria contínua, Minnhagen [41] usando um grupo de renormalização, mostrou que o módulo da helicidade  $\Upsilon$  dá um limite superior para  $T_{BKT}$ . O Limite superior pode ser obtido pelo ponto de interseção da curva do módulo da helicidade com a curva do salto universal dada por  $(2/\pi)T$ .

Para obter a temperatura  $T_{BKT}$  utilizamos a relação de Weber e Minnhagen que é considerada uma relação de escala para o módulo da helicidade [41]

$$\frac{\Upsilon_L \pi}{2T_{BKT}} = 1 + \frac{1}{2(\ln L + l_0)}, \quad (3.32)$$

onde  $L$  é o tamanho do sistema,  $\Upsilon_L$  é o módulo da helicidade para o sistema de tamanho  $L$  e  $l_0$  é um parâmetro a ser determinado.

Os expoentes críticos podem ser obtidos através do uso de regressões para os gráficos dos máximos para o calor específico e da susceptibilidade magnética, que têm a hipótese de escala conforme definido pelas equações 3.29 - 3.31.

Usando também as igualdades [42]:

$$\alpha + 2\beta + \gamma = 2 \quad (3.33)$$

$$\gamma = \nu(2 - \eta) \quad (3.34)$$

$$\gamma = \beta(\delta - 1) \quad (3.35)$$

$$\nu d = 2 - \alpha \quad (3.36)$$

Podemos obter os outros expoentes críticos.

### 3.3.5 Dinâmica

Para calcular a dinâmica dos spins precisamos calcular a função de espalhamento de neutrons, que é um observável experimental fundamental para o estudo da dinâmica de spins. A função de espalhamento de neutrons é definida para o momento de

transferência  $\vec{q}$  e frequência de transferência  $\omega$  através da transformada de Fourier:

$$S^{\alpha\alpha}(\vec{q}, \omega) = \sum_{\vec{r}, \vec{r}'} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\omega t} C^{\alpha\alpha}(\vec{r} - \vec{r}', t) \frac{dt}{2\pi} \quad , \quad (3.37)$$

da função de correlação:

$$C^{\alpha\alpha}(\vec{r} - \vec{r}', t - t') = \langle S_{\vec{r}}^{\alpha}(t) S_{\vec{r}'}^{\alpha}(t') \rangle \quad , \quad (3.38)$$

onde  $\alpha = x, y, z$  são as componentes de spin. O vetor posição  $\vec{r}$  é dado em unidades de espaçamento de rede e os  $\langle \dots \rangle$  denotam médias térmicas.

A equação de movimento para cada spin é dada por:

$$\frac{d\vec{S}_i}{dt} = \vec{S}_i \times H_{eff} \quad , \quad (3.39)$$

$$H_{eff} = \sum_{\alpha} J_{i,j} (S_{i-1,j}^{\alpha} + S_{i,j-1}^{\alpha} + S_{i+1,j}^{\alpha} + S_{i,j+1}^{\alpha}) \hat{e}_{\alpha} \quad , \quad (3.40)$$

onde  $\alpha = x, y, z$ . A equação 3.39 representa um conjunto de equações acopladas que podem ser integradas numericamente. Para integrar essas equações usamos o método de Runge-Kutta de quarta ordem [30], neste trabalho usamos o método de Runge-Kutta de quarta ordem com um passo de integração  $\delta t = 0.02J^{-1}$ .

## Capítulo 4

# Simulação Monte Carlo - Resultados

Usando as técnicas de simulação de Monte Carlo descritas no Capítulo 3, estudamos o modelo Rotor Planar (FFPR) e o modelo  $XY$  (FFXY) Completamente Frustrados . Obtivemos para estes modelos duas transições de fase em cada um. Uma do tipo Berezinski-Kosterlitz-Thouless nas temperaturas  $T_{BKT}^{PR} = 0.4410J(5)$  e  $T_{BKT}^{XY} = 0.3655J(5)$  e outra do tipo Ising nas temperaturas  $T_I^{PR} = 0.4505J(3)$  e  $T_I^{XY} = 0.3690J(3)$  [44]. Essas transições foram obtidas observando o comportamento de quantidades termodinâmicas como o calor específico, a susceptibilidade magnética, o cumulante de Binder e o módulo da helicidade. As médias foram calculadas sobre um número grande de configurações, tipicamente  $10^6$ , de modo a minimizar os erros nas medidas.

A seguir apresentaremos os resultados de nossas simulações para os modelos  $FFPR$  e  $FFXY$  mostrando separadamente os resultados para as simetrias do tipo Berezinski-Kosterlitz-Thouless e do tipo Ising.

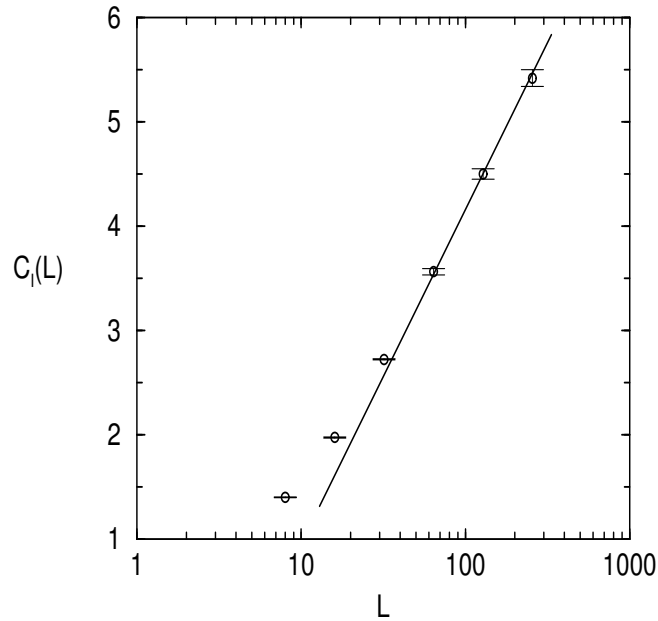
### 4.1 O Modelo Rotor Planar Completamente Frustrado

Na simulação do Modelo  $FFPR$ , conforme definido no capítulo 2, utilizamos redes quadradas de tamanhos  $L = 8, 16, 32, 64, 128$  e  $256$ , utilizando condições

periódicas de contorno. As simulações foram realizadas no intervalo de temperatura  $0.4 \leq T \leq 0.5$  com passos de temperatura de 0.001. Para obter o equilíbrio termodinâmico foram descartadas  $100 \times L \times L$  configurações para cada passo de temperatura. Após o equilíbrio começamos a armazenar os valores da energia e magnetização separados por 5 passos de Monte Carlo para quebrar as correlações entre as sucessivas configurações.

#### 4.1.1 Simetria do tipo Ising ( $Z_2$ )

Analisamos primeiro o comportamento do calor específico. Colocamos em um gráfico os máximos do calor específico como função de  $L^{-\nu}$  e obtivemos o melhor ajuste



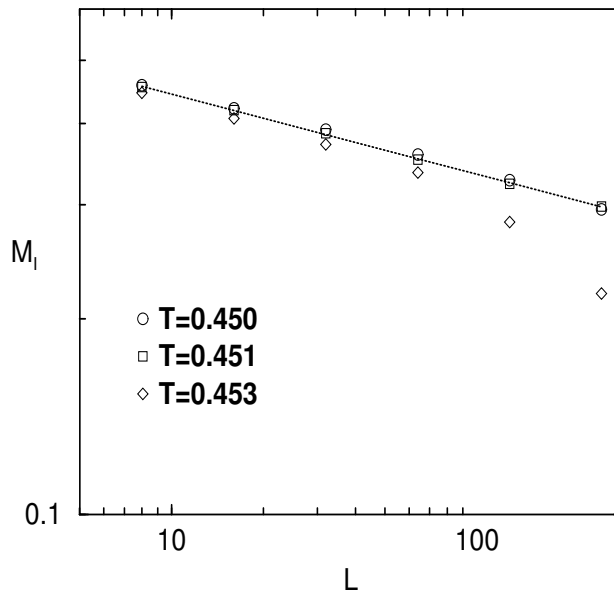
**Fig.4.1:** Os máximos do calor específico como função de  $L^{-\nu}$  para o FFPR. O melhor ajuste é para  $\nu = 1$ .

para  $\nu = 1$ .

Na figura 4.1 podemos ver uma linha reta, que é a melhor curva que se ajusta aos

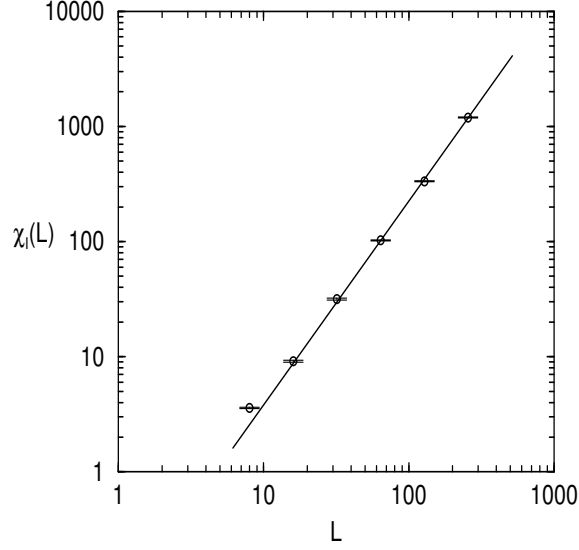
pontos, sugerindo uma divergência logarítmica, o que indica uma transição do tipo Ising.

Em seguida, analisamos a magnetização staggered como função do tamanho  $L$  do sistema. Colocamos em um gráfico os valores do  $\ln(M_s)$  como função do  $\ln(L)$  para temperaturas fixas. Ajustamos uma linha reta para cada conjunto de pontos. Usando o melhor ajuste e a equação de escala 3.29 obtivemos  $T_I^M = 0.4505J(5)$  e os expoentes críticos  $\beta/\nu = 0.123(7)$  conforme mostra a figura 4.2.



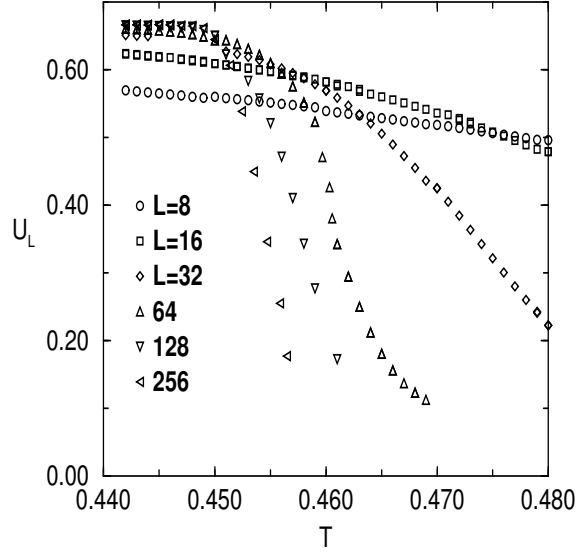
**Fig.4.2:** A magnetização staggered para redes de tamanhos até  $L = 256$  e para as três temperaturas mostradas na figura.

A seguir, colocamos em um gráfico os máximos da susceptibilidade magnética  $\chi$ , relativa a magnetização staggered, como função de  $\ln L$ . O melhor ajuste para essas curvas foi uma linha reta com inclinações  $\gamma/\nu = 1.746(30)$  conforme podemos ver na figura 4.3.



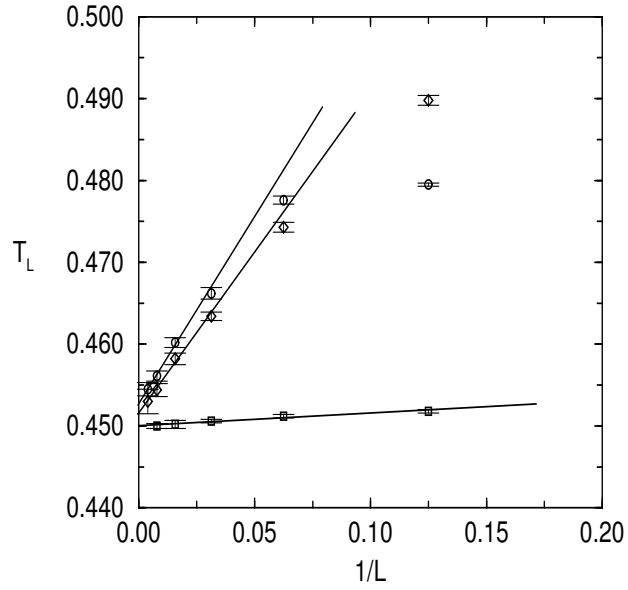
**Fig.4.3:** Os máximos da susceptibilidade como função de  $\ln L$ . O melhor ajuste é uma linha reta com inclinações  $\gamma/\nu = 1.746(30)$  para o FFPR.

Na figura 4.4 mostramos o cumulante de Binder. Não existe um único ponto onde as curvas se encontram independente do tamanho se considerarmos os menores tamanhos de rede simulados. Mas para valores suficientemente grandes,  $L \geq 60$ , observamos que que todas as linhas se encontram no mesmo ponto, indicando a temperatura de transição  $T_I$ .



**Fig.4.4:** O cumulante de Binder como função da temperatura para todos os tamanhos de redes simulados para o modelo FFPR.

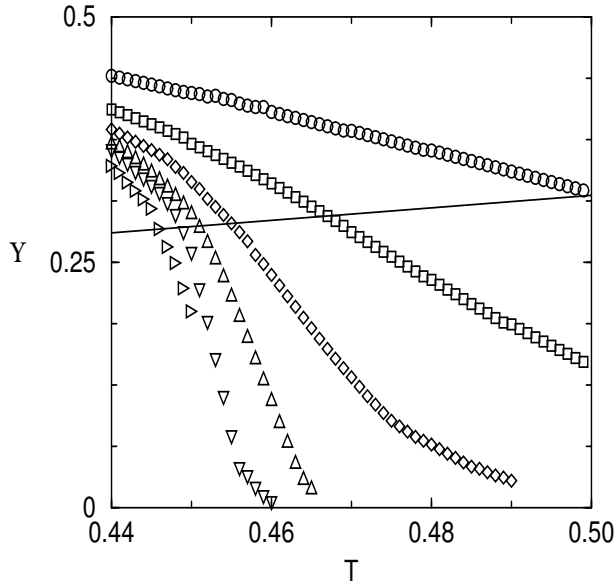
A temperatura crítica  $T_I$  foi obtida então plotando os máximos da susceptibilidade e do calor específico e as intercessões do cumulante de Binder como função de  $L^{-1}$ . A partir desse gráfico temos condições de extrapolar  $L \rightarrow \infty$ , conforme mostramos na figura 4.5. Obtivemos para o FFPR a temperatura  $T_I = 0.4505(5)$ .



**Fig.4.5:** Intercessões do cumulante de Binder, máximos da susceptibilidade e do calor específico. Uma linha reta é a melhor curva que se ajusta para os pontos.

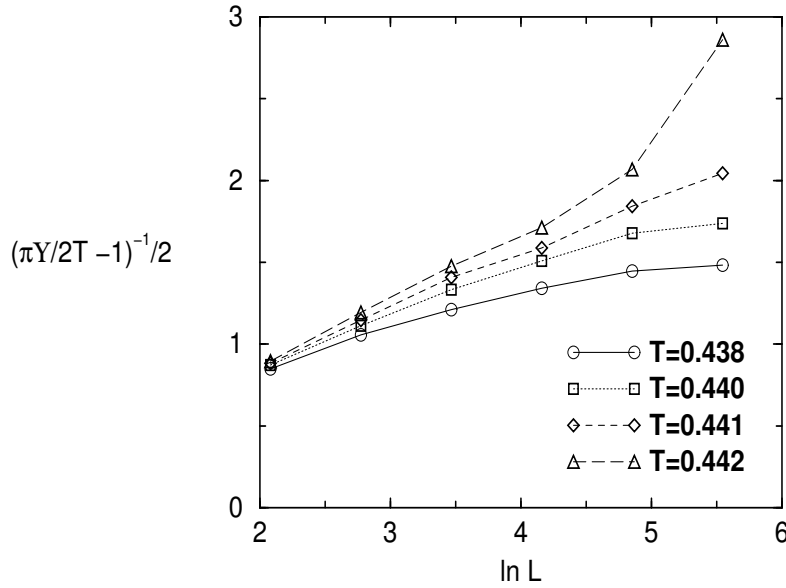
#### 4.1.2 Simetria do tipo XY ( $U(1)$ )

Conforme já discutido no capítulo 3, uma maneira de determinar a temperatura crítica  $T_{BKT}$ , é através do módulo da helicidade. Na figura 4.6 colocamos em um gráfico a intercessão do módulo da helicidade e a linha do salto universal ( $2/\pi$ ), 0 que nos dá o limite superior para a temperatura  $T_{BKT}$ . Para o modelo FFPR obtivemos  $T_{BKT}^{Upper} = 0.4463(3)$ .



**Fig.4.6:** Módulo da helicidade ( $\Upsilon$ ) como função da temperatura. Cada intercessão com a linha  $(2/\pi)$  nos dá um limite superior para a temperatura crítica  $T_{BKT}$

Para obter a temperatura  $T_{BKT}$  utilizamos a relação de Weber-Minnhagen dada pela equação 3.32, onde resolvemos a equação para  $\ln L$  e colocamos os resultados em um gráfico como função de  $\ln L$ . Na temperatura crítica  $T_{BKT}$  esperamos obter uma linha reta. Conforme podemos ver na figura 4.7 obtivemos  $T_{BKT} = 0.4410(5)$  para o modelo FFPR.



**Fig.4.7:** Módulo da helicidade ( $\Upsilon$ ) como função de  $\ln L$ . Na temperatura crítica  $T_{BKT}$  e para grandes valores de  $L$ , os pontos devem definir uma linha reta.

## 4.2 O Modelo $XY$ Completamente Frustrado

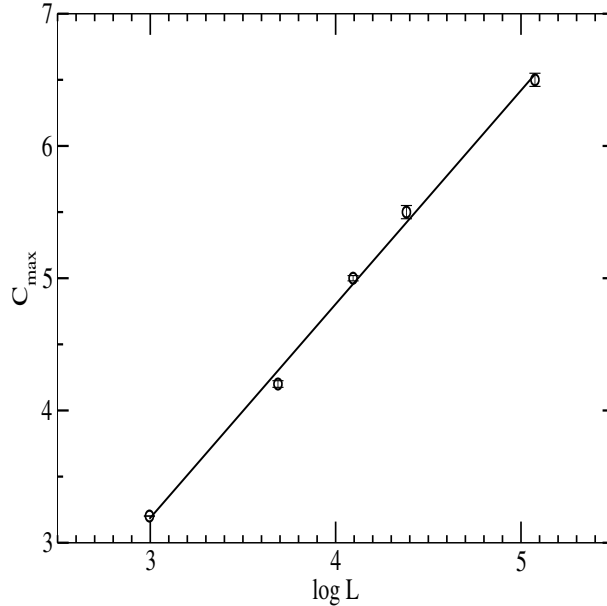
Comparando os resultados do modelo FFPR que obtivemos e com outros trabalhos [13, 20, 22], concluímos que os métodos de simulação que utilizamos levaram a resultados compatíveis e portanto, acreditamos que eles estão corretos. A seguir estudaremos o modelo  $XY$  Completamente Frustrado (FFXY) utilizando os mesmos métodos.

Na simulação do modelo FFXXY, conforme definido no capítulo 2, utilizamos redes quadradas de tamanhos  $L = 20, 40, 60, 80$  e  $160$ . As simulações foram realizadas no intervalo de temperatura  $0.36 \leq T \leq 0.39$  com passos de temperatura

de 0.001. Para obter o equilíbrio termodinâmico foram descartadas  $100 \times L \times L$  configurações para cada passo de temperatura. Após o equilíbrio começamos a armazenar os valores da energia e magnetização separados por 5 passos de Monte Carlo para quebrar as correlações entre as sucessivas configurações. Exatamente como no modelo FFPR. No modelo FFXY entretanto, foram armazenados  $4 \times 10^6$  configurações para todos os tamanhos de rede uma vez que grandes flutuações acontecem devido ao grau de liberdade extra existente para cada spin.

#### 4.2.1 Simetria do tipo Ising ( $Z_2$ )

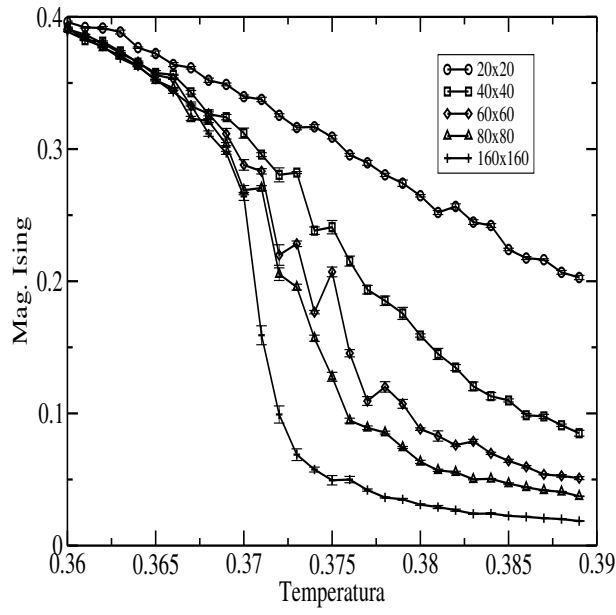
O modelo FFXY apresentou, da mesma maneira que o modelo FFPR, uma linha reta quando colocado em um gráfico como função de  $\ln(L)$ , indicando um com-



**Fig.4.8:** Os máximos do calor específico como função de  $L^{-1}$  para o FFXY.

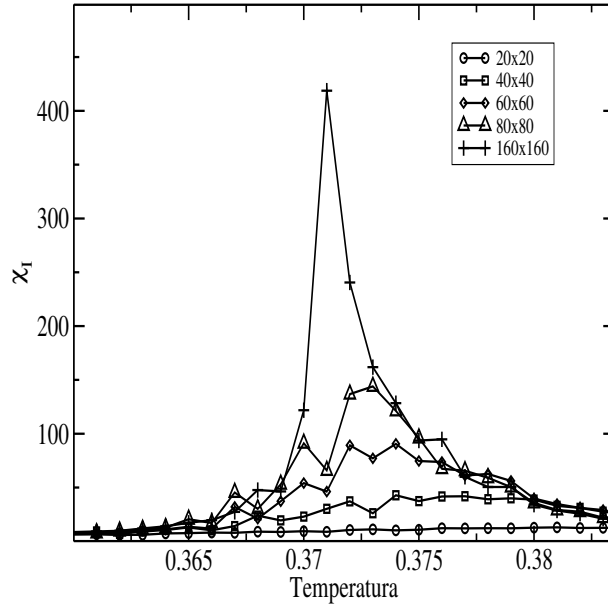
portamento do tipo Ising conforme mostrado na figura 4.8.

Na figura 4.9 mostramos a magnetização staggered para todos os tamanhos de rede simulados. Na figura podemos ver uma inflexão na curva indicando uma transição de fase.



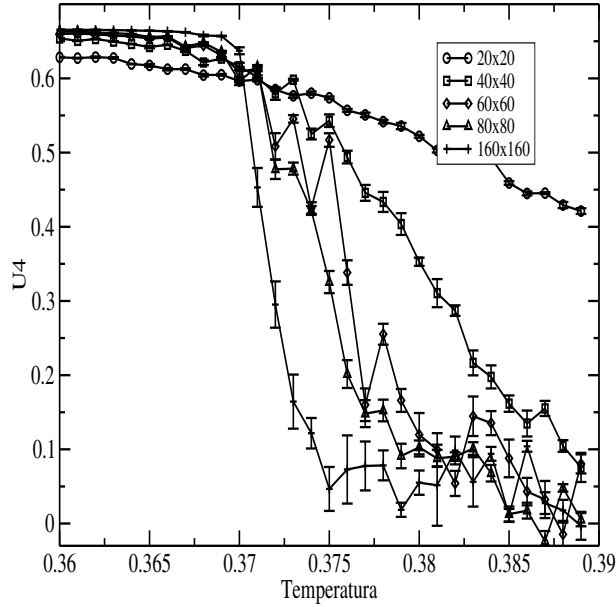
**Fig.4.9:** A magnetização staggered como função de T para o FFXY.

O estudo da magnetização staggered é importante porque ela pode ser considerada um parâmetro de ordem para a simetria Ising presente no modelo.



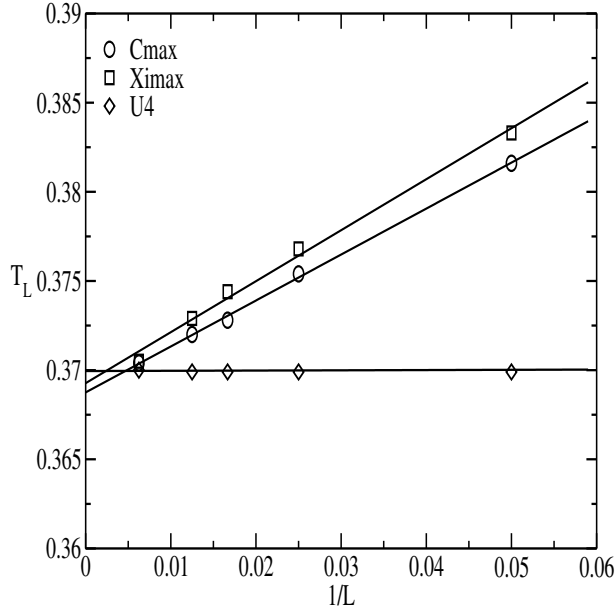
**Fig.4.10:** A susceptibilidade da magnetização staggered como função da temperatura para todos os tamanhos de redes simulados para o modelo FFX.

A partir da magnetização staggered calculamos a susceptibilidade e o cumulante de Binder para todos os tamanhos de rede simulados, os resultados são mostrados na figura 4.10 e 4.11. Esses resultados sugerem uma transição de fase em uma mesma temperatura e são todos compatíveis com a transição de fase do tipo Ising.



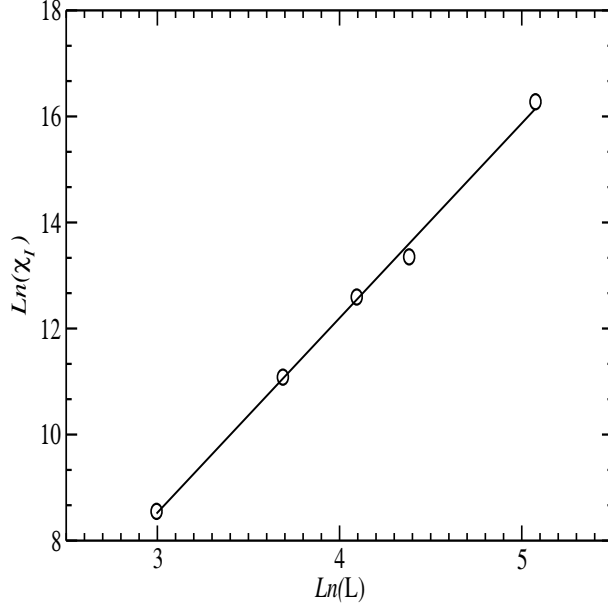
**Fig.4.11:** O cumulante de Binder como função da temperatura para todos os tamanhos de redes simulados para o modelo FFXY.

Para extrapolar os resultados para  $L \rightarrow \infty$  colocamos em um gráfico os máximos do calor específico, da susceptibilidade da magnetização staggered e as interseções do cumulante de Binder para todos os tamanhos de rede. A extrapolação dessas quantidades sugere uma temperatura de transição  $T_I = 0.3690J(3)$  conforme mostrado na figura 4.12.



**Fig.4.12:** Os máximos do calor específico(círculos), da susceptibilidade da magnetização staggered(quadrados) e as interseções do cumulante de Binder(diamantes) para todos os tamanhos de rede para o modelo FFXY. As linhas retas são a melhor regressão para tamanhos maiores que  $L = 20$ .

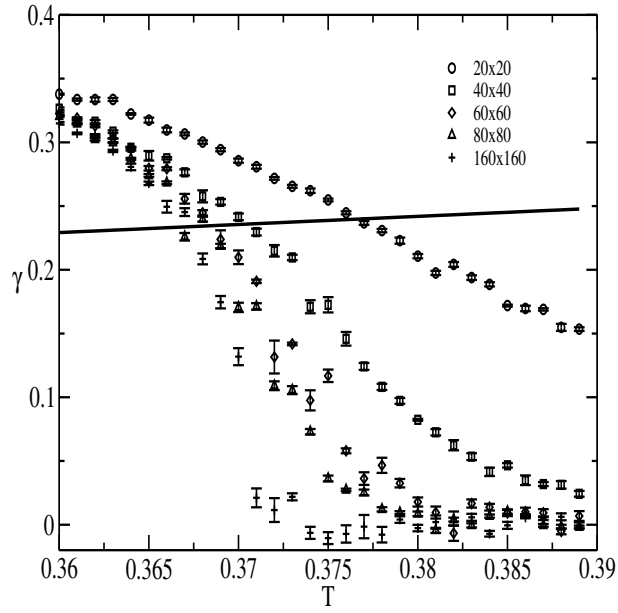
Calculamos o expoente  $\gamma$  a partir dos máximos da susceptibilidade da magnetização staggered. Levando em consideração o comportamento Ising do calor específico( $\alpha = 0$  e  $\nu = 1$ )obtivemos  $\gamma = 1.67(0.9)$  conforme mostra a figura 4.13.



**Fig.4.13:** Os máximos da susceptibilidade da magnetização staggered. A linha reta é a melhor regressão para tamanhos maiores que  $L = 20$  e a inclinação dá  $\gamma = 1.67(0.9)$ .

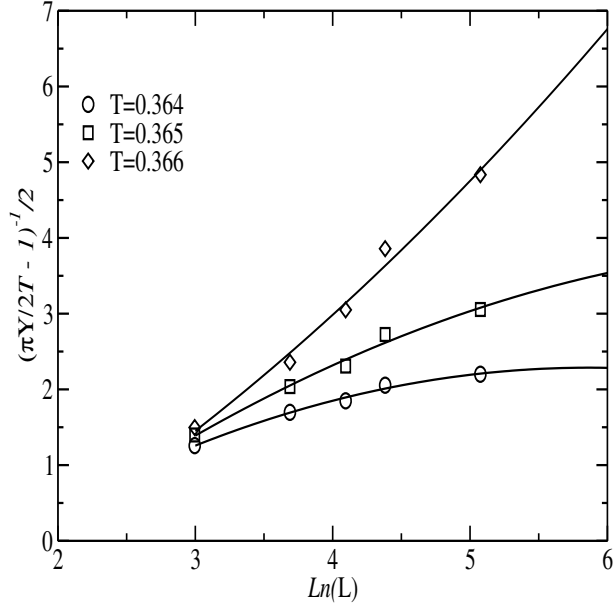
#### 4.2.2 Simetria do tipo XY ( $U(1)$ )

Como no modelo FFPR estimamos o limite superior para a temperatura de transição de Berezinski-Kosterliz-Thouless obtendo a interseção entre o módulo da helicidade e o salto universal  $(2/\pi)T$ , conforme mostrado na figura 4.14. Como limite superior obtivemos para a temperatura de transição de Berezinski-Kosterliz-Thouless  $T_{BKT}^{sup} = 0.3665J(5)$ . Utilizando a relação de Weber-Minnhagen e realizando a mesma análise que fizemos para o modelo FFPR obtivemos a temperatura de transição  $T_{BKT} = 0.3655J(5)$  que está de acordo com a temperatura  $T_{BKT}^{sup}$  se considerarmos as



**Fig.4.14:** O módulo da helicidade como função da temperatura para o modelo FFXY. a linha reta é  $(2/\pi)T$ .

barras de erro conforme mostrado na figura 4.15.

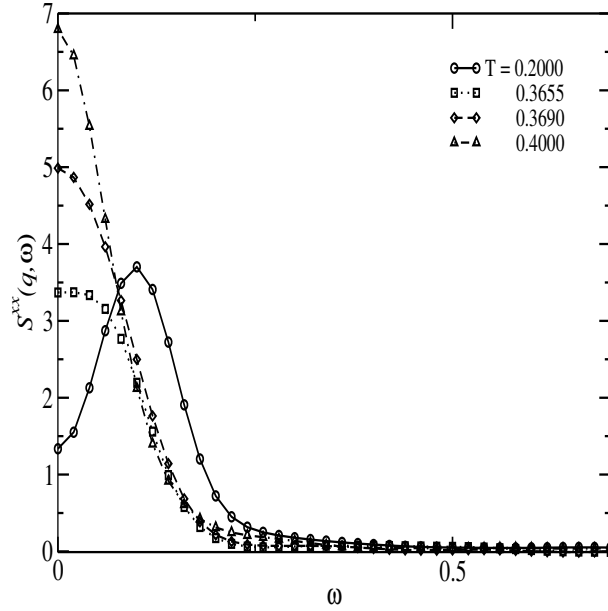


**Fig.4.15:** O módulo da helicidade como função de  $\ln L$  para o modelo FFXY.

### 4.2.3 Dinâmica

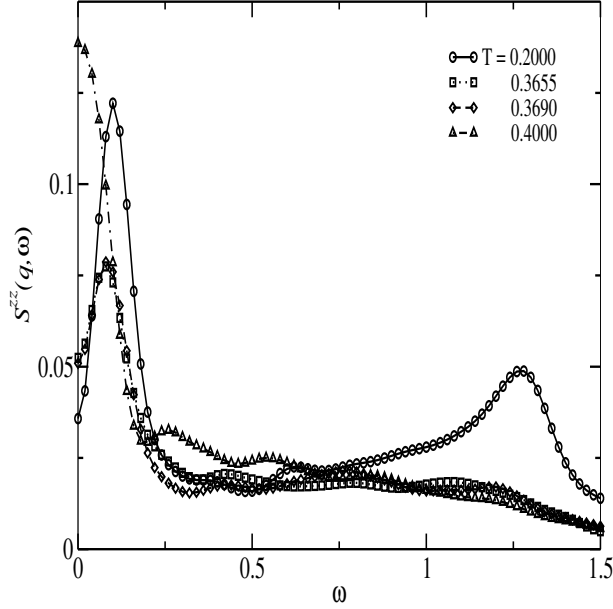
Realizamos cálculos preliminares da dinâmica do modelo FFXY. Para realizar estes cálculos resolvemos a equação de movimento para cada spin, dada pela equação 3.39. A simulação foi realizada partindo de cada configuração de equilíbrio e, conforme citado no capítulo 3, a dependencia temporal dos spins foi determinada com um passo de integração de  $\delta t = 0.02J^{-1}$  até um valor máximo de tempo  $t_{max} = 20J^{-1}$ .

Simulamos a dinâmica para quatro temperaturas,  $T = 0.2J, 0.3655J, 0.369J$  e  $0.4J$  usando redes de tamanhos  $L = 40$  e  $L = 60$ . Desprezamos entre 160.000 e 360.000 passos de Monte Carlo para cada temperatura e tamanho de rede, para obter o equilíbrio térmico.



**Fig.4.16:** Dependência da temperatura da componente  $xx$  da função de espalhamento de neutrons  $S^{\alpha\alpha}(\vec{q}, \omega)$ , como função da frequência  $\omega$ . Essas curvas são para redes de tamanho  $L = 40$  e momento  $q = \frac{2\pi}{40}$ .

Após realizar testes para vários tamanhos  $L$  de rede, observamos que os resultados para diferentes tamanhos  $L$  são muito semelhantes, usamos então  $L = 40$  e  $L = 60$  para nossos cálculos.



**Fig.4.17:** Dependencia da temperatura da componente  $zz$  da função de espalhamento de neutrons  $S^{\alpha\alpha}(\vec{q}, \omega)$ , como função da frequência  $\omega$ . Essas curvas são para redes de tamanho  $L = 40$  e momento  $q = \frac{2\pi}{40}$ .

Também para diminuir o custo de memória e tempo de “CPU”, restringimos os momentos  $\vec{q}$  a  $\vec{q} = (q, 0)$  e  $\vec{q} = (0, q)$ , com  $q$  determinado pela seguinte condição de contorno:

$$q = n_q \frac{2\pi}{L}, \quad n_q = 1, 2, \dots, L. \quad (4.1)$$

A resolução de frequência  $\Delta\omega$  é determinada pelo tempo máximo de integração que introduz oscilações de período  $2\pi/t_{max}$  na função de espalhamento de neutrons dada pela equação 3.37. Para reduzir o efeito dessas oscilações, usamos a função de resolução de frequência, substituindo:

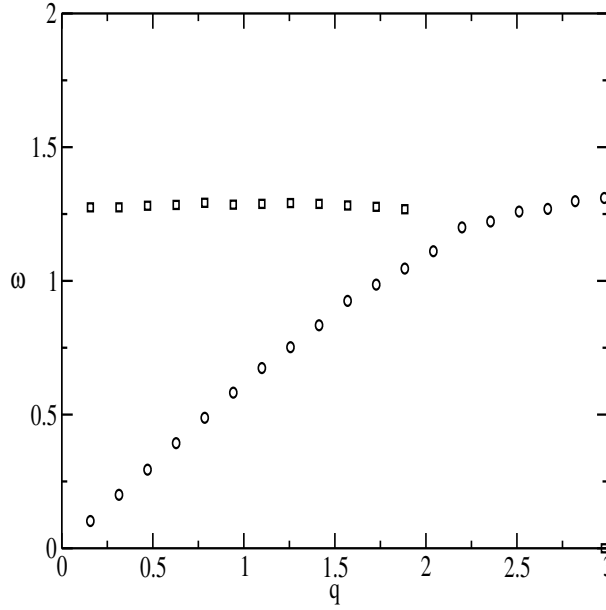
$$C^{\alpha\alpha}(\vec{r} - \vec{r}', t), \quad (4.2)$$

por:

$$C^{\alpha\alpha}(\vec{r}-\vec{r}', t) \exp(-\frac{1}{2}(t\delta\omega)^2). \quad (4.3)$$

Nas figuras 4.16 e 4.17 mostramos  $S^{xx}(\vec{q}, \omega)$  e  $S^{zz}(\vec{q}, \omega)$  para as quatro diferentes temperaturas, abaixo, acima e nas temperaturas críticas. No plano de correlação é sempre impossível identificar picos de pequenas oscilações, pois a função de resolução atenua  $S(\vec{q}, \omega)$ .

Fora do plano de correlação, observamos picos de pequenas oscilações bem definidos conforme a relação de dispersão mostrada na figura 4.18. Os dois ramos de magnons encontrados no modelo aparecem devido a existência de células com ligações ferromagnéticas e antiferromagnéticas.



**Fig.4.18:** Relação de dispersão para  $S^{zz}$ .

#### 4.2.4 Conclusão

Realizamos cuidadosas simulações nos modelos Rotor Planar e  $XY$  Completamente Frustrado. Para o  $FFPR$  nossos resultados confirmaram os resultados obtidos por Olson: O modelo  $FFPR$  tem duas transições de fase. Saindo de baixa temperatura o modelo sofre uma transição do tipo  $BKT$  e a seguir uma transição do tipo Ising. A distância entre as temperaturas de transição está em torno de 2%. O calor específico tem um comportamento do tipo Ising e não existe o salto universal para o módulo da helicidade. Os expoentes críticos são compatíveis com duas transições e portanto o modelo não define uma nova classe de universalidade. Para o modelo  $FFXY$ , a questão é um pouco mais complicada uma vez que existe um grau de liberdade extra introduzido pela componente  $z$  dos spins. Considerando que ambos os modelos estão na mesma classe de universalidade, usamos os mesmos métodos de análise e obtivemos para o modelo  $FFXY$  duas temperaturas críticas separadas por uma diferença de 1% entre elas e como no modelo  $FFPR$  a transição do tipo  $BKT$  ocorre antes da transição do tipo Ising. No modelo  $FFXY$  todos os expoentes críticos calculados também são compatíveis com duas transições.

Realizamos cálculos preliminares da dinâmica do modelo  $XY$  Completamente Frustrado, e observamos que o modelo exibe uma rica estrutura que poderá ser explorada em um trabalho futuro.

# Capítulo 5

## Percolação

Nesta etapa do trabalho estudamos a transição da simetria do tipo Ising presente nos modelos  $FFPR$  e  $FFXY$ , dada pelo vórtices e anti-vórtices, como um problema de percolação. Em 1972 Fortuin e Kasteleyn [43] mostraram como uma transição de fase do tipo Ising pode ser entendida como um problema de percolação.

### 5.1 Definição

Vamos supor uma rede em que cada sítio pode ser ocupado com uma probabilidade  $p$ . Eventualmente podem-se formar ilhas (“clusters”) de sítios ocupados. Dependendo da probabilidade  $p$ , um destes clusters pode conectar dois extremos da rede, ou seja, percolar.

A probabilidade em que o primeiro cluster percola, é chamada de probabilidade de percolação  $p_c$ , e define o limiar de percolação. Temos então que para todo  $p > p_c$  existe pelo menos um cluster que se estende de um lado ao outro da rede. Enquanto que para  $p < p_c$  não existe nenhum cluster infinito.

Duas grandezas importantes em percolação são: 1) o número de clusters com  $s$  sítios na rede,  $n_s(p)$  e, 2) o tamanho médio do cluster  $S_{Av}$ . (Estas grandezas serão definidas na próxima seção.)

A percolação pode ser de sítio ou de ligação. Na percolação de sítio, um nó da rede pode ou não estar preenchido de acordo com alguma probabilidade  $p$ , formando

assim clusters de vizinhos. Já na percolação de ligação temos todos os nós da rede preenchidos e ligamos os vizinhos com uma probabilidade  $p$ , desta forma obtemos clusters de sítios conectados. Neste trabalho estaremos lidando com a percolação de sítio.

## 5.2 Parâmetros Críticos em Percolação

Estamos interessados em obter o limiar de percolação,  $p_c$ , onde  $0 \leq p_c \leq 1$ . Para obter  $p_c$  vamos utilizar algumas quantidades e analisar o comportamento de tais quantidades quando nos aproximamos de  $p_c$ . Como a percolação é um processo estocástico estaremos trabalhando com médias de configurações.

Uma quantidade importante para o estudo da percolação é  $n_s(p)$ , definido como o número de clusters com tamanho  $s$ :

$$\sum_s n_s s = p, \quad (5.1)$$

que é a probabilidade que algum sítio arbitrário pertença a algum cluster. A média da quantidade  $n_s(p)$ :

$$S_{Av}(p) = \frac{\sum p s}{\sum p}, \quad (5.2)$$

então:

$$S_{Av}(p) = \sum \frac{n_s s^2}{\sum_s n_s s}. \quad (5.3)$$

Aqui  $S_{Av}$  é chamado de tamanho médio do cluster. Essa quantidade diverge quando a concentração se aproxima do limiar ( $p \rightarrow p_c$ ).

O comprimento de correlação  $g(r)$  nos dá a probabilidade de que um sítio distante de  $r$  pertença ao mesmo cluster. Se tivermos um sítio a uma distância  $r$ , este sítio e os  $(r - 1)$  sítios restantes entre ele e a origem devem estar preenchidos com a probabilidade  $p$ , então [4] :

$$g(r, p) = p^r \quad (5.4)$$

para todo  $p$  e  $r$ . Para  $p < 1$  a função de correlação decai para zero exponencialmente

se a distância  $r$  vai para o infinito:

$$g(r, p) = \exp \frac{-r}{\xi} \quad (5.5)$$

onde

$$\xi(p) = -\frac{1}{\ln(p)} = \frac{1}{(p_c - p)} \quad (5.6)$$

Podemos ver que o comprimento de correlação  $\xi$  diverge no limiar da percolação [4].

Outra função interessante é o número total de clusters por sítios, que pode ser considerada análoga à energia livre:

$$G(p) = \sum_s n_s(p) \quad (5.7)$$

E a última função de interesse é a fração de sítios ocupados que pertencem ao cluster infinito  $P(p)$ .  $P(p) = 1$  para  $p = 1$  e  $P(p) = 0$  para  $p < p_c$ . Essa função se comporta de maneira semelhante a um parâmetro de ordem para uma transição de fase.

As quantidades acima têm singularidades a partir das quais, definimos um conjunto de expoentes críticos [26] :

$$G(p) \sim |p - p_c|^{2-\alpha} \quad (5.8)$$

$$P(p) \sim (p - p_c)^\beta \quad (5.9)$$

$$S_{Av}(p) \sim |p - p_c|^{-\gamma} \quad (5.10)$$

$$C(r, p) \sim \frac{\exp -r/\xi(p)}{r^{d-2+\sigma}} \quad (5.11)$$

$$\xi(p) \sim |p - p_c|^{-\nu} \quad (5.12)$$

$$n_s(p_c) \sim s^{-\tau} \quad (5.13)$$

O expoente  $\tau$  é conhecido com o expoente de Fisher. Este expoente é calculado a partir da divergencia do número de cluster  $n_s$ , em função do tamaho do cluster.

| Expoente | $d = 2$  | $d = 3$ | $d = 4$ |
|----------|----------|---------|---------|
| $\alpha$ | $-2/3$   | $-0.62$ | $-0.72$ |
| $\beta$  | $5/36$   | $0.41$  | $0.64$  |
| $\gamma$ | $43/18$  | $1.80$  | $1.44$  |
| $\nu$    | $4/3$    | $0.88$  | $0.68$  |
| $\sigma$ | $36/91$  | $0.45$  | $0.48$  |
| $\tau$   | $187/91$ | $2.18$  | $2.31$  |

Tabela 5.1: Valores dos expoentes críticos para a percolação com  $d = 2, 3$  e  $4$ .

Estes expoentes dependem somente da dimensionalidade da rede, independente de sua forma [4]. Na tabela abaixo temos alguns valores desses expoentes para  $d = 2, 3$  e  $4$ . Através de leis de escala, podemos calcular os outros expoentes a partir de somente 2 deles[4]:

$$\sigma = 1/(\beta + \gamma), \quad (5.14)$$

$$\tau = 2 + \beta/(\beta + \gamma), \quad (5.15)$$

$$2 - \alpha = \frac{\tau - 1}{\sigma} = 2\beta + \gamma = d\nu \quad (5.16)$$

onde  $d$  é a dimensão do sistema.

## 5.3 Resultados

Os resultados obtidos no capítulo 4 para os modelos  $FFPR$  e  $FFXY$  indicam que eles apresentam duas transições de fase, uma do tipo Ising e outra do tipo Kosterlitz Thouless [44]. Se este cenário está correto, deve ser possível, obter a temperatura crítica e os expoentes críticos correspondentes à transição Ising usando técnicas de percolação. Assim, examinaremos os modelos  $FFPR$  e  $FFXY$  como um problema de percolação, como discutiremos a seguir.

|   |   |   |   |
|---|---|---|---|
| O | + | O | + |
| + | O | + | O |
| O | + | O | + |
| + | O | + | O |

**Fig.5.1:** Estado fundamental.

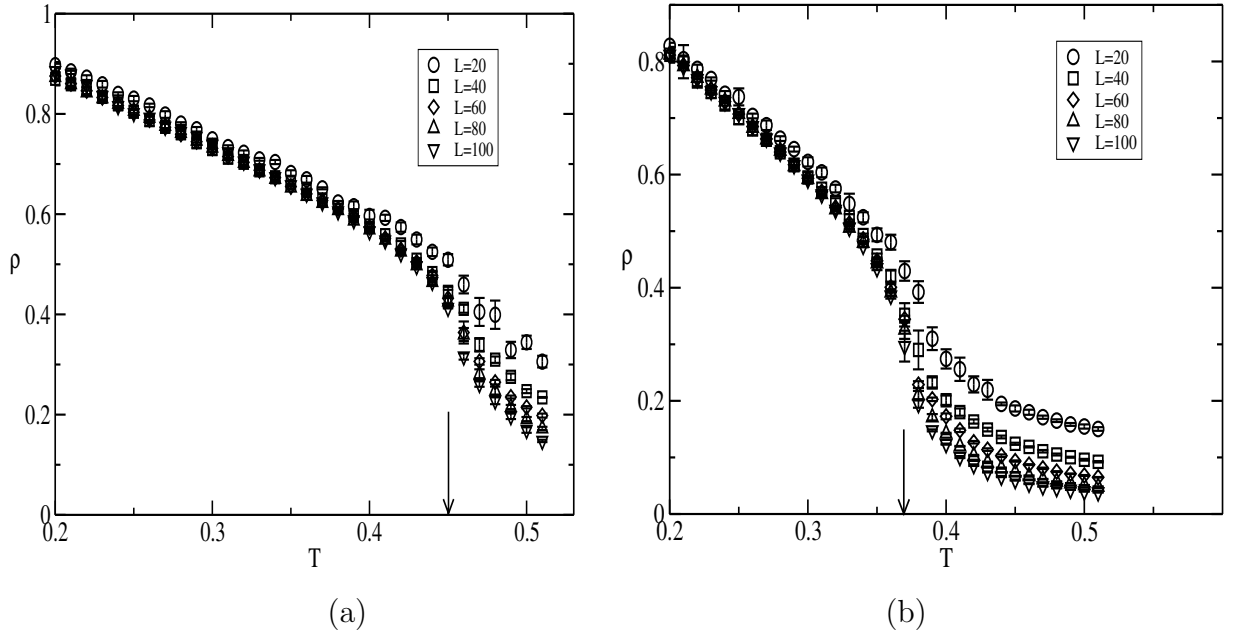
Como sabemos os modelos *FFPR* e *FFXY* exibem uma simetria discreta do tipo Ising, além da simetria contínua dos spins. A simetria discreta criada pela frustração uniforme nos dá uma quiralidade  $f$  que pode ser positiva (vórtice) ou negativa (antivórtice) dada pela equação:

$$f = \frac{1}{\pi} \sum_{\text{plaqueta}} (\theta_i - \theta_j) = \pm 1. \quad (5.17)$$

Quando  $T > 0$  os vórtices e antivórtices começam a se aniquilar tornando assim o modelo similar a um modelo de Ising anti-ferromagnético diluído. Na figura 5.1 temos uma representação do estado fundamental para  $T = 0$ .

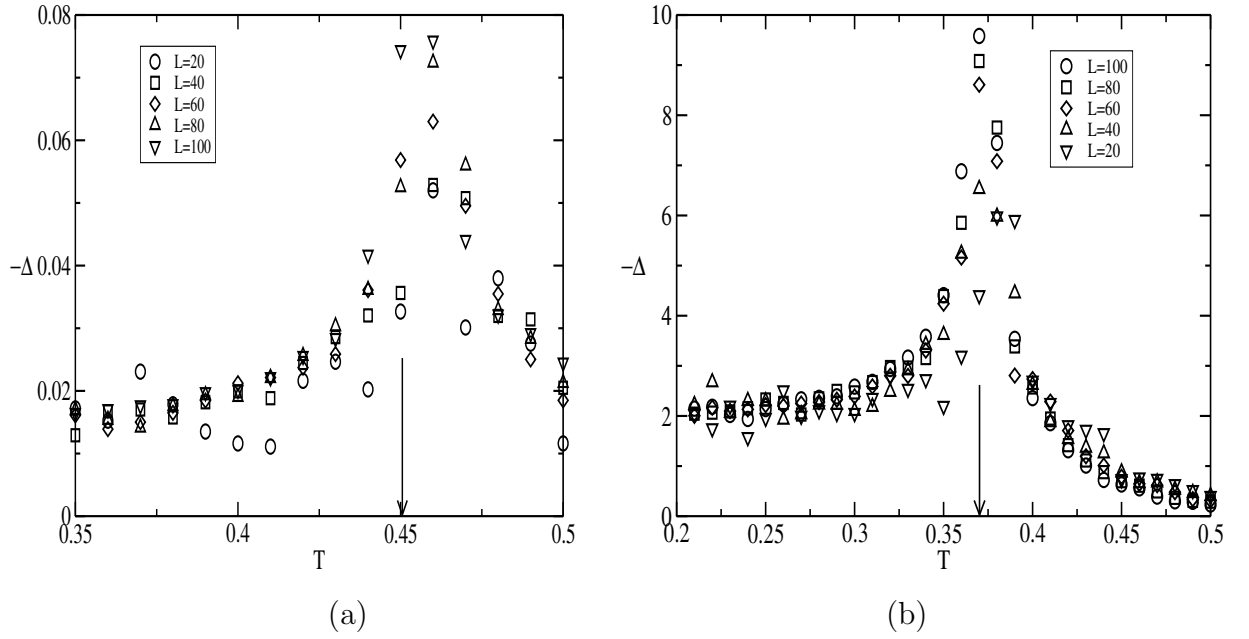
Realizamos simulações em temperaturas entre  $0,2 \leq T \leq 0,5$  e tamanhos de

rede  $L = 20, 40, 60, 80$  e  $100$ . Para cada temperatura ignoramos as  $L \times L \times 100$  configurações iniciais para obtermos o equilíbrio. Após o equilíbrio guardamos  $10^5$  configurações, calculamos o tamanho médio do cluster, a densidade de vórtices e anti-vórtices e a probabilidade de percolação  $P$ .



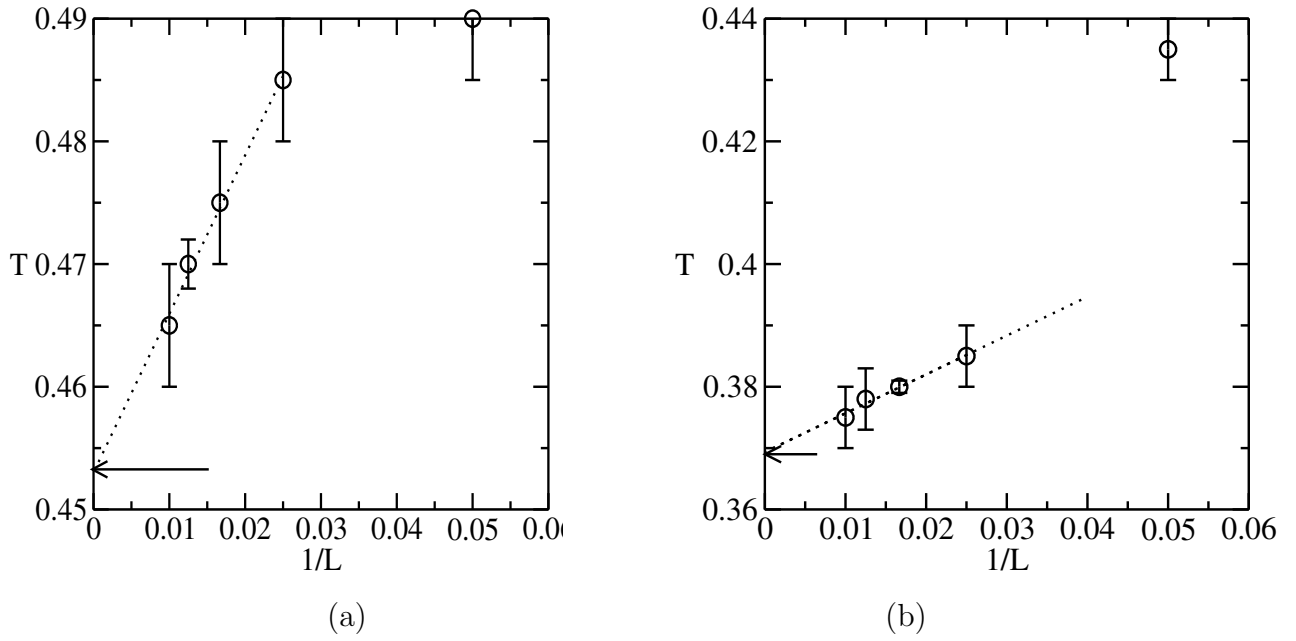
**Fig.5.2:** A figura mostra a densidade de vórtice e antivórtice,  $\rho$ , como função da temperatura para os modelos (a) FFPR e (b) FFX e para alguns tamanhos de rede. Podemos observar uma quebra na curva em uma dada temperatura  $T$ . Uma seta mostra a temperatura crítica para esse modelo obtida através de outro método [44].

A densidade de vórtices e anti-vórtices exibiu uma inflexão em uma determinada temperatura como pode ser visto na figura 5.2. Calculando a derivada dessa curva, mostrada na figura 5.3, encontramos máximos que representamos em um gráfico da temperatura como função de  $1/L$  mostrado na figura 5.4.



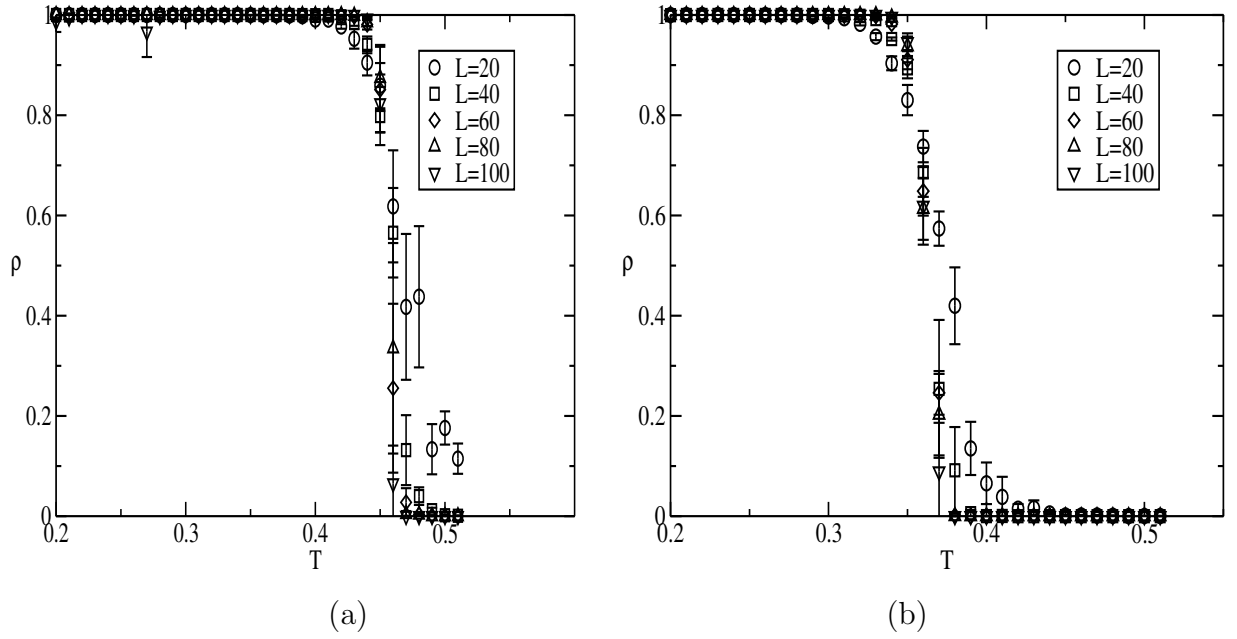
**Fig.5.3:** Na figura temos a derivada da densidade de vórtice e antivórtice como função da temperatura para (a) FFPR e (b) FFX.

A figura 5.4 sugere um comportamento de escala para a densidade que se adapta muito bem ao modelo levando em conta que a temperatura crítica está em perfeita coincidência com a obtida por outros métodos [44]. A mesma temperatura crítica é encontrada usando a probabilidade de percolação como função da temperatura como podemos ver na figura 5.5. Uma estimativa para a temperatura crítica leva a:  $T = 0.451(5)$  para o modelo *FFPR* e  $T = 0.369(5)$  para o modelo *FFXY*.



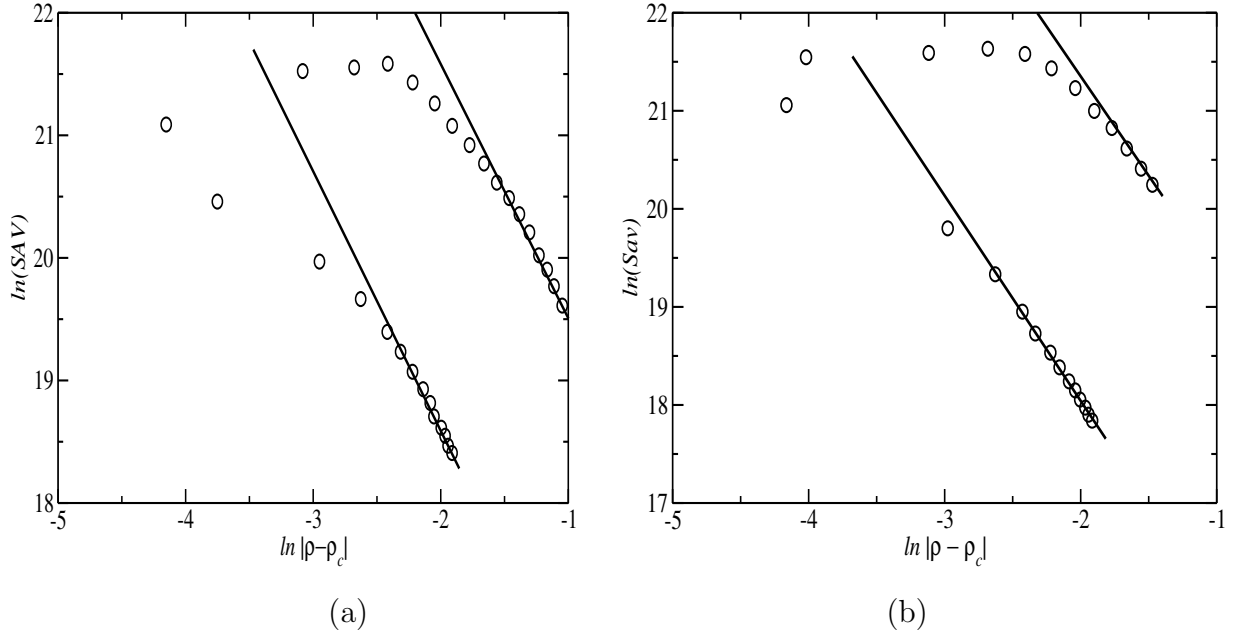
**Fig.5.4:** A figura representa o máximo das derivadas da densidade de vórtice e antivórtice como função de  $L^{-1}$ . A seta indica a extrapolação para  $L \rightarrow +\infty$  que da  $T = 0.451(5)$  para o modelo *FFPR* e  $T = 0.369(5)$  para o modelo *FFXY* que está em concordância com os valores obtidos em [44].

Obtivemos dois expoentes críticos  $(\tau, \gamma)$ , o associado ao tamanho medio do cluster e o associado ao número de cluster  $n_s$ . Na figura 5.6 fizemos um gráfico log-log do tamanho médio do cluster como função da densidade para  $\rho < \rho_c$  e  $\rho > \rho_c$ . Encontramos  $\gamma = 2,08(5)$  que está um pouco abaixo do valor da tabela 5.1.



**Fig.5.5:** A figura mostra a probabilidade de percolação como função da temperatura para (a) FFPR e (b) FFX.

O outro coeficiente ( $\tau$ ), chamado de coeficiente de Fisher, foi obtido através do gráfico do número de cluster  $n_s$  em função do tamanho do cluster  $s$  como mostrado na figura 5.7. Obtivemos  $\tau = 1,78(5)$  que está pouco abaixo do valor teórico dado pela tabela 5.1.

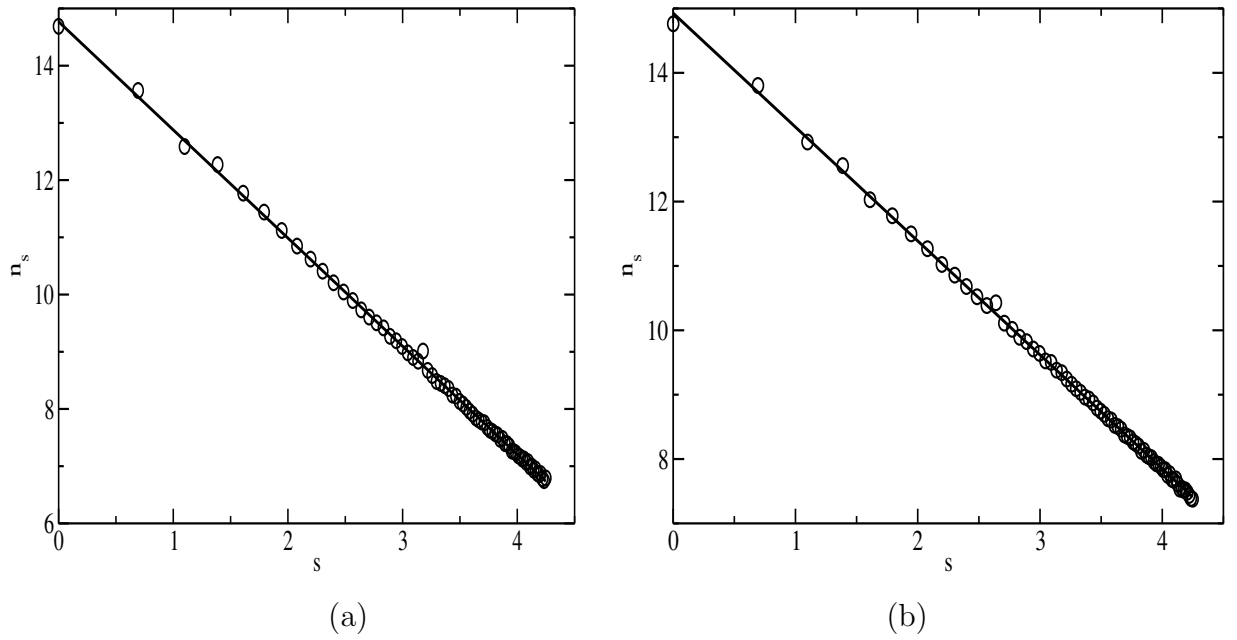


**Fig.5.6:** Gráfico log-log do tamanho médio do cluster como função da densidade para  $\rho < \rho_c$  e  $\rho > \rho_c$ , para (a) FFPR e (b) FFXY.

### 5.3.1 Conclusão

Observamos que o ponto de inflexão na densidade de vórtice e anti-vórtice nos dá uma boa estimativa para a temperatura de transição  $T_{Z2}$ . Uma questão que surge é saber se é uma coincidência ou não. Embora não possamos provar de maneira rigorosa, achamos que a explicação a seguir é razoável. Na temperatura  $T = 0$  existem  $\frac{L \times L}{2}$  pares de vórtices anti-vórtices. Quando a temperatura aumenta, alguns paras começam a se aniquilar. A densidade de vórtice anti-vórtice diminui quando a temperatura aumenta. Quando atingimos a temperatura de Berezinskii-Kosterlitz-Thouless os pares estão fracamente ligados. As ondas de spin predominam sobre as interações entre os pares de vórtices e antivórtices, contudo eles não podem ser

considerados como livres, uma vez que as interações continuam logarítmicas[45]. Após a temperatura de transição de Berezinskii-Kosterlitz-Thouless a energia térmica é alta o suficiente para vencer a energia de “pinning”, induzindo uma cascata de aniquilações e dando origem à inflexão na densidade de vórtices e antivórtices. Como consequência da brusca diminuição do número de pares, a densidade de vórtices e antivórtices cai abaixo do limiar da percolação que leva à temperatura de transição.



**Fig.5.7:** Número de cluster  $n_s$  em função do tamanho do cluster  $s$ . A linha contínua é o melhor ajuste para os dados, para (a) FFPR e (b) FFXY.

Nossos cálculos para o número médio de cluster e para o limiar da percolação nos permitiram obter os coeficientes críticos:  $\gamma$  e  $\tau$ . Os valores que obtivemos para a temperatura crítica esta em excelente concordância com outros cálculos[44]. Os valores dos expoentes críticos são diferentes dos expoentes para redes 2D. Esta discordância de valores acontece devido ao tamanho finito das redes simuladas. Ballesteros, Parisi

e outros [46] mostraram que para o modelo de Ising diluido os expoentes críticos só apresentam os valores teóricos em redes de tamanho infinito. Para redes finitas os autores mostram um diagrama mostrando que o expoente crítico  $\nu > 1$ .

# Capítulo 6

## Conclusão e Perspectivas

Neste trabalho estudamos os modelos FFXY e FFPR através do método de Monte Carlo e como um problema de percolação. Realizamos também a dinâmica do modelo FFXY como um trabalho exploratório.

Nós temos fortes indícios que os modelos exibem duas temperaturas críticas, uma temperatura  $T_I$  para a simetria do tipo Ising, e outra temperatura  $T_{BKT}$  para a simetria contínua. A diferença entre as duas temperaturas críticas são da ordem de 1%, o que exigiu um grande esforço computacional. Utilizando um grande número de configurações, tipicamente  $10^6$ , conseguimos separar as temperaturas com uma resolução de 4 significativos. A transição da simetria contínua aconteceu a uma temperatura menor que a da transição do tipo Ising. Acreditamos que quando nos aproximamos da temperatura de transição da simetria contínua a partir de temperaturas baixas, as excitações da simetria do tipo Ising ocasionam uma queda no módulo da helicidade  $\Upsilon(T)$ . Quando  $\Upsilon(T)/k_B T$  se aproximam do valor  $2/\pi$  as excitações do tipo  $BKT$  se tornam mais importantes produzindo o salto universal  $(2/\pi)$  em  $\Upsilon(T)/k_B T$  a uma temperatura  $T_{BKT} < T_I$ , conforme proposto por Teitel e Jayaprakash [20].

Ainda nesta simulação calculamos as seguintes quantidades termodinâmicas: 1) o calor específico, que mostrou para os dois modelos estudados um comportamento tipo Ising. Esse comportamento foi indicado pela divergência logaritmica de seus máximos com o tamanho  $L$  da rede, 2) o módulo da helicidade, que indicou a transição do tipo Berezinski-Kosterlitz-Thouless. O limite superior da temperatura de transição

da simetria do tipo Berezinski-Kosterlitz-Thouless é indicado pelo cruzamento da curva  $\Upsilon(T)/k_B T$  com a curva do salto universal  $(2/\pi)$ . O valor da temperatura de transição pode ser obtido através da relação de Weber-Minnhagen [41] que leva em conta o tamanho finito da rede, 3)a susceptibilidade magnética da magnetização staggered e 4)o cumulante de Binder para a magnetização staggered. A susceptibilidade magnética da magnetização staggered nos permitiu calcular o expoente crítico  $\gamma$ , que está em boa concordância com o expoente  $\gamma$  para o modelo de Ising. O cumulante de Binder, através do cruzamento das curvas para os diversos tamanhos  $L$  de rede, nos indicou a temperatura de transição da simetria do tipo Ising, juntamente com os máximos do calor específico e os máximos da susceptibilidade magnética da magnetização staggered, através da técnica de “Finite size Scaling”.

Devido a simetria discreta que aparece no modelo analisamos a transição do tipo Ising como um problema de percolação. Fortuin e Kasteleyn mostraram como essa relação acontece [43]. Nossos resultados são compatíveis com uma transição de fase ocorrendo à mesma temperatura crítica ( $T_I$ ) obtida na simulação anterior. Obtivemos também alguns expoentes críticos que estão um pouco abaixo dos valores obtidos em cálculos teóricos. Esta discordância de valores acontece devido ao tamanho finito das redes simuladas. Ballesteros, Parisi e outros [46] mostraram que para o modelo de Ising diluído os expoentes críticos só apresentam os valores teóricos em redes de tamanho infinito. Para redes finitas os autores mostram um diagrama mostrando que o expoente crítico  $\nu > 1$ .

A perspectiva mais interessante que se apresenta para a continuidade deste trabalho é o estudo da dinâmica do modelo  $XY$ , que nos permitirá responder questões tais como:

- Na função de correlação dinâmica existem picos devidos a vórtices?
- Qual o valor do expoente crítico  $z$ , para este modelo?

Para responder estas questões, simulações muito mais refinadas e de muito mais longa duração devem ser feitas.

# Referências Bibliográficas

- [1] E. Ising, Zeits. f. Physik **31**, 253 (1925).
- [2] N. D. Mermin e H. Wagner, Phys. Rev. Lett, **17**, 1133 (1966).
- [3] L. Onsager, Phys. Rev. **65**, 117-149, 1944.
- [4] D. S. Stauffer e A. Aharony, *Introduction to Percolation Theory* (Taylor & Francis, London, 1992).
- [5] V. L. Berezinskii, Zh. Eksp. Teo. Fiz. **61**, 1144 (1971).
- [6] J. M. Kosterlitz e D. J. Thouless, J. Phys. C: Sol. St. Phys., vol. 6, 1181 (1973).
- [7] J. M. Kosterlitz, J. Phys. C: Sol. St. Phys., vol. 7, 1046 (1974).
- [8] J. Villain, J. Phys. C **10**, 4793 (1977).
- [9] E. Granato, J. of Phys. C - Solid Stat. Phys. **20**, L215 (1987).
- [10] D. B. Nicolaides, J. of Phys. A Mathematical and General **24**, L231 (1991).
- [11] E. Granato and M. P. Nightingale, Phys. Rev. B. **48**, 7438 (1993).
- [12] G. Ramirez-Santiago and J. V. Jose, Phys. Rev. B. **49**, 9567 (1994).
- [13] P. Olson, Phys. Rev. Lett. **75**, 2758 (1994).
- [14] P. Olson, Phys. Rev. B. **55**, 3585 (1997).
- [15] S. Y. Lee and K. C. Lee, Phys. Rev. B. **49**, 15184 (1994).
- [16] P. Olson, Phys. Rev. Lett. **77**, 4850 (1996).

- [17] G. S. Jeon, S. T. Park e m. y. Choi Phys. Rev.B. **55**,14088 (1997).
- [18] S. Y. Lee and K. C. Lee, Phys. Rev.B. **57**,8452 (1998).
- [19] E. H. Boubcheur and H. T. Chiep, Phys. Rev.B. **58**,5163 (1998).
- [20] S. Teitel e C. Jayaprakash, Phys. Rev.B. **27**,598601 (1983).
- [21] D. R. Nelson e J. M. Kosterlitz, Phys. Rev. Lett, **39**, 1201 (1977).
- [22] B. Berge, H. T. Diep, A. Ghazali e P. Lallemand,Phys. Rev.B. **34**,31773184 (1986).
- [23] J. Tobochnik e G. V. Chester, Phys. Rev. B **20**, 3761, (1979).
- [24] J. E. Van Himberg e S. Chakravarty, Phys. Rev. B **23**, 359, (1981).
- [25] H. Weber e P. Minnhagen, Phys. Rev.B. **37**,5986 (1988).
- [26] M. Plischke, *Equilibrium Statistical Physics* (World Scientific,Singapura, 1994).
- [27] S. R. Salinas, *Introdução à Física Estatística* (EDUSP, 1997).
- [28] N. Metropolis, A. Rosenbluth, M. Rosenbluth, A. Teller, e E. Teller, J. Chem. Phys. **21**, 1087 (1953).
- [29] D. P. Landau e K. Binder *A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics* (Cambridge University Press, Cambridge, 2000)
- [30] B. Carnahan, H. A. Luther and J. O. Wilkes, *Applied Numerical methods*(John Wiley & Sons, inc. , New York 1969).
- [31] R. H. Swendsen e J. S. Wang , Phys. Rev. Lett, **58**, 86 (1987).
- [32] D. Kandel, E. Domany , Phys. Rev. Lett, **60**, 1591 (1988).
- [33] H. Eugene Stanley, *Introdution to Phase Transitions and Critical Phenomena* (Claredon Press, Oxford,1992).
- [34] F. J. Resende and B. V. Costa, Phys. Rev. E, **58**, 5183 (1998).

- [35] *Computational probability and simulation*, editado por Sidney J. Yakowitz (Addison-Wesley Publishing Company, Massachusetts, 1977), Capítulo 1.
- [36] *Numerical Methods and software*, editado por D. Kahaner, C. Moler e S. Nash (Prentice-Hall series in computational mathematics, 1989), Capítulo 10.
- [37] H. Callen *Introduction to Thermodynamics and Termostatics* (Willey, Nova York, 1985).
- [38] T. Otha e D. Jasnow, Phys. Rev. B **20**, 139 (1979).
- [39] M. E. Fisher, *Critical Phenomena*, ed. M. S. Green (Academic Press, New York, 1971)
- [40] *Aplications of the Monte Carlo Method in Statistical Physics*, editado por K. Binder **36** (Springer-Verlag, Berlin, 1987).
- [41] P. Minnhagen Rev. of Mod. Phys.**59**,1001,(1987).
- [42] Kun chen, *Computer Simulations of Three-Dimensional Classical Heisenberg Models* (TD, University of Georgia 1993).
- [43] C. M. Fortuin e P. W. Kasteleyn, Physica, **57**, 536 (1972).
- [44] A. B. Lima and B. V. Costa, Jour. of Mag. and Mag. Mat. **263** 324-331.
- [45] J. E. R. Costa and B. V. Costa, Phys. Rev. B, **57**, 1510 (1998).
- [46] H. G. Ballesteros, L. A. Fernández, V. Martín-Mayor, A. M. Sudupe, G. Parisi e J. J. Ruiz-Lorenzo, Jour. of Phys. A: Math. Gen. **30**, 8379, (1997).
- [47] N. Goldenfeld, *Lectures on Phase Transitions and the Renormalization Group* (Addison-Wesley Publishing Company, Urbana, 1992).
- [48] J. M. Thijssen *Computational Physics* (Cambridge University Press, Cambridge, 2000)
- [49] K. Huang, *Statistical Mechanics* (John Wiley&Sons, New York, 1987).

[50] J. B. Kogut, Rev. Mod. Phys., **51**, 4, 649 (1979).

[51] A. B. Lima and B. V. Costa, Braz. Jour. of Phys. **34** 403-404 Sp. Iss. SI JUN 2004