

Estudo de modelos de spins contínuos anisotrópicos:

aplicações a misturas de ${}^3\text{He}$ - ${}^4\text{He}$

Rodrigo Teixeira Santos Freire

**Estudo de modelos de spins
contínuos anisotrópicos:
aplicações a misturas de
 ${}^3\text{He} - {}^4\text{He}$**

Rodrigo Teixeira Santos Freire

Orientador: Prof. João Antônio Plascak

Co-orientador: Prof. David P. Landau

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

Belo Horizonte

Agosto de 2005

Aos meus pais,
Sirlei e Antônio,
ao Sérgio Lúcio
e à Patrícia.

Agradecimentos

Agradeço

A Deus e Nossa Senhora Rainha da Paz, por tudo...

A meus pais, que sempre estiveram a meu lado, me apoiando e guiando em todos os instantes de minha vida.

Ao Plascak, orientador e amigo, pela convivência agradável, pela orientação lúcida e eficaz ao longo de todo esse nosso trabalho. Que eu tenha me ‘contaminado’ pelo seu dom de ensinar. À Maricéu, por suas orações, carinho e apoio.

Ao David, por ter me acolhido com tanta generosidade no ‘Center for Simulational Physics’, por todo seu ensinamento e amizade.

À Shan-Ho e ao Steven Mitchell, pela acolhida em Athens e toda a ajuda que me deram durante a minha estada.

A meu irmão, pela amizade e pela orientação em muito do que fiz e faço.

À Patrícia, minha amada sempre presente, por todo seu amor, carinho e apoio.

Aos amigos Anderson e Tatiana, pela amizade sincera, por toda a ajuda e conversas (sérias e fiadas) ao longo desses anos e dos que não de vir.

Aos meus amigos da Física, de modo especial à Juliana, Giselle e José Coelho.

Aos demais amigos de Athens e da Universidade da Georgia.

Aos professores, funcionários, colegas e amigos do DF que de alguma forma colaboraram para que esse trabalho acontecesse.

Ao CNPq, pela concessão da bolsa.

Resumo

Neste trabalho, estudamos, através de simulações Monte Carlo, as transições de fases que ocorrem em dois modelos tridimensionais distintos, obtendo o diagrama de fases de cada um deles, para diferentes valores dos parâmetros do hamiltoniano correspondente. No caso do modelo de Heisenberg anisotrópico submetido a um campo cristalino, a competição entre as anisotropias de troca e cristalina resulta em um diagrama de fases de topologia rica, que revela duas fases ordenadas, separadas por uma linha de transição de primeira ordem. Essas fases, por outro lado, encontram-se separadas da fase desordenada por meio de duas linhas de transição de segunda ordem. As três linhas de transição terminam em um ponto bicrítico. Para a versão XY do modelo vetorial de Blume-Emery-Griffiths, o diagrama de fases obtido reproduz, para uma faixa de parâmetros do modelo, a topologia do diagrama de fases de misturas de ${}^3\text{He}$ - ${}^4\text{He}$. Esse diagrama revela uma fase superfluida, rica em ${}^4\text{He}$, que sofre uma transição para uma fase normal. Essa transição é de primeira ou segunda ordem, dependendo da região do diagrama examinada. Um das características mais importantes desse diagrama é a existência de um *ponto tricrítico*, o qual, para certos valores dos parâmetros do modelo, se decompõe em um ponto crítico terminal e um ponto crítico duplo terminal. Esses pontos foram localizados com boa precisão. O estudo desse modelo proporciona a base necessária para a investigação futura de propriedades dinâmicas de misturas de ${}^3\text{He}$ - ${}^4\text{He}$.

Abstract

We have studied, through Monte Carlo simulations, the phase transitions which occur in two different three-dimensional models, obtaining the respective phase diagram for different values of the parameters of the hamiltonian. For the anisotropic Heisenberg model in a crystal field, the competition between the crystalline and exchange anisotropies produces a phase diagram of rich topology, which displays two ordered phases, separated by a first-order transition line. These phases are separated from the disordered phase by two second-order transition lines. All transition lines terminate at a bicritical point, whose location was estimated. As for the XY vector Blume-Emery-Griffiths model, the phase diagram obtained reproduces, for a range of the parameters of the model, the topology of the one observed for bulk mixtures of ${}^3\text{He}$ - ${}^4\text{He}$. The phase diagram displays a superfluid, ${}^4\text{He}$ -rich phase which undergoes a phase transition to a normal phase. This transition is first- or second-order, depending on the region of the phase diagram examined. One of the main features of this diagram is the existence of a tricritical point, which, for some values of the parameters of the model, decomposes into a critical endpoint and a double critical endpoint. These points were located with reasonable precision. This study provides the basis for the subsequent investigation of dynamic properties of ${}^3\text{He}$ - ${}^4\text{He}$ mixtures.

Conteúdo

1	Introdução	1
1.1	O modelo de Heisenberg anisotrópico submetido a um campo cristalino	3
1.2	O modelo vetorial XY de Blume-Emery-Griffiths	5
2	Fundamentos teóricos	8
2.1	Transições de fases e expoentes críticos	8
2.2	A Teoria de Landau	10
2.3	A hipótese de escala	11
2.4	A Hipótese de Escala de Tamanho Finito	12
3	Métodos Simulacionais e de Análise de Dados	16
3.1	Algoritmos utilizados	16
3.1.1	Para o modelo de Heisenberg anisotrópico submetido a um campo cristalino	16
3.1.2	Para o modelo vetorial de Blume-Emery-Griffiths	18
3.2	Métodos de análise	23
3.2.1	O Método do histograma	23
3.2.2	O método do histograma multidimensional	26
3.2.3	Análise da distribuição universal de probabilidades para o parâmetro de ordem	28
3.2.4	Mistura de Campos	30

4	O modelo de Heisenberg anisotrópico submetido a um campo cristalino	32
4.1	Introdução	33
4.2	Resultados	36
4.3	Conclusões	43
5	O Modelo Vetorial de Blume-Emery-Griffiths-versão XY	45
5.1	Introdução	46
5.2	Resultados	49
5.2.1	$K=1$	49
5.2.2	$K < 1$	61
5.2.3	$K=1,3$	62
5.2.4	Distribuição de probabilidades para o parâmetro de ordem: linha de segunda ordem	70
5.2.5	Outro método para encontrar o ponto crítico duplo terminal?	73
5.3	Conclusões	74
6	Conclusões e perspectivas	75
6.1	Modelo de Heisenberg anisotrópico submetido a um campo cristalino	75
6.2	Modelo vetorial XY de Blume- Emery-Griffiths	76
A	O modelo de Heisenberg anisotrópico submetido a um campo cristalino a temperatura zero	82
B	O modelo vetorial XY de Blume-Emery-Griffiths a temperatura zero	84
C	Teoria de Landau para o Ponto Tricrítico	87

Lista de Figuras

3.1	Distribuição universal de probabilidades do parâmetro de ordem para os modelos de Ising bidimensional de spin 1/2, spin 1 e spin 3/2.	29
4.1	Comportamento da susceptibilidade magnética por spin e de sua componente z no modelo de Heisenberg anisotrópico submetido a um campo cristalino.	36
4.2	Comportamento do calor específico para $A = 1$ no modelo de Heisenberg anisotrópico submetido a um campo cristalino.	37
4.3	Diagrama de fases para o modelo de Heisenberg anisotrópico submetido a um campo cristalino ($A = 1$).	38
4.4	Análise de escala finita (transição de segunda ordem) para o máximo da susceptibilidade magnética no modelo de Heisenberg anisotrópico submetido a um campo cristalino.	39
4.5	Análise de escala finita (transição de segunda ordem) para a temperatura no modelo de Heisenberg anisotrópico submetido a um campo cristalino.	41
4.6	Ciclo de histerese para transição de primeira ordem no modelo de Heisenberg anisotrópico submetido a um campo cristalino.	42
4.7	Análise de escala finita para o máximo da susceptibilidade magnética (transição de primeira ordem) no modelo de Heisenberg anisotrópico submetido a um campo cristalino.	42
4.8	Diagrama de fases para o modelo de Heisenberg anisotrópico submetido a um campo cristalino ($A = 0, 5$).	43

5.1	Função correlação temporal de equilíbrio calculada para diversas misturas de algoritmos no modelo vetorial XY de Blume-Emery-Griffiths.	50
5.2	Comportamento de grandezas termodinâmicas no modelo vetorial XY de Blume-Emery-Griffiths.	52
5.3	Diagrama de fases do modelo vetorial XY de Blume-Emery-Griffiths para $K = 1$	53
5.4	Ciclo de histerese para transição de primeira ordem no modelo vetorial XY de Blume-Emery-Griffiths.	54
5.5	Distribuição de probabilidades do parâmetro de ordem no ponto tricrítico ($K = 1$) no modelo vetorial XY de Blume-Emery-Griffiths.	57
5.6	Análise de escala finita no ponto tricrítico ($K = 1$) no modelo vetorial XY de Blume-Emery-Griffiths.	57
5.7	Distribuição universal de probabilidades para o ponto tricrítico ($K = 1$) no modelo vetorial XY de Blume-Emery-Griffiths.	58
5.8	Análise de escala finita para a componente planar da susceptibilidade magnética no ponto tricrítico do modelo vetorial XY de Blume-Emery-Griffiths ($K = 1$).	59
5.9	Análise de escala finita para transições de primeira e segunda ordem na vizinhança do ponto tricrítico do modelo vetorial XY de Blume-Emery-Griffiths ($K = 1$).	60
5.10	Diagrama de fases ,no limte termodinâmico, do modelo vetorial XY de Blume-Emery-Giffiths na vizinhança do ponto tricrítico ($K = 1$)	61
5.11	Distribuição de probabilidades para a magnetização planar nas transições de primeira e segunda ordem do modelo vetorial XY de Blume-Emery-Griffiths ($K = 1$).	62
5.12	Diagrama de fases do modelo para diferentes valores do parâmetro K	63

5.13	Diagrama de fases do modelo vetorial XY de Blume-Emery-Griffiths para $K = 1, 3$	65
5.14	Ciclo de histerese para transição de primeira ordem ($K = 1, 3$)	66
5.15	Comportamento do parâmetro de ordem na vizinhança do ponto crítico duplo terminal ($K = 1, 3$)	66
5.16	Comportamento linearizado do parâmetro de ordem na vizinhança do ponto crítico duplo terminal.	67
5.17	Distribuição universal de probabilidades para o ponto crítico duplo terminal ($K = 1, 3$).	69
5.18	Análise de escala finita para o ponto crítico duplo terminal ($K = 1, 3$)	70
5.19	Distribuição universal de probabilidades para a linha de transições de segunda ordem do modelo vetorial XY de Blume-Emery-Griffiths para diferentes tamanhos de rede.	71
5.20	Análise de escala finita para transições de segunda ordem da classe de universalidade XY tridimensional ($K = 1$ e $K = 1, 3$)	72
5.21	Distribuição universal de probabilidades para a linha de transições de segunda ordem do modelo vetorial XY de Blume-Emery-Griffiths. Resultados para $L = 18$	72
A.1	Esboço da energia a temperatura zero para o modelo de Heisenberg anisotrópico submetido a um campo cristalino.	83
B.1	Esboço do comportamento da energia a temperatura zero para o modelo vetorial XY de Blume-Emery-Griffiths.	85
C.1	Diagrama de fases para o ponto tricrítico no plano (A, B) obtido pela teoria fenomenológica de Landau.	89

Lista de Tabelas

5.1	Valores de temperatura e concentração de 3He no ponto tricrítico para diferentes valores do parâmetro K do modelo vetorial XY de Blume-Emery-Griffiths.	63
5.2	Parâmetros utilizados para a distribuição $P_L^*(\mathcal{D})$	69

Capítulo 1

Introdução

As transições de fases estão presentes em nossa vida diária: na fervura da água para o café; na garrafa de cerveja esquecida no congelador, que estoura devido ao congelamento do líquido; na fundição de metais.

Muito embora esses fenômenos façam parte do cotidiano das sociedades há séculos, a primeira teoria de sucesso para descrevê-los foi apresentada somente no século XIX, por Van der Waals, em sua tese de doutorado [1]. Nesse trabalho, Van der Waals propõe um modelo fenomenológico para as transições de fases nos fluidos, introduzindo, na Lei de Boyle, modificações que levam em consideração a repulsão de caroço duro entre as moléculas e uma correção relacionada à parte atrativa do potencial intermolecular.

Mais tarde, no início do século XX, Pierre Curie e Pierre Weiss propuseram uma teoria fenomenológica para explicar as transições de fases em sistemas magnéticos [1]. Essa teoria supõe que cada spin da rede cristalina interage com os demais através de um campo médio, produzido pelo demais spins do sistema. Essas teorias, conhecidas como teorias clássicas, ainda hoje são empregadas para a análise qualitativa de várias transições de fases, em diversos sistemas físicos.

Entretanto, com o advento, a partir de 1960, de métodos experimentais adequados para a investigação das transições de fases na vizinhança da criticalidade, verificou-se que diversas grandezas termodinâmicas divergiam

nessa região e que esse comportamento podia ser descrito por um conjunto de *expoentes críticos*. No entanto, os valores desses expoentes, previstos pelas teorias clássicas, não concordavam com aqueles obtidos experimentalmente. Dessa forma, vários modelos de spins foram propostos com o objetivo de estudar as transições de fases em sistemas magnéticos. Para a maior parte desses modelos não há (pelo menos até agora) solução exata, de modo que seu estudo depende, essencialmente, de métodos numéricos, aliados ou não a aproximações analíticas.

Entram em cena, então, as *simulações computacionais* que, em conjunto com métodos experimentais e teóricos, contribuem para a maior compreensão dos fenômenos físicos e melhor compreensão da natureza. Depois do trabalho pioneiro de Metropolis e colaboradores em 1953 [2], que introduziram o *método Monte Carlo* [3, 4] para o estudo da termodinâmica de discos duros, esse método tem sido progressivamente aprimorado e aplicado a uma gama imensa de problemas em transições de fases e fenômenos críticos. Avanços recentes em técnicas simulacionais e de análise de dados, aliados ao progresso vertiginoso da tecnologia dos computadores, permitiram às simulações produzir resultados de alta precisão (ou mesmo resultados não acessíveis por outras abordagens).

Nesse trabalho, empregaremos simulações Monte Carlo para o estudo de transições de fases e do comportamento crítico dos modelos de Heisenberg anisotrópico submetido a um campo cristalino e para a versão XY do modelo vetorial de Blume-Emery-Griffiths, os quais serão introduzidos mais abaixo. No Cap. 2, apresentaremos uma breve discussão dos fundamentos teóricos subjacentes às transições de fases e fenômenos críticos. Introduzimos os métodos de simulação e de análise empregados em nosso trabalho no Cap. 3. Apresentamos, no Cap. 4, os resultados obtidos para o modelo de Heisenberg anisotrópico submetido a um campo cristalino, enquanto que, no Cap. 5, discutimos os resultados obtidos para a versão XY do modelo vetorial de Blume-Emery-Griffiths. As conclusões e perspectivas futuras para o nosso trabalho são finalmente apresentadas no Cap. 6. No Apêndice A, discutimos

o comportamento, a temperatura zero, do modelo de Heisenberg anisotrópico submetido a um campo cristalino. No Apêndice B, essa discussão é apresentada para o modelo vetorial XY de Blume-Emery-Griffiths. No Apêndice C, apresentamos a teoria fenomenológica de Landau para o ponto tricrítico, encontrado no diagrama de fases da versão estudada do modelo de Blume-Emery-Griffiths.

1.1 O modelo de Heisenberg anisotrópico submetido a um campo cristalino

O modelo de Heisenberg anisotrópico submetido a um campo cristalino pode ser descrito pelo hamiltoniano

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - A \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^z S_j^z + D \sum_{i=1}^N (S_i^z)^2, \quad (1.1)$$

onde \vec{S} representa um spin clássico tridimensional, J e A são parâmetros de interação de troca e D é a intensidade do campo cristalino. $\langle i, j \rangle$ representa uma soma sobre primeiros vizinhos em uma rede de N sítios.

O primeiro termo é o hamiltoniano clássico de Heisenberg, que tem sua origem na interação eletrostática entre pares de elétrons de átomos vizinhos, em consequência do princípio de exclusão de Pauli. Como dois ou mais elétrons não podem ocupar o mesmo estado quântico, dois elétrons, de dois átomos vizinhos, de spins paralelos, não podem estar muito próximos no espaço (já que não podem ocupar o mesmo orbital). Por outro lado, se esses elétrons possuem spins anti-paralelos, já estando, portanto, em estados diferentes, podem ocupar o mesmo orbital, ficando assim mais próximos. Dessa forma, a orientação relativa dos spins resulta em diferenças na separação espacial dos elétrons, o que afeta a energia eletrostática de interação entre eles. Se $J > 0$, como é o caso aqui, a energia de interação torna-se menor quando os spins encontram-se paralelos, favorecendo o estado ferromagnético. É importante também observar que a interação de troca depende da superposição

da nuvem eletrônica de átomos vizinhos, caindo rapidamente com o aumento da separação entre os átomos. A interação de troca, portanto, torna-se apreciável somente entre átomos vizinhos.

O segundo termo da Eq.(1.1) representa a anisotropia de troca, do tipo eixo fácil, enquanto o terceiro termo é a anisotropia cristalina, do tipo plano fácil. A anisotropia de troca advém da interação spin-órbita, isto é, da interação entre o momento de dipólo magnético do spin eletrônico e o campo magnético interno do átomo, em consequência do momento angular orbital dos elétrons. A anisotropia cristalina, por sua vez, é gerada pelo campo elétrico dos íons vizinhos a um dado sítio na rede cristalina.

Muita pesquisa já foi realizada no modelo de Heisenberg em duas e três dimensões, submetido a uma anisotropia de troca ($D = 0$) ou a uma anisotropia cristalina ($A = 0$). Veja, por exemplo, as Refs. [5, 6, 7, 8, 9]. Entretanto, até onde sabemos, muito menos se sabe a respeito desse modelo quando submetido simultaneamente a ambas. Consideraremos em nosso trabalho a *competição* entre as anisotropias de troca e cristalina. Esse modelo já foi estudado em duas dimensões [10], mas seu diagrama de fases não foi determinado. Investigamos em nosso trabalho o modelo em três dimensões, determinando o seu diagrama de fases. Vale observar que, na ausência dessas anisotropias ($A = D = 0$), o modelo de Heisenberg bidimensional não apresenta transição de fases a temperaturas finitas. É a quebra de simetria induzida por elas que leva ao aparecimento das transições. Por outro lado, o modelo isotrópico apresenta uma transição de segunda ordem em três dimensões à temperatura crítica $T_c = 1,442929(77)$ (para uma rede cúbica simples) [11]. No caso do hamiltoniano dado pela Eq.(1.1), a quebra de simetria induzida pelas anisotropias resulta em um diagrama de fases mais rico, com o aparecimento de linhas de transição de primeira e segunda ordens.

1.2 O modelo vetorial XY de Blume-Emery-Griffiths

A natureza das transições de fases no hélio superfluido tem sido há muito um tema de extensas investigações. Isto se deve especialmente às suas características não-usuais, que permitem que essas transições sejam estudadas com grande resolução e sem complexidades que surgem devido a impurezas e imperfeições cristalinas. Uma limitação residual era a gravidade. Porém, com a realização de experimentos em condições de microgravidade, novos resultados foram obtidos com incomparável resolução [12].

Há muito se admite que o modelo XY do magnetismo pertença à mesma classe de universalidade do ${}^4\text{He}$ líquido e que, portanto, seja adequado para o estudo das transição de fases superfluida [13]. Recentemente, surgiu um grande interesse no estudo das propriedades dinâmicas do modelo XY no volume e também em geometrias confinadas, como filmes finos. Por exemplo, estudando-se as propriedades de transporte do modelo na vizinhança da criticidade, é possível relacioná-las à condutividade térmica do ${}^4\text{He}$ superfluido, que é uma grandeza experimentalmente mensurável [14, 15].

Um outro sistema de interesse são as misturas de ${}^3\text{He}$ - ${}^4\text{He}$, onde átomos de ${}^3\text{He}$ comportam-se como impurezas, que reduzem a temperatura da transição superfluida e induzem a separação de fases no sistema [16, 17]. Em 1971, Blume, Emery e Griffiths [18] propuseram um modelo de spins discretos capaz de reproduzir a topologia básica do diagrama de fases de misturas de ${}^3\text{He}$ - ${}^4\text{He}$, embora ele apresentasse certas características não físicas, como não considerar a simetria rotacional do parâmetro de ordem do hélio superfluido (a função de onda associada à superfluidez). O modelo foi resolvido pela aproximação de campo médio e, para uma faixa de valores dos parâmetros do hamiltoniano, reproduziu qualitativamente o diagrama de fases experimental, apresentando, inclusive, um ponto tricrítico, como esperado. Berker e Nelson [19] e, independentemente, Cardy e Scalapino [20] propuseram um modelo baseado no rotor planar para descrever o comporta-

mento de filmes de misturas de ${}^3\text{He}$ - ${}^4\text{He}$, conhecido como o modelo vetorial de Blume-Emery-Griffiths. O diagrama de fases desse modelo foi investigado em duas dimensões e não se encontrou o ponto tricrítico para nenhum valor dos parâmetros do modelo. Recentemente, Maciolek e colaboradores [21] estudaram o diagrama de fases da versão rotor planar do modelo vetorial de Blume-Emery-Griffiths em três dimensões pela aproximação de campo médio e simulações Monte Carlo. Entretanto, esse modelo não possui dinâmica intrínseca de spin e é, portanto, inadequado para trabalhos futuros a respeito das propriedades dinâmicas do sistema. Dessa forma, estudamos uma versão alternativa do modelo vetorial de Blume-Emery-Griffiths, baseada no modelo XY, que nos permitirá estudos futuros de dinâmica.

O sistema focado é uma rede cúbica simples onde os sítios são ocupados por partículas magnéticas ou não-magnéticas. As partículas magnéticas (de spin clássico) representam átomos de ${}^4\text{He}$, enquanto os átomos de ${}^3\text{He}$ são representados por partículas não-magnéticas*. O spin representa o grau de liberdade associado à superfluidez e, como somente o ${}^4\text{He}$ pode ser superfluido nesse modelo, os átomos de ${}^3\text{He}$ não possuem spin.

O hamiltoniano do modelo é dado por:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} [S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y] - K \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^z S_j^z + \Delta \sum_{i=1}^N (S_i^z)^2, \quad (1.2)$$

onde \vec{S} representa um spin clássico em três dimensões, de modo que $|\vec{S}| = 1$ para átomos de ${}^4\text{He}$ e $|\vec{S}| = 0$ para átomos de ${}^3\text{He}$. As duas primeiras somas são realizadas sobre os pares de primeiros vizinhos $\langle i, j \rangle$ e a última é feita sobre todos os sítios i de uma rede de N spins. Em nosso estudo faremos, sem perda de generalidade, $J = 1$. O parâmetro de ordem para o sistema estudado é a magnetização por sítio no plano (m_{xy})

*Usaremos, de agora em diante, de maneira equivalente, os termos ‘partícula magnética’ e ‘átomo de ${}^4\text{He}$ ’ e, da mesma forma, ‘partícula não-magnética’ e ‘átomo de ${}^3\text{He}$ ’.

$$m_{xy} = \frac{1}{N} \sqrt{\left[\left(\sum_{i=1}^N S_i^x \right)^2 + \left(\sum_{i=1}^N S_i^y \right)^2 \right]}, \quad (1.3)$$

Outro parâmetro relevante para o modelamento de misturas de ${}^3\text{He}$ - ${}^4\text{He}$ é a concentração de partículas não-magnéticas (átomos de ${}^3\text{He}$)

$$x_3 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N [1 - S_i^2]. \quad (1.4)$$

O primeiro termo do hamiltoniano é responsável pela ordem de longo alcance entre os spins, o que corresponde à superfluidadez no modelo. O segundo termo advém de um potencial fenomenológico para o modelamento da interação química entre pares de átomos dos dois diferentes isótopos de hélio. O parâmetro Δ é essencialmente a diferença $\mu_3 - \mu_4$ associada às espécies ${}^3\text{He}$ e ${}^4\text{He}$ respectivamente. Mais detalhes sobre o modelo podem ser encontradas em [18, 21].

Capítulo 2

Fundamentos teóricos

Apresentamos aqui uma breve discussão sobre os aspectos fundamentais das transições de fases e fenômenos críticos. Introduzimos o conceito de expoentes críticos e a definição daqueles utilizados em nosso trabalho. Revisamos também, de maneira sucinta, a teoria fenomenológica de Landau, a hipótese de homogeneidade de Widom e a hipótese de escala de tamanho finito de Fisher.

2.1 Transições de fases e expoentes críticos

Como já observamos na introdução, transições de fases desempenham um papel muito importante no Universo e na Física em particular. Assim, muito trabalho foi, e ainda é, dedicado a essa área no intuito de aprofundar a compreensão desses fenômenos.

As transições de fases podem ser classificadas de acordo com o critério proposto por Ehrenfest, estendido posteriormente por Fisher (veja, por exemplo, Stanley [22]). Transições de primeira ordem são caracterizadas pela descontinuidade da primeira derivada da energia livre apropriada ao sistema em estudo. Isto equivale a dizer que grandezas mensuráveis como a magnetização, a entropia e a energia interna do sistema apresentam um salto no ponto em que ocorre a transição de primeira ordem. Esse salto em energia

ocorre devido ao *calor latente*, relacionado ao rearranjo na estrutura do material. Na água, por exemplo, o calor latente é a energia liberada quando a água passa da fase líquida (desordenada) para a fase sólida (de estrutura cristalina).

Transições contínuas ou de segunda ordem apresentam a primeira derivada da energia livre contínua, enquanto sua segunda derivada é infinita ou descontínua. Esse fato se reflete na divergência ou na descontinuidade de grandezas como o calor específico e a susceptibilidade de um material magnético. Grandezas como a energia e a magnetização são, nesse caso, contínuas.

Transições de segunda ordem ocorrem, por exemplo, no hélio líquido e em diversos materiais magnéticos, como o ferro. A temperaturas abaixo da chamada *temperatura crítica* T_c , o ferro é um material ferromagnético, mas quando a temperatura crítica é atingida (1043 K), o ferro torna-se paramagnético, isto é, perde sua magnetização espontânea.

No ponto crítico, várias grandezas termodinâmicas apresentam comportamento peculiar. Uma delas é o chamado *parâmetro de ordem*, introduzido por Lev Landau, sendo não-nulo abaixo da temperatura crítica e anulando-se continuamente quando $T \rightarrow T_c$. Outras grandezas, como o calor específico e a susceptibilidade magnética, divergem, como já dissemos. O estudo do comportamento de sistemas quando a temperatura T tende à temperatura crítica T_c , com o determinação de seu comportamento na vizinhança da criticalidade é um dos objetos primordiais de investigação no estudo de fenômenos críticos. Observações experimentais, resultados obtidos para certos modelos com solução analítica, e o grupo de renormalização mostram que, quando $T \rightarrow T_c$, esse comportamento pode ser descrito por leis de potência simples, caracterizadas pelos chamados *expoentes críticos*. Por exemplo, para um sistema magnético, que é o objeto de nosso estudo, o parâmetro de ordem m , a susceptibilidade magnética χ , o calor específico c_v e o comprimento de correlação ξ comportam-se, respectivamente, como [3]

$$m = m_0 |t|^\beta, \quad (2.1)$$

$$\chi = \chi_0 |t|^{-\gamma}, \quad (2.2)$$

$$c_v = c_0 |t|^{-\alpha}, \quad (2.3)$$

$$\xi = \xi_0 |t|^{-\nu}, \quad (2.4)$$

onde t é a temperatura reduzida, definida por $t = [T - T_c]/T_c$ e m_0 , χ_0 , c_0 e ξ_0 são constantes.

Um fato muito interessante, e de fundamental importância, é que sistemas distintos apresentam os mesmos valores para os expoentes críticos, definindo então as chamadas *classes de universalidade*. Sistemas pertencentes à mesma classe de universalidade apresentam, além dos mesmos expoentes críticos, *funções universais*, isto é, funções, para diferentes sistemas, que podem ser superpostas por um simples reescalamento de variáveis. Esse fato foi relatado pela primeira vez por Guggenheim, que observou que as curvas de coexistência para diferentes fluidos recaem na mesma função universal quando a temperatura e a densidade são escaladas por seus respectivos valores críticos T_c e ρ_c [22]. Nesse trabalho, encontraremos uma outra função universal muito importante: a *distribuição de probabilidades do parâmetro de ordem*, que será apresentada mais adiante, no Cap. 3.

2.2 A Teoria de Landau

Uma das teorias mais simples, e que serve de base para a análise de resultados experimentais e de simulações, é a *Teoria de Landau* [22], que se fundamenta na suposição de que a energia livre F de um sistema possa ser expandida em uma série de potências do parâmetro de ordem na vizinhança do ponto crítico. Dessa forma, para um sistema magnético, por exemplo, expandindo a energia livre $F(m, T)$ em torno de $T = T_c$, temos

$$F = F_0 + F_2 m^2 + F_4 m^4 + \dots, \quad (2.5)$$

onde m é o parâmetro de ordem. Essa equação está sob a forma de uma expansão em série de Taylor, onde, por argumentos de simetria para $H = 0$, todos os termos de potências ímpares foram eliminados (para outros sistemas, a forma dessa expansão pode ser mais complexa, sendo necessário,

por exemplo, manter-se termos de potências ímpares; nessa breve discussão, entretanto, nos limitaremos a esse caso mais simples).

A partir de argumentos físicos relacionados à energia livre e às grandezas termodinâmicas dela derivadas, podemos determinar a forma dos coeficientes F_i na Eq.(2.5) e até mesmo prever valores para os expoentes críticos. Essas previsões, entretanto, não estão, de modo geral, de acordo com os resultados experimentais e de simulações. A falha da teoria de Landau como teoria geral para os fenômenos críticos ocorre porque a expansão da Eq.(2.5) supõe que a energia livre seja uma função analítica em T , m e nos demais parâmetros relevantes. Isto, entretanto, não se verifica, pois existem derivadas de F nesses parâmetros que, de modo geral, divergem em $T = T_c$ (pois relacionam-se a grandezas como o calor específico e a susceptibilidade do sistema, que geralmente são infinitas em T_c).

É importante observar, entretanto, que, caso as flutuações locais do sistema em estudo tornem-se desprezíveis, espera-se que a teoria de Landau seja válida, de acordo com o critério de Ginzburg (veja, por exemplo, Landau e Binder [3]). Dessa forma, pode-se mostrar que, para pontos críticos, a teoria de Landau (ou de campo médio) se aplica para redes de dimensão quatro ou acima. Nesse caso, diz-se então que $d_{>} = 4$ é a chamada *dimensão crítica superior* para a criticalidade.

Para pontos tricríticos, por outro lado, os expoentes críticos previstos pela teoria de Landau são diferentes dos obtidos para o ponto crítico, o que implica, nesse caso, em $d_{>} = 3$ [3, 23].

2.3 A hipótese de escala

Na década de 60, Widom [24] formulou uma hipótese de escala, que propõe uma forma geral para os potenciais termodinâmicos, sem se preocupar em determinar valores específicos para os expoentes críticos. Widom propôs que o potencial de Gibbs (ou equivalentemente qualquer outro potencial, como o de Helmholtz) seja dado por uma parte regular $G_0(t, H)$ e outra parte

singular $G(t, H)$, sendo que essa última apresenta todas as singularidades associadas ao estudo das transições de fases. Aqui, as variáveis envolvidas são a temperatura reduzida $t = (T - T_c)/T_c$ e, no caso de sistemas magnéticos, o campo magnético externo H (para fluidos, H é substituído pela pressão p ou pelo potencial químico μ).

A proposição fundamental da teoria de Widom é que a parte singular do potencial de Gibbs seja uma função homogênea generalizada das variáveis t e H , tal que

$$G(\lambda^{a_t} t, \lambda^{a_H} H) = \lambda G(t, H), \quad (2.6)$$

para qualquer valor do parâmetro λ . A hipótese de escala não fixa os valores dos parâmetros a_t e a_H . Como os expoentes críticos podem ser expressos em termos desses dois parâmetros, isto equivale a dizer que a teoria de Widom não determina o valor dos expoentes críticos. Por outro lado, como todos os expoentes críticos são dados em função apenas desses dois parâmetros de escala, temos que os expoentes críticos não são todos independentes, mas basta conhecermos dois deles e todos os outros estarão automaticamente determinados. De fato, a hipótese de escala fornece todas as desigualdades termodinâmicas, porém expressas sob a forma de igualdades, o que tem sido amplamente confirmado teórica e experimentalmente.

2.4 A Hipótese de Escala de Tamanho Finito

A teoria de escala apresentada acima fundamenta-se na hipótese de o sistema encontrar-se no *limite termodinâmico*, onde o número N de partículas e o volume V do sistema vão a infinito, com uma densidade N/V constante. Essa condição, entretanto, não é satisfeita para os sistemas estudados nem em experimentos e muito menos em simulações computacionais. Em 1971, Fisher [25] propôs uma hipótese de escala que considera também o tamanho do sistema. Uma boa discussão sobre esse tema é também apresentada, de maneira sucinta, em Castro [26].

Consideremos uma quantidade termodinâmica \mathcal{Q} (como o calor específico

de um fluido ou a susceptibilidade de um sistema magnético). No limite termodinâmico, a definição dos expoentes críticos determina como \mathcal{Q} diverge quando a temperatura tende para a temperatura crítica

$$\mathcal{Q}_\infty(t) \sim t^{-\aleph} \quad (2.7)$$

quando $t \rightarrow 0^+$. Como já definido na seção anterior, $t = [T - T_c]/T_c$, T é a temperatura do sistema e T_c , a temperatura crítica no limite termodinâmico. O expoente \aleph corresponde, nesse contexto, ao expoente crítico associado à grandeza física de interesse (por exemplo, o expoente γ para a susceptibilidade magnética). Relação similar é definida para o comprimento de correlação do sistema infinito

$$\xi_\infty(t) \sim t^{-\nu}. \quad (2.8)$$

Em sistemas finitos, no entanto, o comprimento de correlação é limitado pelo tamanho L do sistema, o que gera, na vizinhança da temperatura crítica, um arredondamento do pico da grandeza \mathcal{Q} (em outras palavras, \mathcal{Q} não diverge nesse caso). A premissa básica da hipótese de Fisher é supor que a única variável importante que afeta o truncamento das grandezas termodinâmicas em tamanhos finitos é a razão $L/\xi_\infty(t)$. Assim, para o caso em que $L \gg \xi_\infty(t)$, não se espera qualquer efeito de tamanho finito significativo (o sistema comporta-se como no limite termodinâmico). Entretanto, se $L \ll \xi_\infty(t)$, os efeitos de tamanho finito manifestam-se nas grandezas termodinâmicas, como reflexo da limitação do alcance das correlações. Assim, para L finito, podemos escrever

$$\frac{\mathcal{Q}_L(t)}{\mathcal{Q}_\infty(t)} = f(L/\xi_\infty(T)) \quad (2.9)$$

Essa relação constitui a hipótese de escala de tamanho finito, onde $\mathcal{Q}_L(t)$ representa a grandeza física considerada no sistema finito e, $\mathcal{Q}_\infty(t)$, no limite termodinâmico.

A função $f(x)$ deve apresentar um comportamento determinado pelo limite considerado. Assim, para $t \ll 1$, fixo, e $L \rightarrow \infty$, $\mathcal{Q}_L \rightarrow \mathcal{Q}_\infty$, e temos

$$\lim_{x \rightarrow \infty} f(x) = 1. \quad (2.10)$$

Por outro lado, para $t \rightarrow 0$, no limite de L grande, finito, não há transição de fases. Dessa forma, $\mathcal{Q}_L(t)$ deve permanecer finita em T_c . Uma maneira simples de garantir isto é fazer uso do fato de que $x = L/\xi_\infty(t) \rightarrow 0$. Suponhamos, então, que $f(x) \sim x^{\mathfrak{S}}$, onde \mathfrak{S} controla a ‘velocidade’ com que a função vai a zero, de modo a manter $\mathcal{Q}_L(t)$ finito. Utilizando as Eqs.(2.7) e (2.8), podemos escrever

$$\mathcal{Q}_L(t) \sim t^{-\aleph} \frac{L^{\mathfrak{S}}}{\xi_\infty^{\mathfrak{S}}} \sim t^{-\aleph} t^{\mathfrak{S}\nu} L^{\mathfrak{S}} \sim t^{-\aleph + \mathfrak{S}\nu} L^{\mathfrak{S}}. \quad (2.11)$$

Para que \mathcal{Q}_L seja finito, temos que $\aleph = \mathfrak{S}\nu$, o que resulta finalmente em

$$\mathcal{Q}_L(t) \sim L^{\aleph/\nu}. \quad (2.12)$$

Uma forma equivalente à Eq.(2.9), postulada por Fisher, é

$$\mathcal{Q}_L(t) = L^{\aleph/\nu} g(L^y t), \quad (2.13)$$

onde y será determinado a seguir.

Para $t \rightarrow 0$ e L grande, mas finito, temos que $g(0) = \text{constante}$, o que reproduz o resultado já obtido na Eq.(2.12).

Por outro lado, para $t \ll 1$, fixo, e $L \rightarrow \infty$, \mathcal{Q}_L deve permanecer finita. Suponhamos, então, que $g(L^y t) \sim [L^y t]^\omega$. Assim, temos

$$\mathcal{Q}_L(t) \sim L^{\aleph/\nu} L^{y\omega} t^\omega. \quad (2.14)$$

A condição de que $\mathcal{Q}_L(t)$ deva ser finita implica em $\aleph/\nu + y\omega = 0$, donde $\omega = -\aleph/y\nu$. Assim,

$$\mathcal{Q}_L(t) \sim t^\omega. \quad (2.15)$$

Comparando essa equação com a Eq.(2.7), temos que $\omega = -\aleph$, o que implica em $y = 1/\nu$. Finalmente, podemos reescrever a hipótese de escala de tamanho finito como

$$\mathcal{Q}_L(t) = L^{\aleph/\nu} g(L^{1/\nu} t). \quad (2.16)$$

Uma generalização da hipótese de escala da Eq.(2.16) para sistemas na presença de um campo magnético externo H é dada por

$$\mathcal{Q}(t, H, L) = l^{\aleph/\nu} g(l^{1/\nu} t, l^y H, l^{-1} L), \quad (2.17)$$

onde o comprimento L do sistema é interpretado como uma variável e l é um fator qualquer de escala.

Capítulo 3

Métodos Simulacionais e de Análise de Dados

Para estudar os dois modelos propostos nesse trabalho, introduzidos no capítulo anterior - o modelo de Heisenberg anisotrópico submetido a um campo cristalino e a versão XY do modelo vetorial de Blume-Emery-Griffiths - empregamos o Método Monte Carlo, utilizando diversos algoritmos, apresentados a seguir. Discutiremos também o método do histograma, a mistura de campos e a distribuição universal de probabilidades do parâmetro de ordem, técnicas importantes para a análise dos dados obtidos através das simulações.

3.1 Algoritmos utilizados

3.1.1 Para o modelo de Heisenberg anisotrópico submetido a um campo cristalino

Nesse caso, para o estudo do modelo definido pelo hamiltoniano

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - A \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^z S_j^z + D \sum_{i=1}^N (S_i^z)^2, \quad (3.1)$$

introduzido no Cap. 1, o método de simulação empregado foi o algoritmo de Metropolis, o primeiro e mais freqüentemente utilizado em simulações Monte

Carlo. Por esse método, uma nova configuração α' do sistema (no nosso caso, uma rede cúbica de spins) é obtida a partir de uma configuração α anterior, de acordo com a probabilidade

$$\begin{aligned} P(\alpha \rightarrow \alpha') &= \exp(-\beta\Delta E), & \Delta E > 0 \\ &= 1, & \Delta E \leq 0, \end{aligned} \quad (3.2)$$

onde $\beta = 1/k_B T$, k_B é a constante de Boltzmann, T é a temperatura do sistema e $\Delta E = E_{\alpha'} - E_{\alpha}$, a diferença entre as energias das configurações inicial e final. Assim o algoritmo é implementado da seguinte forma:

1. Escolha um estado inicial (todos os spins alinhados ou uma configuração aleatória, por exemplo);
2. Escolha um sítio da rede (aleatoriamente, no nosso caso);
3. Sorteie uma nova orientação para o spin selecionado;
4. Calcule a variação ΔE em energia que ocorrerá caso a nova configuração seja aceita;
5. Se $\Delta E \leq 0$, aceite a nova configuração e repita o procedimento a partir de (2);
Se $\Delta E > 0$:
6. Gere um número aleatório a tal que $0 < a < 1$;
7. Se $a \leq \exp(-\beta\Delta E)$, aceite a nova configuração. Se $a > \exp(-\beta\Delta E)$, mantenha configuração anterior;
8. Escolha um novo sítio e repita o procedimento a partir de (3).

Como os sistemas que estudamos são compostos por spins contínuos em três dimensões, a escolha de uma nova orientação para um dado spin (passo 3) é feita selecionando-se uma nova direção na esfera unitária, segundo a prescrição de Marsaglia [3, 27]. Esta é uma forma eficiente de se gerar uniformemente um ponto sobre a superfície da esfera unitária. Para isto, gera-se

a componente z desse ponto, sorteando-se um número aleatório no intervalo $(-1, 1)$. O plano paralelo ao plano coordenado xy que contém z intercepta a esfera definindo uma circunferência de raio $(1 - z^2)^{1/2}$. Basta agora selecionar aleatoriamente um ponto qualquer sobre essa circunferência. Dessa forma, podemos escolher aleatoriamente, de maneira uniforme, um ponto sobre a superfície da esfera unitária. O algoritmo para a implementação da prescrição de Marsaglia pode ser descrito da seguinte maneira:

1. Escolha dois números aleatórios independentes, r_1 e r_2 a partir de uma distribuição aleatória no intervalo $(0, 1)$, de modo a gerar um vetor bidimensional de componentes $V_1 = 1 - 2r_1$ e $V_2 = 1 - 2r_2$;
2. Se $S = V_1^2 + V_2^2 < 1$, o ponto sobre a esfera unitária é então dado por $(2V_1(1 - S)^{1/2}, 2V_2(1 - S)^{1/2}, 1 - 2S)$.

3.1.2 Para o modelo vetorial de Blume-Emery-Griffiths

Para explorar eficientemente o espaço de configurações do modelo, definido pelo hamiltoniano (veja Cap. 1)

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} [S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y] - K \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^z S_j^z + \Delta \sum_i (S_i^z)^2, \quad (3.3)$$

empregamos quatro algoritmos diferentes. O algoritmo de gás de rede (i) possibilita a análise da separação de fases em nosso modelo, enquanto a reorientação de spins (ii) está relacionada à ordem de longo alcance dos spins da rede. Para reduzir o efeito da *dinâmica de relaxação crítica* [3], utilizamos também uma versão do algoritmo de Wolff (iii) [4, 28] e da super-relaxação (iv) [29, 30], adaptadas ao modelo XY . Cada algoritmo é executado varrendo-se toda a rede e cada um deles, (ii), (iii) ou (iv), é precedido por um passo do algoritmo de gás de rede.

Os algoritmos (ii)-(iv), cada um deles precedido pelo algoritmo (i), foram combinados utilizando-se um método Monte Carlo híbrido [31], o que reduz de maneira muito eficiente as correlações entre configurações sucessivas de

Monte Carlo, assim como os erros estatísticos das médias realizadas para o cálculo das várias quantidades termodinâmicas do sistema. Descreveremos a seguir, de maneira sucinta, a implementação de cada um dos algoritmos utilizados.

Algoritmo de gás de rede

Esse algoritmo é um procedimento simples utilizado para produzir um gás de rede que seja uma mistura de partículas de 3He e 4He , inserindo partículas magnéticas (spin clássico unitário, representado o 4He) ou não-magnéticas (de spin nulo, representando o 3He). Esse algoritmo é implementado selecionando-se aleatoriamente um sítio na rede e tentando-se inserir uma partícula magnética em um sítio onde uma partícula não-magnética esteja localizada e vice-versa. Qualquer partícula magnética inserida por esse procedimento apresenta spin de orientação aleatória, definida pela prescrição de Marsaglia (como utilizada no algoritmo de Metropolis, discutido acima.) A probabilidade de aceitação é definida pelo chamado banho térmico local [21]

$$P(\Delta E) = \frac{1}{\exp(\Delta E/k_B T) + 1}, \quad (3.4)$$

onde ΔE é a variação da energia gerada pela nova configuração proposta, k_B é a constante de Boltzmann (considerada 1 em nosso trabalho) e T é a temperatura do sistema.

Reorientação de spins

O próximo passo na simulação de misturas de 3He - 4He é a reorientação dos spins das partículas magnéticas da rede. Esse procedimento é executado da mesma maneira já descrita para o algoritmo de Metropolis, mas com a probabilidade de aceitação de uma nova orientação para o spin considerado dada também pelo banho térmico local, descrito pela Eq.(3.4).

O Algoritmo de Wolff

Na criticalidade, o comprimento de correlação ξ do sistema em estudo diverge. O mesmo acontece ao tempo de correlação τ

$$\tau \sim \xi^z, \quad (3.5)$$

onde z é o chamado expoente crítico dinâmico, que mede o grau de divergência do tempo de correlação na criticalidade. O tempo de correlação mede o quão correlacionadas estão duas configurações separadas por um dado número de passos de Monte Carlo. Em sistemas finitos, o comprimento de correlação é limitado ao tamanho L do sistema, de modo que

$$\tau \sim L^z. \quad (3.6)$$

Dessa forma, vemos que o estudo de sistemas na vizinhança do ponto crítico apresenta uma dificuldade relacionada à obtenção de configurações estatisticamente independentes (ou seja, fracamente correlacionadas). Esse efeito é a chamada ‘dinâmica lenta crítica’ (‘critical slowing down’).

O algoritmo de Metropolis sofre fortemente esse efeito, pois, na criticalidade, há a formação de grandes aglomerados de spins alinhados, altamente correlacionados. É muito difícil para o algoritmo mudar a orientação dos spins pertencentes a esses aglomerados, pois ele tem de fazê-lo spin por spin, e cada nova configuração tentada tem uma grande probabilidade de ser rejeitada, já que o custo energético para desalinhar os spins nesse caso é de modo geral alto. A chance de se alterar a orientação dos spins na fronteira da ilha é maior, pois o custo energético para fazê-lo é menor e, de fato, esse é o processo dominante no algoritmo de Metropolis quando se trata da reorientação de aglomerados de spins. Esse processo, entretanto, ocorre de uma maneira lenta e uma nova solução foi proposta por Swendsen e Wang em 1987 [32] e posteriormente aperfeiçoada por Ulli Wolff em 1989.

O algoritmo de Wolff baseia-se em identificar grandes aglomerados de spins de mesma orientação e reorientá-los todos, como um único bloco, de uma só vez. Como uma grande fração de spins é reorientada de uma só vez,

isto reduz de maneira muito eficiente a correlação entre sucessivas configurações durante simulações de Monte Carlo.

O algoritmo de Wolff para spins contínuos é implementado, no presente modelo, através dos seguintes passos:

1. Sorteie um spin da rede (que será a semente do aglomerado que será criada);
2. Selecione um vetor unitário \hat{n} aleatório no plano x - y ;
3. Examine cada um dos vizinhos do spin selecionado, projetando-os sobre o vetor aleatório. Se essa projeção tiver o mesmo sentido daquela obtida para o spin inicial selecionado, incorpore o novo spin ao aglomerado, com probabilidade $P_{ad} = 1 - \exp[-2\beta(\hat{n} \cdot \vec{S}_i)(\hat{n} \cdot \vec{S}_j)]$;
4. Para cada spin incorporado na etapa anterior, examine também os respectivos vizinhos e os adicione ao aglomerado com a probabilidade P_{ad} (vale observar que à medida que o aglomerado cresce, alguns vizinhos a ser examinados podem já ter sido incorporados; nesse caso, não há, claro, que se considerá-los novamente. Por outro lado, spins que tenham sido considerados para incorporação anterior e que tenham sido rejeitados podem vir a ser aceitos num exame posterior). Este passo deve ser repetido quantas vezes forem necessárias, até que não haja mais spins pertencentes ao aglomerado cujos vizinhos não tenham sido examinados para uma possível incorporação;
5. Reoriente o aglomerado, fazendo a reflexão especular de cada spin incorporado em relação ao plano perpendicular ao vetor aleatório \hat{n} ;

Essa é uma versão do algoritmo de Wolff adaptada para o modelo XY [14]. Para obedecer à condição do balanço detalhado, a componente z dos spins é mantida inalterada.

Sabe-se que o gerador de números pseudoaleatórios deve ser escolhido com cuidado, especialmente para o algoritmo de Wolff [33]. Plascak e colaboradores [31], tendo realizado testes com diversos geradores de números

aleatórios, selecionaram a rotina RAN2 para utilização com o algoritmo de Wolff. Dessa forma, utilizaremos também essa rotina geradora de números aleatórios, descrita no ‘Numerical Recipes in Fortran’ [34].

Super-relaxação

Um outro método eficiente para reduzir a correlação entre sucessivas configurações em simulações de Monte Carlo é a super-relaxação. Para discuti-lo, consideremos o modelo de Heisenberg isotrópico

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i, j \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j, \quad (3.7)$$

onde \vec{S} é um spin clássico tridimensional e $\langle i, j \rangle$ representa soma entre primeiros vizinhos. A energia de determinado sítio k pode ser escrita

$$\mathcal{H}_k = -J \times \vec{S}_k \cdot \sum_{\langle k, j \rangle} \vec{S}_j, \quad (3.8)$$

onde $\langle k, j \rangle$ representa a soma sobre todos os vizinhos do sítio k em questão. Essa soma pode ser interpretada como o campo de interação efetivo \mathcal{H}_{ef} que age sobre o spin \vec{S}_k

$$\mathcal{H}_k = -J \times \vec{S}_k \cdot \mathcal{H}_{ef}. \quad (3.9)$$

Como a energia do sítio k é dada por um produto escalar, uma rotação do spin \vec{S}_k em torno do campo efetivo \mathcal{H}_{ef} altera a configuração da rede, mas conserva a energia do sistema. Esse é o mecanismo envolvido na super-relaxação. O ângulo de rotação comumente utilizado é π rad e este é o valor que utilizamos em nosso trabalho. Como a energia é constante, a nova configuração é sempre aceita (pois, de acordo com a prescrição de Metropolis, se $\Delta E = 0$, a probabilidade de aceitação é 1), o que afasta o sistema da configuração inicial sem o pênalti de energia $\exp(-\Delta E)$ característico do algoritmo de Metropolis. Assim, a implementação do método de super-relaxação é bem simples. Basta percorrer os sítios da rede, determinar o campo efetivo para o spin considerado e trocar o sinal da componente desse spin perpendicular ao campo efetivo (o que equivale a uma rotação de π).

No nosso caso, entretanto, empregamos esse algoritmo para o modelo vetorial de Blume-Emery-Griffiths, versão XY, definido pelo hamiltoniano dado pela Eq.(3.3). É importante observar agora que, no termo de interação de troca, somente entram as componentes *planares* dos vetores de spin. Em consequência disto, a rotação efetuada deve manter inalterada a componente z (fora do plano) dos spins, de modo a conservar a energia da configuração. Isto é conseguido rodando-se somente a componente planar do spin considerado em torno da componente planar do campo efetivo.

Um breve comentário sobre ergodicidade

As rotinas de Wolff e super-relaxação são ambas não ergódicas. O algoritmo de Wolff mantém inalterada a componente z dos spins da rede, enquanto a super-relaxação só leva o sistema a visitar estados de uma determinada energia. Mais ainda, esses algoritmos só atuam sobre as partículas magnéticas, de modo que conduzem o sistema por estados confinados ao subespaço do espaço de configurações vinculado a uma determinada configuração fixa de partículas não-magnéticas, determinada pelo algoritmo de gás de rede. Esse mesmo confinamento ocorre para o algoritmo de reorientação de spins. Entretanto, a ergodicidade do algoritmo híbrido é garantida, pois, enquanto o algoritmo de gás de rede percorre todas as configurações possíveis de partículas magnéticas e não-magnéticas, a rotina de reorientação de spins é capaz de alterar a componente z dos spins da rede, bem como a energia do sistema.

3.2 Métodos de análise

3.2.1 O Método do histograma

Uma das principais técnicas de análise utilizada no tratamento dos dados das simulações Monte Carlo realizadas é o *método do histograma* [3, 4, 35], um método extremamente eficiente e elegante, que permite a obtenção de propriedades estáticas como a temperatura crítica, com grande precisão e

economia de tempo.

A eficiência do método baseia-se na obtenção de mais informações sobre o sistema em estudo, com base nos dados gerados em uma única simulação. Assim, a partir dos dados gerados em uma simulação Monte Carlo em uma dada temperatura T_0 , é possível determinar as propriedades do sistema simulado em uma faixa de temperaturas em torno de T_0 .

Para compreender, em linhas gerais, o método, consideremos uma simulação Monte Carlo de um sistema qualquer (o modelo de Ising, por exemplo), realizada a uma dada temperatura fixa T_0 . Essa simulação gera configurações de acordo com a distribuição canônica de probabilidades

$$P_{\beta_0}(X) = \frac{1}{Z(\beta_0)} \exp[-\beta_0 \mathcal{H}(X)],$$

$$Z_{\beta_0} = \sum_{\{X\}} \exp[-\beta_0 \mathcal{H}(X)], \quad (3.10)$$

onde X representa uma dada configuração do sistema, $\beta_0 = 1/k_B T_0$, k_B é a constante de Boltzmann, \mathcal{H} é o hamiltoniano do sistema estudado e Z é a função partição.

A distribuição de probabilidades $P_{\beta_0}(X)$ contém toda a informação termodinâmica sobre o sistema. Entretanto, é mais conveniente trabalharmos com uma distribuição equivalente, $P_{\beta_0}(E)$, para o espectro de energias do sistema

$$P_{\beta_0}(E) = \frac{1}{Z(\beta_0)} W(E) \exp[-\beta_0 E], \quad (3.11)$$

onde $W(E)$ é o número de estados com energia E (para um sistema com um espectro contínuo de energias, $W(E)$ torna-se uma densidade de estados de energia entre E e $E + \delta E$, mas para nosso raciocínio aqui, um sistema com um espectro discreto de energias é suficiente para compreensão).

A média térmica de qualquer função de E pode ser calculada a partir da Eq.(3.11)

$$\langle f(E) \rangle_{\beta_0} = \frac{1}{Z(\beta_0)} \sum_E f(E) W(E) \exp[-\beta_0 E]. \quad (3.12)$$

O fundamento para o método vem agora. Como a simulação gera configurações de acordo com a distribuição de probabilidades de equilíbrio, um histograma de energias gerado durante a simulação vai fornecer uma estimativa para a distribuição (3.11), que será mais acurada quanto maior for o número M de passos de Monte Carlo realizados. Assim, podemos escrever

$$\frac{H(E)}{M} = \frac{1}{Z(\beta_0)} W(E) \exp[-\beta_0 E]. \quad (3.13)$$

É importante notar também que, para uma temperatura arbitrária T

$$P_\beta(E) = \frac{1}{Z(\beta)} W(E) \exp[-\beta E]. \quad (3.14)$$

Mas, a partir do histograma de energias obtido da simulação em β_0 , podemos obter uma estimativa para $W(E)$. De fato, invertendo a Eq.(3.13)

$$W(E) = \frac{Z(\beta_0)}{M} H(E) \exp[\beta_0 E]. \quad (3.15)$$

Inserindo essa estimativa para $W(E)$ na Eq.(3.14) e normalizando a distribuição, obtemos finalmente a relação entre a distribuição de probabilidades para β arbitrário e o histograma obtido para β_0

$$P_\beta(E) = \frac{H(E) \exp[-\Delta\beta E]}{\sum_E H(E) \exp[-\Delta\beta E]}, \quad (3.16)$$

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

Assim, podemos calcular a média de qualquer quantidade termodinâmica $f(E)$ à temperatura T

$$\langle f(E) \rangle_\beta = \frac{\sum_E f(E) H(E) \exp[-\Delta\beta E]}{\sum_E H(E) \exp[-\Delta\beta E]}. \quad (3.17)$$

Dessa forma, podemos afirmar que, em essência, o que o método do histograma faz é estimar a distribuição de probabilidades para uma temperatura T a partir da distribuição de probabilidades obtida para uma temperatura T_0 . É preciso ressaltar, no entanto, que, devido ao fato de o número de passos de Monte Carlo ser finito na simulação empregada para obter o histograma, a confiabilidade da estimativa realizada pelo método do histograma é limitada a

uma faixa estreita em torno da temperatura inicial onde a simulação foi realizada. Quando $\Delta\beta$ se torna muito grande, flutuações consideráveis aparecem na distribuição de probabilidades extrapolada. Isto acontece porque, para uma simulação realizada em T_0 , os estados visitados limitam-se a um volume do espaço de fase relativamente restrito. Assim, se quisermos estimar a distribuição de probabilidades além dessa região, a informação disponível sobre esse domínio do espaço de configurações é tão pobre ou inexistente, que a extrapolação resultante torna-se insatisfatória. Na prática, o que fazemos é obter a distribuição de probabilidades estimada e compará-la com a distribuição obtida à temperatura T_0 da simulação. Se a distribuição estimada se afasta demais daquela obtida para T_0 , tornando-se ruidosa, uma nova simulação é realizada, na vizinhança da temperatura que se deseja estudar. A faixa de confiabilidade do método é reduzida com o aumento do tamanho da rede estudada, já que as flutuações diminuem com o aumento de L , ao mesmo tempo em que o próprio espaço de configurações cresce, o que faz com que a fração do volume do espaço de fases coberto numa simulação diminua.

No caso dos modelos estudados em nosso trabalho, o espectro de energias é *contínuo* e, para a construção do histograma, é necessário discretizar a distribuição de probabilidades, escolhendo um passo de discretização adequado. Entretanto, uma alternativa que elimina a necessidade da discretização no cálculo das médias termodinâmicas (Eq. 3.17) é a leitura, linha por linha, de uma tabela de energias e magnetizações (ou outras grandezas $f(E)$ desejadas), armazenada durante a simulação na temperatura T_0 . Esse processo é equivalente a computar-se o somatório da Eq.(3.17) e poupa-nos dos problemas introduzidos pela discretização.

3.2.2 O método do histograma multidimensional

Uma extensão natural do método do histograma, apresentado acima, é o método do histograma multidimensional, muito útil nos casos em que desejamos extrapolar o comportamento de grandezas termodinâmicas não apenas em temperatura, como também em outros parâmetros do hamiltoniano. Por

exemplo, consideremos a versão do modelo vetorial de Blume-Emery-Griffiths que estudamos, expresso pelo hamiltoniano da Eq.(1.2). Esse hamiltoniano apresenta três parâmetros, J , A , D , podendo ser reescrito

$$-\beta\mathcal{H} = K_1S + K_2B - K_3C,$$

onde $S = \sum_{\langle i,j \rangle} [S_i^x S_j^x + S_j^y S_i^y]$, $B = \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^2 S_j^2$ e $C = \sum_i S_i^2$, $K_1 = \beta J$, $K_2 = \beta K$, $K_3 = \beta \Delta$.

Nesse caso, a partir de uma simulação realizada à temperatura T_0 e nos parâmetros K_{10} , K_{20} , K_{30} , podemos obter a distribuição de probabilidades

$$P_{K_{10}, K_{20}, K_{30}}(S, B, C) = \frac{1}{Z(K_{10}, K_{20}, K_{30})} W(S, B, C) \times \exp [K_{10}S + K_{20}B - K_{30}C]. \quad (3.18)$$

De maneira análoga, para uma temperatura extrapolada T e parâmetros extrapolados K_1 , K_2 e K_3 , a distribuição de probabilidades é

$$P_{K_1, K_2, K_3}(S, B, C) = \frac{1}{Z(K_1, K_2, K_3)} W(S, B, C) \exp [K_1S + K_2B - K_3C]. \quad (3.19)$$

Os cálculos seguem de maneira análoga àqueles feitos para o histograma unidimensional. A partir do histograma tridimensional $H(S, B, C)$ obtido a partir da simulação temos

$$P_{K_{10}, K_{20}, K_{30}}(S, B, C) = \frac{H(S, B, C)}{M}. \quad (3.20)$$

Substituindo a Eq.(3.20) na Eq.(3.18), obtemos uma estimativa para $W(S, B, C)$.

Inserindo essa estimativa na Eq.(3.19) e normalizando a distribuição de probabilidades, obtemos finalmente

$$P_{K_1, K_2, K_3}(S, B, C) = \frac{H(S, B, C) \exp [\Delta K_1 S + \Delta K_2 B - \Delta K_3 C]}{\sum_S \sum_B \sum_C H(S, B, C) \exp [\Delta K_1 S + \Delta K_2 B - \Delta K_3 C]} \quad (3.21)$$

de modo que a média estimada para para uma dada temperatura T e nos parâmetros extrapolados K_1 , K_2 e K_3 é dada por

$$\langle f(S, B, C) \rangle = \quad (3.22)$$

$$\frac{\sum_S \sum_B \sum_C f(S, B, C) H(S, B, C) \exp [\Delta K_1 S + \Delta K_2 B - \Delta K_3 C]}{\sum_S \sum_B \sum_C H(S, B, C) \exp [\Delta K_1 S + \Delta K_2 B - \Delta K_3 C]}$$

Como já observado anteriormente, para evitar problemas associados com o processo de discretização, armazenamos durante a simulação uma tabela das componentes de energia S , B , C e da magnetização m da rede e obtemos a média (3.23) lendo, linha por linha, essa tabela.

O método do histograma em sua versão unidimensional (extrapolação apenas em temperatura) foi empregado para ambos os modelos estudados. A versão multidimensional foi utilizada para o modelo vetorial de Blume-Emery-Griffiths.

3.2.3 Análise da distribuição universal de probabilidades para o parâmetro de ordem

O método do histograma das subseções anteriores permite não somente a obtenção das médias de grandezas termodinâmicas, como também suas distribuições de probabilidades. Em particular, a análise da função distribuição do parâmetro de ordem tem se mostrado uma ferramenta poderosa para o estudo de sistemas magnéticos [36, 37, 38], para a transição líquido-gás [39, 40], entre outros. Através de suposições análogas às usuais da teoria de escala finita [25], é possível mostrar que, para tamanhos de rede L suficientemente grandes e $T = T_C$, a distribuição de probabilidades para o parâmetro de ordem m do sistema em estudo é dada por [36]

$$P(m) = bP^*(\tilde{m}),$$

$$\tilde{m} = bm, \tag{3.23}$$

onde $b = b_0 L^{\beta/\nu}$, β e ν são os expoentes críticos usuais, b_0 é uma constante e $P^*(\tilde{m})$ é uma distribuição universal, normalizada e de variância unitária. Sistemas pertencentes à mesma classe de universalidade compartilham a mesma distribuição universal $P^*(\tilde{m})$, e esse fato pode ser usado para caracterizar pontos críticos (ou multicríticos) e identificar classes de universalidade. Na Fig. 3.1, apresentamos $P^*(\tilde{m})$ para o modelo de Ising de spin 1/2, 1 e 3/2. Como a dimensionalidade do sistema, o alcance das interações e a dimensionalidade do parâmetro de ordem são as mesmas nos três casos, a classe de

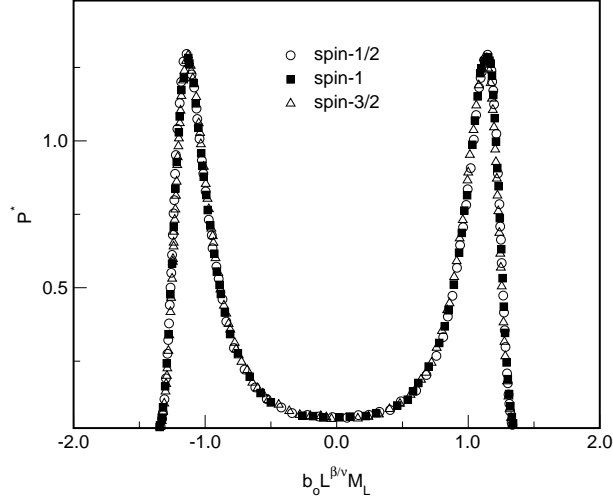


Figura 3.1: Distribuição universal de probabilidades do parâmetro de ordem para os modelos de Ising bidimensional de spin 1/2, spin 1 e spin 3/2 numa rede quadrada de tamanho $L = 32$. As simulações foram realizadas à temperatura crítica T_c exata para o modelo de spin1/2, em $T_c = 1,6935$ para o modelo de spin 1, obtida a partir de expansões em série [41] e simulações Monte Carlo [31] e em $T_c = 3,28794$ para o modelo de spin 3/2 [31]. As barras de erro são menores que os símbolos. Resultados obtidos por Plascak e colaboradores [31]

universalidade é a mesma, o que é evidenciado pelo colapso das funções de probabilidade.

Para o cálculo da variância da distribuição $P(m)$, temos

$$\begin{aligned} \langle m \rangle &= \int m P(m) dm = \int b P^*(\tilde{m}) m dm = \frac{1}{b} \int \tilde{m} P^*(\tilde{m}) d\tilde{m} = \frac{1}{b} \langle \tilde{m} \rangle \\ \langle m^2 \rangle &= \int m^2 P(m) dm = \int b P^*(\tilde{m}) m^2 dm = \frac{1}{b^2} \int \tilde{m}^2 P^*(\tilde{m}) d\tilde{m} = \frac{1}{b^2} \langle \tilde{m}^2 \rangle \end{aligned} \quad (3.24)$$

onde usamos as definições da Eq.(3.23). Dessa forma,

$$\sigma^2(m) = \langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2 = \frac{1}{b^2} [\langle \tilde{m}^2 \rangle - \langle \tilde{m} \rangle^2] = \frac{1}{b^2} \sigma^2(\tilde{m}) \quad (3.25)$$

Como queremos que $P^*(\tilde{m})$ tenha variância $\sigma^2(\tilde{m})$ unitária, temos que $b = 1/\sigma$. Assim, é fácil obter a distribuição universal $P^*(\tilde{m})$, bastando reescalar o parâmetro de ordem m e aplicar a Eq.(3.23) . Essa técnica é bastante

explorada em nosso trabalho para o modelo VBEG, permitindo-nos a localização dos pontos tricrítico e crítico duplo terminal associados ao modelo e também distinguir diferentes classes de universalidade.

3.2.4 Mistura de Campos

Essa técnica, desenvolvida por Wilding e Bruce [39] na década de 90, tem sido utilizada em conjunto com a análise da distribuição de probabilidades do parâmetro de ordem para localizar pontos críticos e caracterizar classes de universalidade, como descrito por exemplo nos trabalhos de Wilding e Bruce [39, 40] e Plascak [42]. Em nosso trabalho, a mistura de campos foi utilizada para localizar o ponto crítico duplo terminal do modelo vetorial de Blume-Emery-Griffiths, que aparece para uma dada faixa de valores dos parâmetros do hamiltoniano (como será discutido nos resultados).

A necessidade do uso da mistura de campos advém da ausência de simetria entre as fases envolvidas na transição de fases associada ao ponto crítico isolado. Esse ponto, no plano T - Δ (veja pág. 65, Cap. 5) é controlado por dois campos de escala relevantes τ e δ , os quais são combinações lineares dos campos termodinâmicos T e Δ

$$\begin{aligned}\tau &= T - T_c + s(\Delta - \Delta_c) \\ \delta &= \Delta - \Delta_c + r(T - T_c),\end{aligned}\tag{3.26}$$

onde Δ_c e T_c são os valores dos campos termodinâmicos no ponto crítico e r e s controlam o grau da mistura desses campos.

Os operadores de escala conjugados \mathcal{E} e \mathcal{D} são também combinações lineares das componentes E e Q do hamiltoniano

$$\begin{aligned}\mathcal{E} &= \frac{E - rQ}{1 - rs} \\ \mathcal{D} &= \frac{Q - sE}{1 - rs},\end{aligned}\tag{3.27}$$

onde, para o modelo dado pela Eq.(3.3), $E = \sum_{\langle i,j \rangle} [S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y]$ e $Q = \sum_i S_i^2$.

De acordo com procedimentos de análise de escala finita [39] e grupo de renormalização [37], a distribuição $P_L(\mathcal{E}, \mathcal{D})$ na criticalidade é dada por

$$P_L(\mathcal{E}, \mathcal{D}) \simeq \Lambda_{\mathcal{E}}^+ \Lambda_{\mathcal{D}}^+ P^*(\Lambda_{\mathcal{E}}^+ \delta \mathcal{E}, \Lambda_{\mathcal{D}}^+ \delta \mathcal{D}), \quad (3.28)$$

$$\Lambda_{\mathcal{E}} = a_{\mathcal{E}} L^{d-y_{\mathcal{E}}}, \Lambda_{\mathcal{D}} = a_{\mathcal{D}} L^{d-y_{\mathcal{D}}} \quad (3.29)$$

onde $\Lambda_{\mathcal{E}} \Lambda_{\mathcal{E}}^+ = \Lambda_{\mathcal{D}} \Lambda_{\mathcal{D}}^+ = L^d$ e $\delta \mathcal{E} = \mathcal{E} - \langle \mathcal{E} \rangle_c$ and $\delta \mathcal{D} = \mathcal{D} - \langle \mathcal{D} \rangle_c$. A distribuição de probabilidades $P^*(\Lambda_{\mathcal{E}}^+ \delta \mathcal{E}, \Lambda_{\mathcal{D}}^+ \delta \mathcal{D})$ é uma função universal, característica de uma definida classe de universalidade. $P_L(\mathcal{E}, \mathcal{D})$ (Eq 3.28) está relacionada a distribuição de probabilidade conjunta $P_L(E, Q)$

$$P_L(E, Q) = \frac{1}{1-r_s} P_L(\mathcal{E}, \mathcal{D}). \quad (3.30)$$

A integração de $P_L(\mathcal{E}, \mathcal{D})$ em \mathcal{E} fornece $P_L(\mathcal{D})$, que é a distribuição de probabilidades desejada, já que \mathcal{D} é o operador de escala conjugado ao campo de escala δ . Temos então

$$P_L(\mathcal{D}) \simeq \Lambda_{\mathcal{D}}^+ P^*(\Lambda_{\mathcal{D}}^+ \delta \mathcal{D}). \quad (3.31)$$

Escolhendo o fator não-universal $a_{\mathcal{D}}$ de forma que a distribuição $P_L(\mathcal{D})$ em função de $a_{\mathcal{D}} L^{y_{\mathcal{D}}} (\mathcal{D} - \langle \mathcal{D} \rangle_c)$ apresente variância unitária, obtemos a distribuição universal de probabilidades P_L^* , que depende somente dos parâmetros T, Δ, s . De fato, a Eq.(3.31) tem a mesma forma da Eq.(3.23) da seção anterior, sendo agora $b = a_{\mathcal{D}} L^{y_{\mathcal{D}}}$ e $m = \mathcal{D}$. Assim, escolher o fator $a_{\mathcal{D}}$ equivale a reescalar $P_L(\mathcal{D})$ pelo seu desvio padrão σ , da mesma maneira descrita na seção anterior.

O estudo dessa distribuição permite-nos localizar, com boa precisão, quando a distribuição universal do parâmetro de ordem é conhecida, pontos críticos e multicríticos em diversos sistemas. No presente trabalho, pontos tricríticos e críticos duplos terminais forma determinados no modelo vetorial de Blume-Emery-Griffiths, como será apresentado no Cap. 5.

Capítulo 4

O modelo de Heisenberg anisotrópico submetido a um campo cristalino

Apresentamos, a seguir, os resultados das simulações Monte Carlo realizadas para o modelo de Heisenberg tridimensional submetido simultaneamente a uma anisotropia cristalina do tipo eixo fácil e a uma anisotropia de troca do tipo plano fácil. A *competição* entre essas duas anisotropias é a característica mais interessante desse modelo, que foi estudado empregando-se o algoritmo de Metropolis e o método do histograma para caracterizar as transições de fases encontradas e obter o diagrama de fases. Esse diagrama revela, além de uma fase desordenada, a existência de uma fase tipo Ising e outra tipo XY, separadas por uma linha de transição de primeira ordem. Nosso trabalho estende os resultados obtidos por Ribeiro [10], que estudou a competição entre as anisotropias de troca e cristalina nesse modelo em duas dimensões, sem entretanto determinar o seu diagrama de fases. Além de analisar a competição entre ambas as anisotropias no modelo tridimensional, determinamos também o diagrama de fases do modelo.

4.1 Introdução

O modelo de Heisenberg anisotrópico submetido a um campo cristalino é descrito pelo hamiltoniano

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - A \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^z S_j^z + D \sum_{i=1}^N (S_i^z)^2, \quad (4.1)$$

já apresentado no Cap. 1. Em nosso estudo, $J = 1$. O primeiro termo é a interação de troca entre spins vizinhos do modelo, tal qual encontrada no modelo de Heisenberg isotrópico. O segundo termo relaciona-se à *anisotropia de troca* e comporta-se como uma anisotropia de *eixo fácil*, já que tende a alinhar os spins na direção z de modo a reduzir a energia do sistema. O terceiro termo, por sua vez, corresponde à *anisotropia cristalina*, de *plano fácil*, que favorece o alinhamento dos spins no plano XY. Há, portanto, uma *competição* entre a anisotropia de troca, que induz a um ordenamento tipo Ising, e o campo cristalino, que induz um ordenamento tipo XY dos spins da rede. Dessa forma, espera-se que ocorra uma transição de um comportamento tipo Ising para um comportamento tipo XY, para certos valores de A e D . De fato, pode-se mostrar (Apêndice A) que, a temperatura zero, duas fases diferentes coexistem para $D = 3A$: uma fase onde todos os spins encontram-se alinhados ao longo da direção z (tipo Ising) e uma outra onde todos os spins alinham-se ao longo de uma direção arbitrária no plano XY (fase tipo XY).

Nosso objetivo é estudar o diagrama de fases do modelo em função dos parâmetros do hamiltoniano e localizar não apenas a linha de transição de primeira ordem, encontrada a baixas temperaturas, como também as duas linhas de transição de segunda ordem, as quais separam as fases ordenadas acima descritas da fase desordenada, que ocorre a altas temperaturas.

Em nossas simulações, analisamos o comportamento do calor específico c_v , da susceptibilidade magnética χ e de sua componente z (χ_z), dados respectivamente por

$$c_v = L^3 \frac{[\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2]}{T^2}, \quad (4.2)$$

$$\chi = L^3 \frac{[\langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2]}{T}, \quad (4.3)$$

$$\chi_z = L^3 \frac{[\langle m_z^2 \rangle - \langle m_z \rangle^2]}{T}, \quad (4.4)$$

onde E é a energia por spin, $m = \frac{1}{L^3} \sum_{i=1}^{L^3} S_i$ é a magnetização total do sistema e L é o tamanho da rede. Nas definições acima, $k_B = 1$. O parâmetro de ordem do modelo é a magnetização, mais especificamente a sua componente z na fase tipo Ising

$$m_z = \frac{1}{L^3} \sum_{i=1}^{L^3} S_i^z \quad (4.5)$$

e sua componente planar na fase tipo XY

$$m_{xy} = \frac{1}{L^3} \sqrt{\left[\left(\sum_{i=1}^{L^3} S_i^x \right)^2 + \left(\sum_{i=1}^{L^3} S_i^y \right)^2 \right]}. \quad (4.6)$$

As simulações foram realizadas em uma rede cúbica simples $L \times L \times L$, com condições periódicas de contorno. O diagrama de fases foi obtido localizando-se os máximos do calor específico e da susceptibilidade magnética e de sua componente z . Para isto, realizamos simulações preliminares para cada valor dos parâmetros utilizados, com um passo de temperatura $\Delta T = 0,1$. Para atingir o equilíbrio, utilizamos $100 \times L^2$ passos de Monte Carlo por spin (MCS) para a temperatura inicial da simulação. Para as temperaturas subseqüentes, utilizamos a configuração final de equilíbrio da temperatura anterior como configuração inicial para a próxima e empregamos então 3000 MCS para atingir o equilíbrio*. Após o equilíbrio ser atingido, cerca de 3×10^4 MCS são executados para o cálculo das médias termodinâmicas. Uma vez obtida a localização aproximada do máximo, realizamos uma outra simulação, mais

*Esta é uma regra prática que empregamos e que foi testada para a maior rede estudada ($L = 24$). Iniciando a simulação com três diferentes configurações e permitindo que o sistema percorra uma faixa de temperaturas, verificamos que a energia do sistema convergia, à temperatura inicial, para o mesmo valor após $100 \times L^2$ MCS. Isto também ocorreu para as temperaturas subseqüentes, após 3000 MCS. O mesmo foi verificado para a magnetização do sistema.

precisa, na vizinhança do pico, utilizando um passo de temperatura $\Delta T = 0,01$ e um número de passos de Monte Carlo da ordem de 10^5 MCS. Esse procedimento foi realizado considerando-se um tamanho de rede $L = 14$.

Uma análise de escala finita foi feita para alguns valores específicos dos parâmetros do modelo. De acordo com a teoria de escala finita (veja o Cap. 2), temos, para a temperatura crítica,

$$T_c(L) = T_c + \lambda L^{-1/\nu}. \quad (4.7)$$

Para o máximo da susceptibilidade magnética,

$$\chi(L) = \chi_0 L^{-\gamma/\nu}. \quad (4.8)$$

Em transições de primeira ordem, não há expoentes críticos, e a grandeza associada às leis de escala é a dimensionalidade d do sistema (no nosso caso, $d = 3$). Dessa forma, para a temperatura de transição,

$$T_c(L) = T_c + \lambda L^{-d}, \quad (4.9)$$

e, para o máximo da susceptibilidade magnética,

$$\chi(L) = \chi_0 L^{-d}. \quad (4.10)$$

Para a análise de escala finita, utilizamos $10 \leq L \leq 16$ para pontos de transição de segunda ordem e $12 \leq L \leq 24$ para pontos de transição de primeira ordem, com o auxílio do método do histograma. As tabelas de energia e magnetização utilizadas para esse método foram obtidas com 10^6 MCS para os pontos de transição de segunda ordem e 2×10^6 MCS para os pontos de transição de primeira ordem, após o equilíbrio ser atingido (descartando-se $100 \times L^2$ MCS). Com essa abordagem, foi possível obter a localização mais precisa dos picos associados às transições, assim como valores mais precisos para as razões de expoentes críticos pesquisadas. Observamos, no entanto, que os valores de temperatura de transição extrapolados para o limite termodinâmico encontram-se muito próximos dos valores obtidos para $L = 14$ (discrepância de menos de 2% para os pontos considerados), o que justifica a utilização de $L = 14$ para a obtenção do diagrama de fases global.

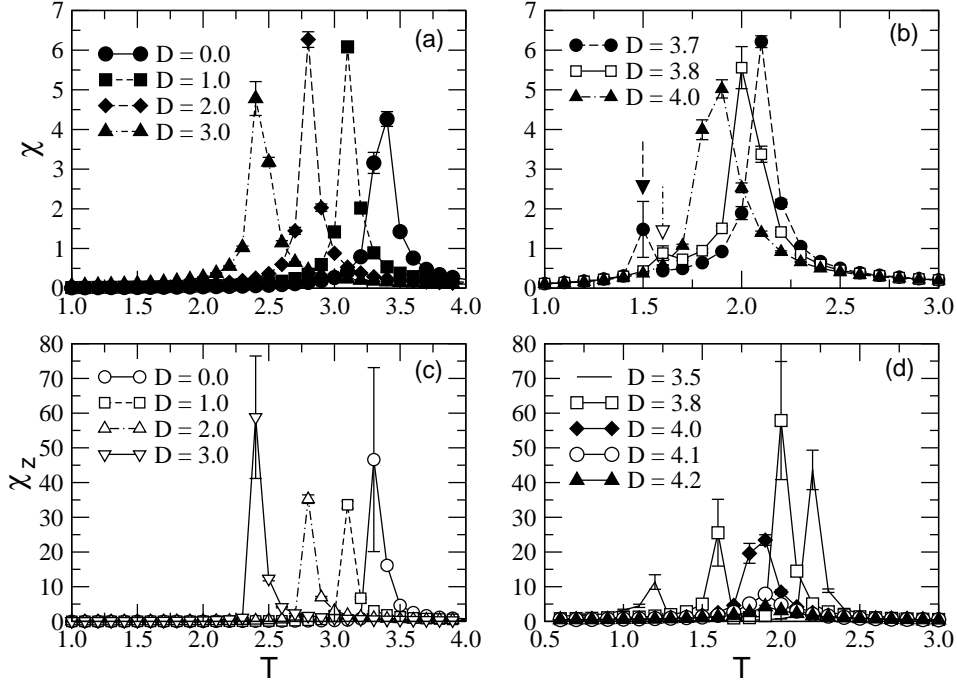


Figura 4.1: Comportamento da susceptibilidade magnética por spin e de sua componente z em função da temperatura para vários valores do parâmetro D . Resultados obtidos para $A = 1$ e $L = 14$. As setas em (b) indicam a posição dos picos secundários. As linhas são apenas para auxiliar a compreensão.

4.2 Resultados

Para o estudo do modelo proposto, definido pelo hamiltoniano da Eq.(4.1), utilizamos $A = 1$. Uma das características mais interessantes desse modelo é a *competição entre as anisotropias* de troca e cristalina, ilustrada na Fig. 4.1, onde apresentamos o comportamento, em função da temperatura, para a susceptibilidade magnética total e sua componente z , para diversos valores do parâmetro D . Observamos que, tanto para a susceptibilidade total quanto para sua componente z , os picos inicialmente movem-se em direção a temperaturas menores à medida que D aumenta (Figs. 4.1 (a) e 4.1 (c)). Para $D \approx 3.5$, um pico secundário aparece, mais pronunciadamente na componente z da susceptibilidade magnética. Com o aumento subsequente de D (Figs. 4.1 (b) e 4.1 (d)), esse pico secundário desloca-se em direção a tem-

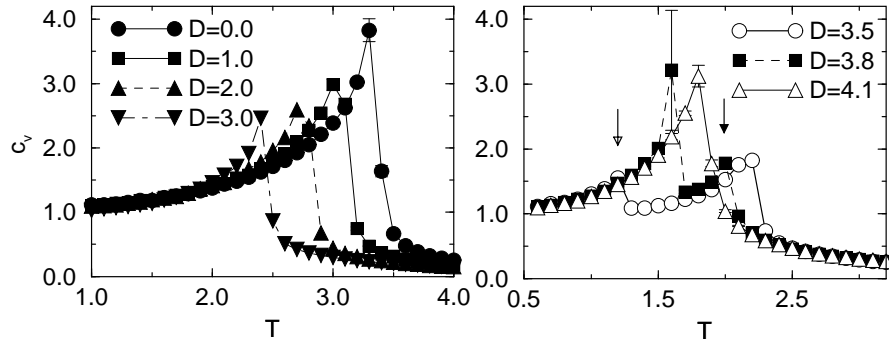


Figura 4.2: Comportamento do calor específico para $A = 1$ e $L = 14$. As linhas são apenas para auxiliar a leitura do gráfico. Quando não iniciadas, as barras de erro são do mesmo tamanho ou menores que os símbolos. As setas em (b) indicam a localização dos picos de menor amplitude.

peraturas mais altas, em oposição ao pico primário, até que ambos se fundam para $D \approx 4$. Para $D \gtrsim 4$, apenas um único pico é observado na susceptibilidade magnética, deslocando-se em direção a temperaturas mais altas com o incremento de D . Para a componente z da susceptibilidade magnética, esse pico progressivamente desaparece com o aumento de D . Comportamento semelhante àquele da susceptibilidade total é observado para o calor específico, como ilustrado na Fig. 4.2.

Associando os picos em χ e χ_z às transições de fases, de modo que a temperatura crítica seja dada pela temperatura de ocorrência desses picos, obtemos o diagrama de fases para o modelo, mostrado na Fig. 4.3. Esse diagrama revela uma fase tipo Ising (spins alinhados preferencialmente na direção z) separada de uma fase tipo XY (spins alinhados no plano xy) por meio de uma linha de transição de primeira ordem. Essas duas fases ordenadas são separadas de uma fase paramagnética por linhas de transição de segunda ordem, que se encontram num ponto bicrítico. O ponto bicrítico é caracterizado pelo encontro de duas linhas de transição de segunda ordem. Dessa forma, estendendo-se as linhas de segunda ordem de maneira a ficarem bem próximas, podemos estimar a localização do ponto bicrítico, dada por $[T_b, D_b] = [1, 73(3), 3, 95(4)]$.

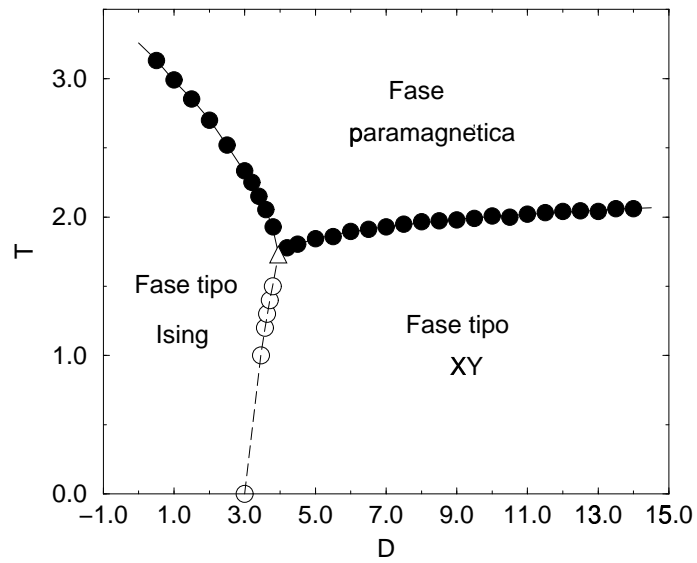


Figura 4.3: Diagrama de fases para o modelo, com $A = 1$ e $L = 14$. Círculos cheios representam transições de segunda ordem e, círculos abertos, transições de primeira ordem. As linhas são apenas para auxiliar a leitura do gráfico e encontram-se no ponto bicrítico (triângulo aberto), cuja localização estimada é $[T_b, D_b] = [1, 73(3), 3, 95(4)]$. As barras de erro são do mesmo tamanho ou menores que os símbolos.

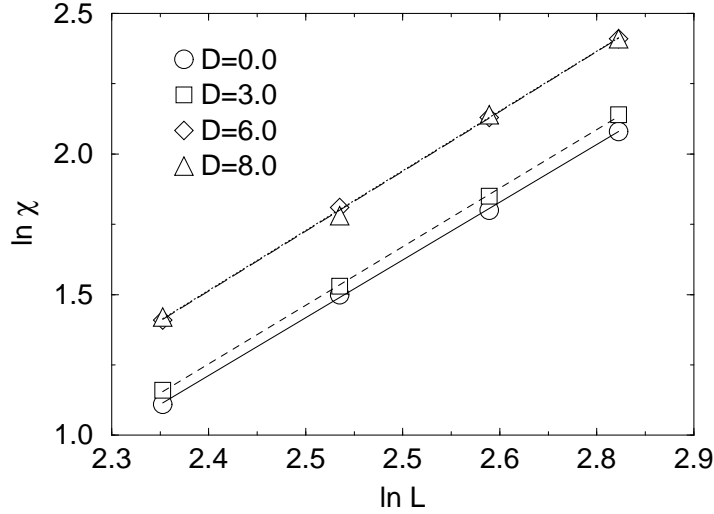


Figura 4.4: Análise de escala finita para o máximo da susceptibilidade magnética para pontos sobre a linha de segunda ordem na fronteira das regiões tipo Ising ($D = 0$ e $D = 3$) e tipo XY ($D = 6$ e $D = 8$). As barras de erro são do mesmo tamanho ou menores que os símbolos. As linhas representam o melhor ajuste dos dados, de acordo com a Eq.(4.8).

É interessante notar que, quando $D \rightarrow \infty$, a anisotropia cristalina, de plano fácil, restringe os spins totalmente ao plano xy . A temperatura crítica prevista nesse limite deve ser, então, a do modelo rotor planar em três dimensões ($T_c = 2, 2019(2)$) [43]. Assim, a linha de segunda ordem da fronteira da região XY tende assintoticamente para essa temperatura (para o último ponto obtido para essa linha, temos, para $D = 14$, $T = 2, 05$).

Para caracterizar as transições de fases que ocorrem no modelo, realizamos uma análise de escala finita, com o auxílio do método do histograma. Na Fig. 4.4 apresentamos os resultados dessa análise para o máximo da susceptibilidade para $D = 0$ e $D = 3$ (sobre a linha de segunda ordem da fronteira da região tipo Ising) e $D = 6$ e $D = 8$ (sobre a linha de segunda ordem da fronteira da região tipo XY). Os resultados revelam o caráter de segunda ordem das transições estudadas, com $\gamma/\nu = 2, 05(6)$ para $D = 0$ e $\gamma/\nu = 2, 08(6)$ para $D = 3$. Para a linha na fronteira da região tipo XY, encontramos $\gamma/\nu = 2, 12(6)$ e $\gamma/\nu = 2, 13(6)$ para $D = 6$ e $D = 8$, respectivamente. O valor esperado para a razão γ/ν é de $1,970(9)$ para o modelo

de Ising e $1,97(1)$, para o modelo XY em três dimensões.[†] Uma estimativa mais acurada poderia ser obtida utilizando-se tamanhos de rede maiores e trabalhando com mais passos de Monte Carlo para o cálculo das médias estatísticas. Além disto, a razão entre expoentes considerada não é adequada para discriminar o comportamento crítico das regiões Ising e XY (γ/ν é praticamente o mesmo para ambos os modelos!). Essa discriminação poderia ser obtida, por exemplo, através da análise da derivada $\partial U_4/\partial \mathcal{K}$ do cumulante U_4 de quarta ordem em relação ao inverso da temperatura \mathcal{K} , cujo comportamento de escala fornece uma estimativa para o expoente ν [3]. Entretanto, nosso objetivo aqui foi apenas caracterizar a ordem das transições, o que já foi possível através da análise preliminar realizada. De fato, com base no alcance das interações microscópicas e na dimensionalidade do sistema e do parâmetro de ordem, esperamos que a fronteira da região Ising (XY) pertença à classe de universalidade Ising (XY) em três dimensões. A análise mais aprofundada que sugerimos seria interessante apenas para confirmar essas previsões dos argumentos básicos de universalidade a respeito da linha de segunda ordem das fronteiras do diagrama de fases. Na Fig. 4.5, apresentamos a análise de escala finita para a temperatura crítica, para diferentes valores de D ao longo de ambas as linhas de segunda ordem. Os resultados revelam também um comportamento de escala típico de transições de segunda ordem, com temperaturas extrapoladas para o limite termodinâmico bem próximas àsquelas obtidas para $L = 14$. Esse fato indica que o diagrama de fases obtido para $L=14$ representa bem a estrutura do diagrama de fases no limite termodinâmico.

Comportamento diverso ocorre a baixas temperaturas, onde encontramos uma linha de transições de primeira ordem, que separa as fases tipo Ising e tipo XY. Na Fig 4.6 apresentamos o comportamento das componentes z e xy da magnetização em função da temperatura para $D=3, 5$ e $0, 95 \leq T \leq 1, 12$, isto é cruzando-se a linha de primeira ordem. Note que para $T \approx 0, 95$, $m_z \approx 0$ e m_{xy} apresenta valor não nulo, o que caracteriza a fase tipo XY. Por

[†]Razões obtidas a partir dos valores dos expoentes γ e ν apresentados em [44].

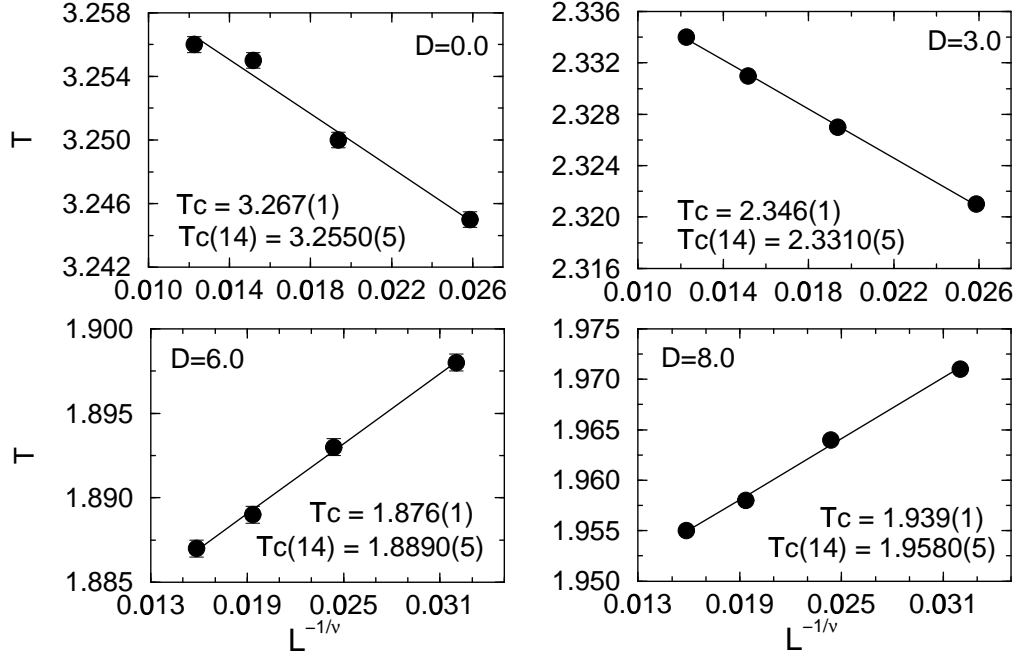


Figura 4.5: Análise de escala finita para a temperatura e diferentes valores de D ao longo das linhas de transição de segunda ordem. T_c representa a temperatura no limite termodinâmico e $T_c(14)$ é o valor correspondente para $L = 14$. Para $D = 0$ e $D = 3$, utilizamos $\nu_{Ising} = 0,630$ e, para $D = 6$ e $D = 8$, $\nu_{XY} = 0,669$. As linhas representam o melhor ajuste dos dados de acordo com a Eq.(4.7). Barras de erro do mesmo tamanho ou menores que os símbolos.

outro lado, para $T \approx 1,1$, a situação se inverte, com $m_{xy} \approx 0$ e m_z não nulo, o que caracteriza a fase tipo Ising. O ciclo de histerese, típico de transições de primeira ordem, aparece claramente na Fig 4.6.

Também fizemos uma análise de escala finita para o máximo da susceptibilidade magnética no ponto $D = 3,8$ sobre a linha de primeira ordem. Os resultados estão mostrados na Fig. 4.7, revelando uma inclinação de $3,11(4)$, valor razoavelmente próximo ao esperado para transições de primeira ordem, dado pela dimensão $d = 3$ do sistema. Uma melhor concordância poderia ser obtida utilizando-se redes maiores.

A estrutura do diagrama de fases esperada para outros valores do parâmetro A é similar à descrita para $A = 1$, com o deslocamento do ponto bicrítico

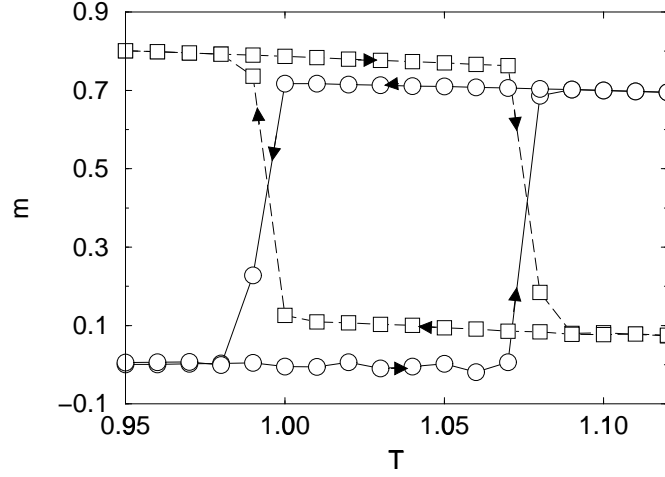


Figura 4.6: Comportamento em função da temperatura das componentes z e xy da magnetização a baixas temperaturas, para $D = 3, 5$, $A = 1$ e $L = 14$. O sentido dos ramos dos ciclos de histerese estão indicados pelas setas. Círculos abertos representam m_z e, quadrados abertos, m_{xy} . As linhas são apenas para auxiliar a compreensão.

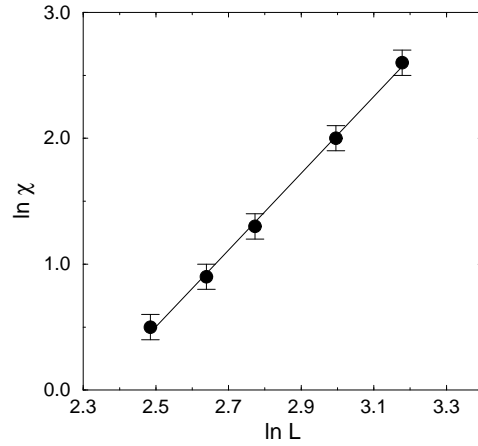


Figura 4.7: Análise de escala finita para o máximo da susceptibilidade para ponto sobre a linha de primeira ordem ($D = 3, 8, T = 1, 5$). A linha representa o melhor ajuste, de acordo com a Eq.(4.10). A inclinação é razoavelmente próxima à dimensão do sistema, o que caracteriza a transição de primeira ordem.

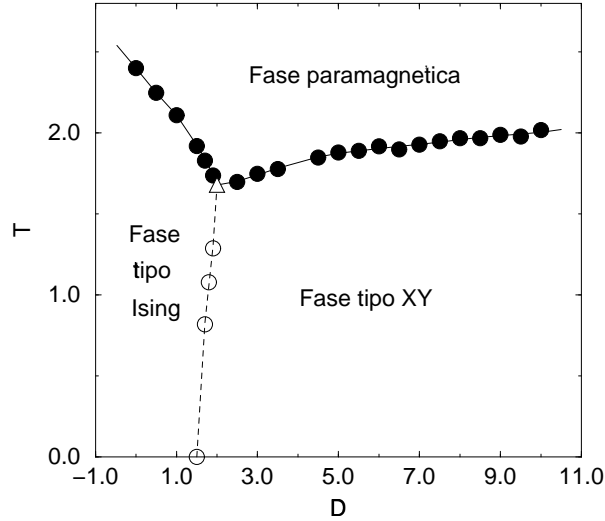


Figura 4.8: Diagrama de fases para o modelo, com $A = 0,5$ e $L = 14$. Círculos cheios representam transições de segunda ordem e, círculos abertos, transições de primeira ordem. As linhas são apenas para auxiliar a leitura do gráfico e se encontram no ponto bicrítico, representado pelo triângulo aberto, cuja localização estimada é $[T_b, D_b] = [1,68(4), 2,00(3)]$. As barras de erro são do mesmo tamanho ou menores que os símbolos.

para valores mais baixos de T e D à medida que A diminui. Para $A = 0,5$, por exemplo, simulações preliminares ($L = 14$) indicam que o ponto bicrítico está localizado em $[T_b, D_b] = [1,68(4), 2,00(3)]$.

4.3 Conclusões

Estudamos, empregando simulações Monte Carlo, o diagrama de fases do modelo de Heisenberg tridimensional anisotrópico submetido a uma anisotropia cristalina. O diagrama de fases apresenta, além da fase desordenada a altas temperaturas, duas fases ordenadas a baixas temperaturas: uma fase tipo Ising e outra tipo XY. Ambas as fases ordenadas sofrem uma transição de segunda ordem para a fase desordenada e encontram-se separadas por uma linha de transição de primeira ordem. As linhas de transição de fases terminam em um ponto bicrítico, localizado, para $A = 1$, em $T = 1,73(3)$ e $D = 3,95(4)$. Resultados similares são esperados para outros valores do

parâmetro A , com o deslocamento do ponto bicrítico para valores mais altos de T e D com o incremento do parâmetro A . Por exemplo, para $A = 0,5$, verificamos que o ponto bicrítico está localizado em $T = 1,68(4)$ e $D = 2,00(3)$. Esses resultados estendem aqueles obtidos por Ribeiro [10], que trabalhou com esse modelo em duas dimensões. O autor analisa a competição entre as anisotropias de troca e cristalina. Entretanto, não estuda a natureza das transições de fases associadas aos picos primário e secundário da susceptibilidade magnética e do calor específico, de modo a determinar o diagrama de fases do modelo.

Capítulo 5

O Modelo Vetorial de Blume-Emery-Griffiths-versão XY

Discutiremos agora os resultados das simulações Monte Carlo realizadas para a versão XY do modelo vetorial de Blume-Emery-Griffiths em uma rede cúbica simples. Obtivemos o diagrama de fases, que reproduz, para uma faixa de valores dos parâmetros do modelo, a topologia do diagrama observado para misturas de ${}^3\text{He}$ - ${}^4\text{He}$. Como veremos, esse diagrama de fases apresenta uma fase superfluida, rica em ${}^4\text{He}$, que sofre uma transição de fase para uma fase fluida normal. Essa transição é de primeira ou de segunda ordem, de acordo com a região do diagrama de fases examinada. A característica mais importante desse diagrama é a existência de um *ponto tricrítico* que, para certos valores dos parâmetros do modelo, se decompõe em um *ponto crítico terminal* e um *ponto crítico duplo terminal*. Esses pontos foram localizados com boa precisão.

5.1 Introdução

A versão do modelo que estudamos já foi convenientemente definida no Capítulo 1 (Eq.(1.2)), onde motivamos o seu estudo e apresentamos o hamiltoniano

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} [S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y] - K \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^z S_j^z + \Delta \sum_{i=1}^N (S_i^z)^2. \quad (5.1)$$

Em nossas simulações $J = 1$.

No Capítulo 3, já discutimos, em linhas gerais, os métodos empregados nas simulações e na análise dos dados. Descreveremos, em mais detalhes, nessa seção, os procedimentos utilizados no estudo desse modelo.

O parâmetro de ordem do modelo (veja a Eq.(1.3)), isto é, a magnetização por sítio no plano (m_{xy})

$$m_{xy} = \frac{1}{L^3} \sqrt{\left[\left(\sum_{i=1}^{L^3} S_i^x \right)^2 + \left(\sum_{i=1}^{L^3} S_i^y \right)^2 \right]} \quad (5.2)$$

e a concentração de partículas não-magnéticas (ou de átomos de 3He , veja a Eq.(1.4))

$$x_3 = \frac{1}{L^3} \sum_i^{L^3} [1 - S_i^z] \quad (5.3)$$

são grandezas termodinâmicas importantes em nosso estudo. Outras grandezas termodinâmicas de interesse examinadas foram o calor específico c_v , a componente planar χ_{xy} da susceptibilidade magnética e a susceptibilidade associada à concentração de 3He , χ_{conc} , definidas como:

$$c_v = L^3 \frac{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2}{T^2}, \quad (5.4)$$

$$\chi_{xy} = L^3 \frac{\langle m_{xy}^2 \rangle - \langle m_{xy} \rangle^2}{T}, \quad (5.5)$$

$$\chi_{conc} = L^3 \frac{\langle x_3^2 \rangle - \langle x_3 \rangle^2}{T}, \quad (5.6)$$

onde L é o tamanho da rede cúbica utilizada, E é a energia por sítio e T é a temperatura do sistema. A constante de Boltzmann foi feita $k_B = 1$ em nosso estudo. Para a obtenção do diagrama de fases, analisamos o comportamento dessas grandezas termodinâmicas.

As simulações foram realizadas em uma rede cúbica simples $L \times L \times L$, com condições periódicas de contorno, utilizando-se os algoritmos de gás de rede, reorientação de spins, Wolff e super-relaxação combinados por uma técnica de Monte Carlo híbrido, como discutido no Capítulo 3. Em nosso trabalho, utilizamos a seguinte mistura de algoritmos (o que ficará mais claro a seguir): 1 passo de reorientação de spins; 1 passo de Wolff; 1 passo de super-relaxação, cada um deles precedido por um passo do algoritmo de gás de rede. Um passo representa a execução de cada algoritmo varrendo-se toda a rede (com exceção do algoritmo de Wolff, para o qual um passo se refere à reorientação de um dado aglomerado de spins). À combinação utilizada dos algoritmos chamaremos 1 passo híbrido de Monte Carlo (MCS). De modo geral, nas simulações realizadas, utilizamos $200 \times L^2$ MCS para atingir o equilíbrio à temperatura inicial da simulação. Para as temperaturas subseqüentes, utilizamos a configuração final da temperatura anterior como a configuração inicial para a próxima temperatura e 6000 MCS para atingir o novo estado de equilíbrio*. Após o equilíbrio ser atingido, empregamos cerca de 10^4 MCS para o cálculo das médias termodinâmicas.

Nosso objetivo primeiro, ao realizarmos as simulações na versão XY do modelo vetorial de Blume-Emery-Griffiths, foi o estudo do seu diagrama de fases. Uma característica importante desse diagrama é a existência de um *ponto tricrítico* para uma determinada faixa de valores dos parâmetros do hamiltoniano. A localização do ponto tricrítico foi determinada considerando-

*Esta é uma regra prática que empregamos e que foi testada para a maior rede estudada ($L = 30$). Na vizinhança da criticalidade, iniciamos a simulação com três diferentes configurações. Permitindo que o sistema percorra uma faixa de temperaturas, verificamos que a energia do sistema convergia, à temperatura inicial, para o mesmo valor após $200 \times L^2$ MCS. Isto também ocorreu para as temperaturas subseqüentes, após 6000 MCS. O mesmo foi verificado para a magnetização do sistema.

se que a dimensão crítica superior na tricriticalidade é $d_{>} = 3$. Dessa forma, a teoria de campo médio se aplica e a correspondente distribuição de probabilidades para o parâmetro de ordem assume a forma prevista pela teoria de Landau [21]

$$P(m) = P_o m \exp(-Am^2 - Bm^4 - Cm^6), \quad (5.7)$$

onde $m = |m_{xy}|$ é o módulo da componente planar da magnetização por spin. Os parâmetros P_o , A , B e C são constantes, de tal forma que C é sempre positivo e $A = B = 0$ no ponto tricrítico (veja o Apêndice C) [21]. As funções de escala para Δ_t e T_t são, respectivamente [21],

$$\Delta_t(L) = \Delta_t + \frac{\delta_1}{L} + \frac{\delta_2}{L^2}, \quad (5.8)$$

$$T_t(L) = T_t + \frac{t_1}{L} + \frac{t_2}{L^2}, \quad (5.9)$$

onde $\Delta_t(L)$ and $T_t(L)$ são as coordenadas do ponto tricrítico para cada tamanho L da rede e δ_1 , δ_2 , t_1 , t_2 são parâmetros de ajuste.

Como será mostrado a seguir, o diagrama de fases altera-se substancialmente para $K = 1, 3$, desaparecendo o ponto tricrítico, que cede lugar a um ponto crítico terminal e a um ponto crítico duplo terminal. A localização do ponto crítico terminal foi feita de uma maneira simples, mas, para o ponto crítico duplo terminal, recorreremos ao estudo da distribuição universal de probabilidades associada ao parâmetro de ordem e à técnica da mistura de campos (apresentadas no Capítulo 3). Vale lembrar que essas alterações no diagrama de fases foram previstas pela teoria de campo médio (em [21], por exemplo, encontram-se previsões para a versão rotor planar do modelo vetorial de Blume-Emery-Griffiths). Entretanto, sua observação em simulações tem sido notoriamente difícil [45, 46].

5.2 Resultados

5.2.1 K=1

Para o estudo da versão XY do modelo vetorial de Blume-Emery-Griffiths, empregamos os algoritmos de (i) gás de rede, (ii) reorientação de spins, (iii) Wolff e (iv) super-relaxação combinando-os num método Monte Carlo híbrido, conforme discutido anteriormente no Capítulo 3. Para realizar as simulações desejadas, tornou-se necessário então escolher uma proporção adequada de mistura dos algoritmos (ii), (iii) e (iv) (lembrando que o algoritmo de gás de rede foi executado juntamente com cada um dos demais). Após a realização de testes com diferentes misturas desses três algoritmos, aquela que se revelou mais eficiente na redução do tempo de correlação[†] entre os estados amostrados foi a mais simples: 1 passo de reorientação de spins, executado utilizando-se o algoritmo do banho térmico local (BT) (veja a Eq.(3.4), Cap. 3): 1 passo de Wolff (W): 1 passo de super-relaxação (SR). As demais misturas analisadas apresentaram eficiência menor (1BT:5W:7SR e 1BT) ou comparável à escolhida (3BT:7W:5SR e 2BT:3W:2SR).

O tempo de correlação foi calculado a partir da função correlação de equilíbrio, dada por

$$\phi_A(t) = \frac{[\langle A(0)A(t) \rangle - \langle A \rangle^2]}{[\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2]} \quad (5.10)$$

onde $A(t)$ representa o valor, no tempo de Monte Carlo t , da grandeza cuja autocorrelação se deseja medir. O tempo de correlação é determinado medindo-se o tempo necessário para que a amplitude da função correlação decaia a 50% do seu valor inicial. A simples inspeção visual das curvas de correlação também é útil para comparar a eficiência relativa das diversas misturas pesquisadas. Em nosso caso, calculamos a função correlação para

[†]Tempo em segundos. Da função de correlação temporal entre estados, obtivemos o tempo de correlação em termos do número de passos híbridos de Monte Carlo (MCS). Medindo o tempo de CPU necessário para a execução do número de MCS utilizado, foi possível então calcular o tempo de correlação em segundos.

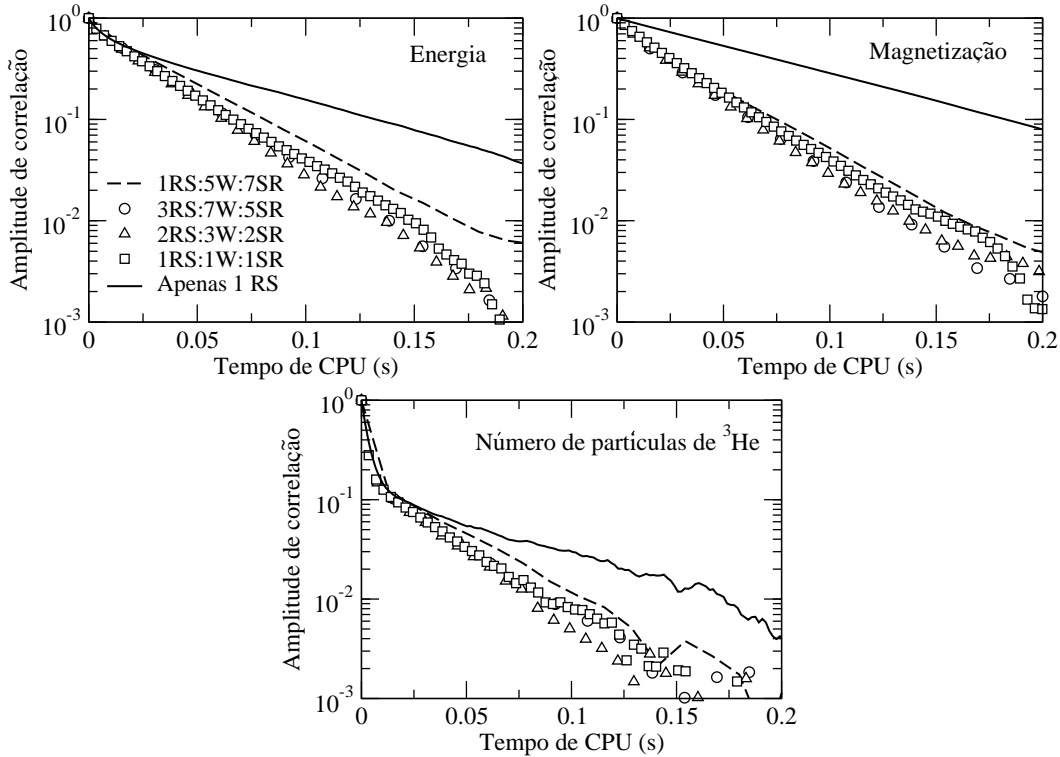


Figura 5.1: Função correlação temporal de equilíbrio calculada para diversas misturas de algoritmos. Resultados obtidos na vizinhança da transição de segunda ordem, para uma rede de tamanho $L = 8$. A mesma legenda para as curvas se aplica em todas as figuras.

a energia, a magnetização e o número de partículas de ${}^3\text{He}$ no sistema, para diversas proporções de mistura dos algoritmos. Os resultados estão mostrados na Fig. 5.1. Esse teste foi realizado para uma rede cúbica com $L = 8$. Acreditamos que resultados semelhantes seriam obtidos utilizando-se redes maiores.

Cabe aqui um breve complemento à discussão apresentada no Cap. 3, a respeito da necessidade do uso do algoritmo híbrido como uma forma de aumentar a eficiência das simulações realizadas. Podemos observar, na Fig. 5.1, que a inclusão dos passos de Wolff e super-relaxação aumenta, consideravelmente, a eficiência do algoritmo em relação ao uso somente da reorientação de spins. Observamos também que a concentração de partículas de ${}^3\text{He}$

atinge o equilíbrio mais rapidamente que a magnetização e a energia. Dessa forma, a busca da configuração de equilíbrio para a orientação dos spins é mais eficiente se usarmos o algoritmo de reorientação de spins, pois assim a concentração de partículas de ${}^3\text{He}$ (que já se encontra no equilíbrio) não é alterada. O algoritmo de gás de rede, sem o banho térmico, poderia também ser usado com o objetivo de reorientar os spins da rede, mas de maneira muito menos eficiente. Isto se deve ao fato de que, esse algoritmo, para alterar a orientação de um dado spin, necessita primeiro substituí-lo por uma partícula não magnética, para então introduzir um spin com uma nova orientação. Mas esse processo afetaria também a concentração de partículas, que não desejamos alterar, pois já se encontra em equilíbrio.

A função correlação de equilíbrio foi calculada a partir de uma tabela de energias e magnetizações armazenada ao longo de 1 milhão de passos híbridos de Monte Carlo. Procuramos fazer esse estudo na pior situação, isto é, na vizinhança da criticalidade, onde efeitos da dinâmica de relaxação crítica estejam presentes. No caso, as simulações para a obtenção das tabelas de energia e magnetização foram realizadas em $T_c(L = 8) = 1,5$, $K = 1$, $\Delta = 2$. $T_c(L = 8)$ foi obtido através de uma simulação prévia, localizando-se o pico da susceptibilidade magnética planar.

Os resultados seguintes referem-se a $K = 1$. Resultados para outros valores desse parâmetro serão mostrados posteriormente. Ressaltamos que todos os resultados referem-se a $L = 10$, exceto quando especificado. O comportamento do calor específico, da componente planar da magnetização e da concentração de ${}^3\text{He}$ em função da temperatura está mostrado na Fig. 5.2 para vários valores do parâmetro Δ . O calor específico, Fig. 5.2 (a), e a componente planar da susceptibilidade magnética, Fig. 5.2 (b), exibem um pico bem definido, que se move em direção a temperaturas mais baixas à medida que Δ aumenta (para $\Delta = 4,0$, o pico na componente planar da susceptibilidade é muito pequeno e sua localização é indicada pela seta). A magnetização no plano, ilustrada na Fig. 5.2 (c)), exhibe um salto para $\Delta \geq 4,0$, o que indica a ocorrência de transição de primeira ordem. Comportamento análogo

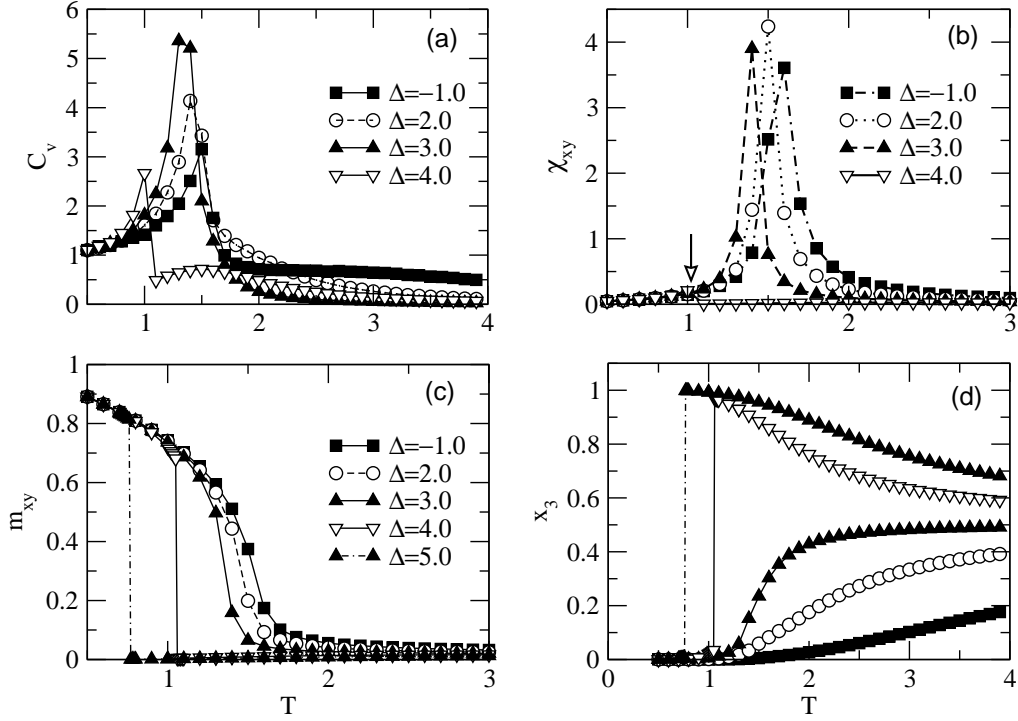


Figura 5.2: Comportamento (a) do calor específico, (b) componente planar da susceptibilidade magnética, (c) magnetização planar e (d) concentração de partículas de ${}^3\text{He}$ em função da temperatura para vários valores de Δ para $K = 1$ e $L = 10$. Em (b), a seta indica a posição do pico de primeira ordem para $\Delta = 4,0$. As barras de erro são do mesmo tamanho dos símbolos. A legenda em (c) é válida também para (d). As linhas são apenas para auxiliar a leitura dos gráficos.

é observado na concentração de ${}^3\text{He}$, mostrada na Fig. 5.2 (d)).

Associando os picos em χ_{xy} e c_v às transições de fase, obtemos o diagrama de fases do modelo, ilustrado na Fig. 5.3. Para a localização desses picos, realizamos simulações preliminares para cada valor estudado dos parâmetros do modelo, na faixa de temperaturas de 0,5 a 5,0, com um passo de temperatura $\Delta T = 0,1$, utilizando-se 10^4 passos Monte Carlo híbridos (MCS) para as médias, após o equilíbrio ser atingido. Uma vez obtida a localização aproximada do pico, uma nova simulação, mais precisa, é então realizada, na vizinhança do pico, com $\Delta T = 0,01$ e 4×10^4 MCS. A localização mais adequada dos pontos sobre a linha de primeira ordem foi auxiliada pela análise

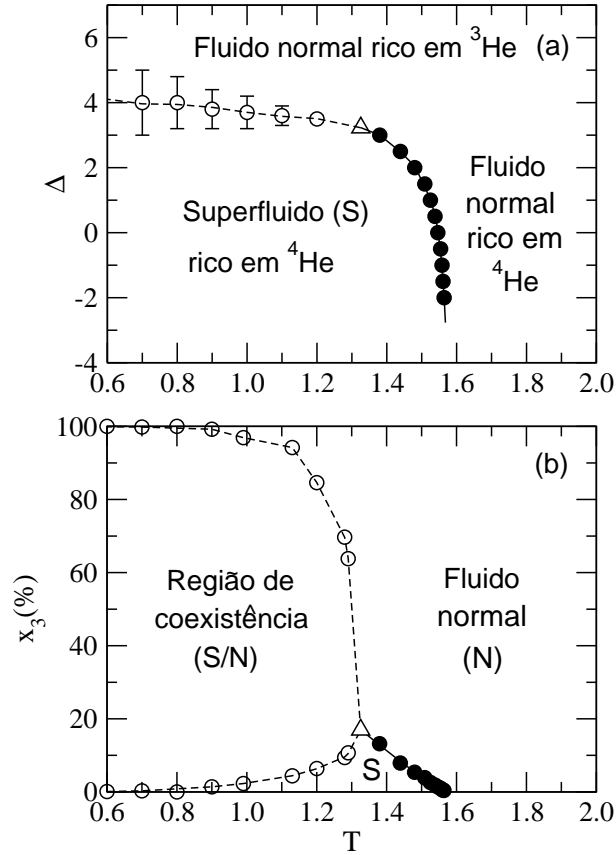


Figura 5.3: Diagrama de fases do modelo nos planos Δ - T e temperatura-concentração (x_3) para $K = 1$ e $L = 10$. A localização do ponto tricrítico (triângulo aberto) é $[\Delta_t, T_t] = [3, 230(5), 1, 3257(9)]$. Círculos abertos e fechados representam pontos de primeira e segunda ordem, respectivamente. As linhas são apenas para auxiliar a leitura dos gráficos. As barras de erro são do mesmo tamanho que os símbolos ou menores, exceto quando indicadas.

do ciclo de histerese associado a uma dada temperatura T , obtido variando-se o parâmetro Δ a T constante. Para cada valor de temperatura estudado, o valor de Δ associado à transição de primeira ordem foi estimado como o valor médio entre os extremos do ciclo de histerese e a barra de erro corresponde à metade da largura do ciclo (Fig. 5.4)). Para a obtenção dos ciclos de histerese, utilizamos somente o algoritmo de gás de rede e reduzimos o número de passos de Monte Carlo para as médias. Isto favorece a permanência por mais tempo no estado metaestável, pois reduz a eficiência com que o sistema

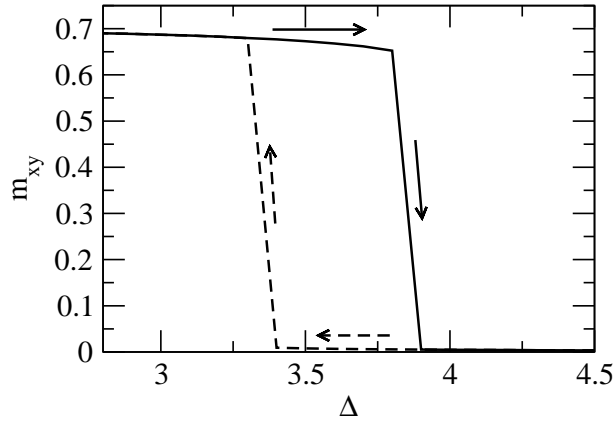


Figura 5.4: Ciclo de histerese obtido para $K = 1$, cruzando-se a linha de transições de primeira ordem em $T = 1, 1$. A análise dos ciclos de histerese foi importante não apenas para caracterizar a transição de primeira ordem como também para estimar o erro na localização dos pontos associados a essa transição.

explora o espaço de configurações.

Para valores de Δ abaixo do ponto tricrítico, o sistema sofre, com o aumento da temperatura, transições de segunda ordem (transição lambda), de uma fase superfluida, rica em ${}^4\text{He}$, para uma fase normal. A concentração de ${}^3\text{He}$ na fase normal varia de acordo com a região do diagrama de fases considerada. Para $\Delta < \Delta_t$, o sistema apresenta uma fase normal, rica em ${}^4\text{He}$, mas a concentração de ${}^3\text{He}$ gradualmente aumenta à medida em que se aproxima do ponto tricrítico, de modo que uma fase normal rica em ${}^3\text{He}$ se desenvolve.

Vale aqui discutir um pouco mais sobre a definição do ponto tricrítico. O ponto tricrítico é o ponto onde a linha de transições de segunda ordem é substituída pela linha de primeira ordem. Esse ponto pode também ser definido como o ponto de encontro de três linhas de transições de segunda ordem. Apenas uma delas é visível em nosso diagrama porque a visualização das outras duas está relacionada à aplicação de um campo externo, que seria representado em um terceiro eixo, perpendicular aos apresentados. Nessa situação, a fase superfluida seria decomposta em duas fases superfluidas distintas e as duas linhas adicionais de segunda ordem se tornariam visíveis nesse

diagrama de fases estendido. No ponto tricrítico, as duas fases superfluidas e a fase normal rica em ${}^3\text{He}$ se tornam iguais.

O diagrama de fases no plano temperatura-concentração (x_3) é também mostrado na Fig 5.3. Esse diagrama é importante para compararmos a topologia do diagrama do modelo estudado com aquele obtido experimentalmente para misturas de ${}^3\text{He}$ - ${}^4\text{He}$, pois o diagrama de fases experimental é obtido no plano temperatura-concentração de ${}^3\text{He}$ (ou ${}^4\text{He}$). De fato, o diagrama de fases obtido para o modelo reproduz qualitativamente o diagrama de fases obtido experimentalmente para misturas de ${}^3\text{He}$ - ${}^4\text{He}$. A concentração tricrítica de ${}^3\text{He}$ é entretanto menor ($x_{3t} = 17\%$) que aquela obtida experimentalmente (67%). A razão entre a temperatura tricrítica T_t e a temperatura T_S da transição superfluida do ${}^4\text{He}$ puro (correspondente à temperatura crítica do modelo XY em três dimensões) é $T_t/T_S = 0,8^\ddagger$, enquanto o valor experimental é de 0,4 [21].

Como mencionado na seção anterior, o ponto tricrítico foi localizado estudando-se a distribuição de probabilidades do parâmetro de ordem (no caso, a componente planar da magnetização). A idéia básica para localizar o ponto tricrítico é ‘caminhar’ ao longo da linha de transições de segunda ordem, variando Δ e T e medir a distribuição de probabilidades do parâmetro de ordem ao longo do caminho, até que encontremos o ponto onde $P(m)$ exibe a forma prevista para a tricriticalidade, com $A = B = 0$ (cf. Eq.(5.7)). Na prática, fixamos $A = B = 0$ na função de ajuste e utilizamos P_0 e C como parâmetros de ajuste. O ponto tricrítico é atingido quando se obtém um ajuste visualmente satisfatório, com o mais baixo valor possível da função de mérito χ^2 (que mede essencialmente a distância média entre a linha de ajuste teórico e os pontos obtidos pela simulação). O erro dessa localização é estimado determinando-se a região nos parâmetros Δ e T na qual uma variação desses parâmetros não afeta sensivelmente o valor mínimo obtido para a função de mérito χ^2 . De fato, a probabilidade de campo médio des-

[‡]A temperatura tricrítica utilizada é a obtida no limite termodinâmico, o que será discutido adiante.

creve satisfatoriamente a distribuição de probabilidades do parâmetro de ordem, como mostrado na Fig. 5.5.

A busca do ponto tricrítico foi facilitada pelo uso do método do histograma, que nos permitiu extrapolar simultaneamente nos parâmetros Δ e T . Assim, a partir de uma única simulação em um ponto próximo à linha de transições de fase, foi-nos possível obter vários pontos ao longo dessa linha. Uma nova simulação tornava-se necessária somente quando a extrapolação pelo método do histograma não era mais confiável, como descrito na pág. 25.

Determinamos, empregando o critério acima, o ponto pseudo-tricrítico $[\Delta_t(L), T_t(L)]$ para cada tamanho L de rede utilizado. Utilizando-se a função de escala adequada para os parâmetros tricríticos Δ_t e T_t (veja Eqs. (5.8) e (5.9)), foi possível determinar as coordenadas do ponto tricrítico no limite termodinâmico. Os resultados da análise de escala finita para as coordenadas do ponto tricrítico estão apresentadas na Fig. 5.6. Desse estudo, obtivemos que as coordenadas do ponto tricrítico são $[\Delta_t, T_t] = [3,313(4), 1,293(1)]$.

Tendo utilizado a distribuição prevista pela teoria de Landau como molde para a obtenção do ponto tricrítico, podemos agora verificar o colapso da distribuição universal de probabilidades apresentando, em um mesmo gráfico, a distribuição para cada tamanho de rede L (Fig. 5.7). O colapso obtido é bastante satisfatório, corroborando a correta localização do ponto tricrítico. Para o colapso, utilizamos como molde a distribuição de probabilidades tricrítica para $L = 30$ e ajustamos os parâmetros $T_t(L)$ e $\Delta_t(L)$ para os demais tamanhos de rede de modo a melhorar a qualidade do colapso obtido (os valores utilizados dos parâmetros encontram-se dentro da faixa de erro estimada para $T_t(L)$ e $\Delta_t(L)$).

Analizamos também o comportamento de escala finita da componente planar da susceptibilidade magnética. Na tricriticalidade, a função de escala finita prevista para a susceptibilidade associada ao parâmetro de ordem é [21]

$$\chi = \chi_0 \left(\frac{L}{l_0}\right)^{\gamma/\nu} \left(\ln \frac{L}{l_0}\right)^{\frac{1}{4}}, \quad (5.11)$$

onde χ_0 e l_0 são parâmetros de ajuste. Nessa função, $\gamma/\nu = 2$, valor de campo médio previsto para γ/ν no ponto tricrítico. A correção logarítmica

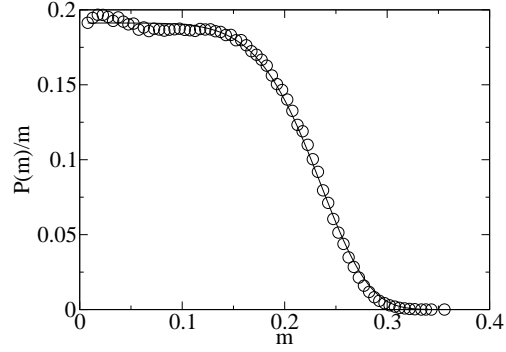


Figura 5.5: Distribuição de probabilidades do parâmetro de ordem para $L = 30$ no ponto pseudotricrítico $[\Delta_t(30), T_t(30)] = [3, 2935(5), 1, 3014(2)]$. A linha representa o melhor ajuste da distribuição, de acordo com a Eq.(5.7), com $A = B = 0$.

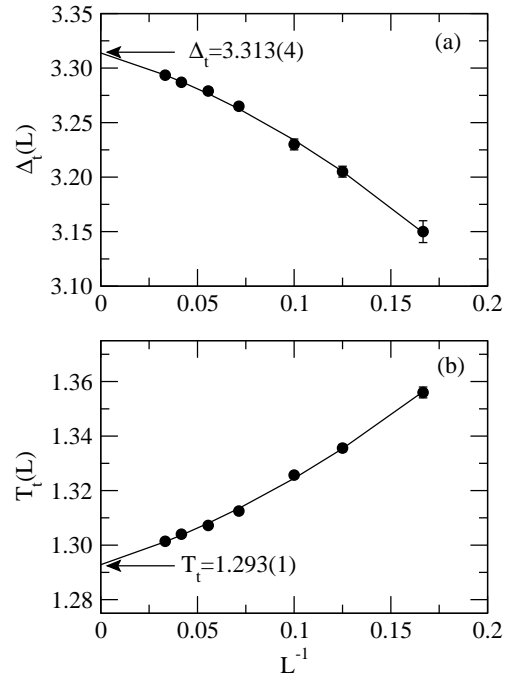


Figura 5.6: Análise de escala finita para os parâmetros (a) Δ_t e (b) T_t no ponto tricrítico. A linha representa o melhor ajuste para os dados, de acordo com as funções definidas nas Eqs. (5.8) e (5.9). As setas indicam o valor extrapolado para o limite termodinâmico.

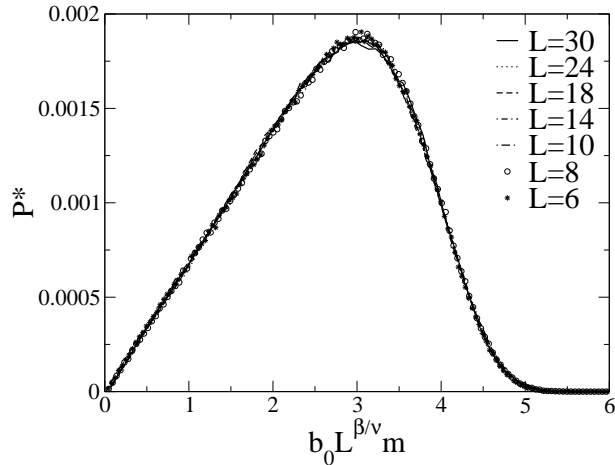


Figura 5.7: Distribuição universal de probabilidades para o ponto tricrítico do modelo ($K = 1$). Observe o colapso das curvas para os diversos tamanhos L da rede.

revelou-se fundamental no comportamento de escala finita da susceptibilidade magnética, como mostra a Fig. 5.8. Na Fig. 5.8(a), é possível observar que o ajuste que despreza a correção logarítmica é qualitativamente inferior, o que fica mais claro na Fig. 5.8(b). Esse gráfico revela claramente a necessidade da correção logarítmica, já que a multiplicação de $\chi_{xy}(L)$ por $L^{-\gamma/\nu}$ não é capaz, por si só, de linearizar o comportamento de escala da susceptibilidade magnética. Resta ainda uma curva, que é ajustada de maneira bastante razoável pela função de correção logarítmica. Um ajuste melhor seria esperado se fossem utilizados tamanhos de rede suficientemente maiores (nossa análise, mostrada no gráfico, restringiu-se apenas ao ramo inicial da função logarítmica). Esses resultados corroboram a nossa estimativa para a localização do ponto pseudo-tricrítico para cada tamanho de rede L .

Obtivemos também, na vizinhança do ponto tricrítico, a localização de alguns pontos sobre as linhas de transição de primeira e segunda ordem. Esses pontos foram obtidos utilizando-se o método do histograma e análise de escala finita. A partir de uma única simulação na vizinhança de um ponto sobre a linha de primeira ordem, foi possível obter alguns pontos sobre a linha de transição extrapolando-se nos parâmetros T e Δ por meio do método do histograma bidimensional. O mesmo procedimento foi utilizado para a linha

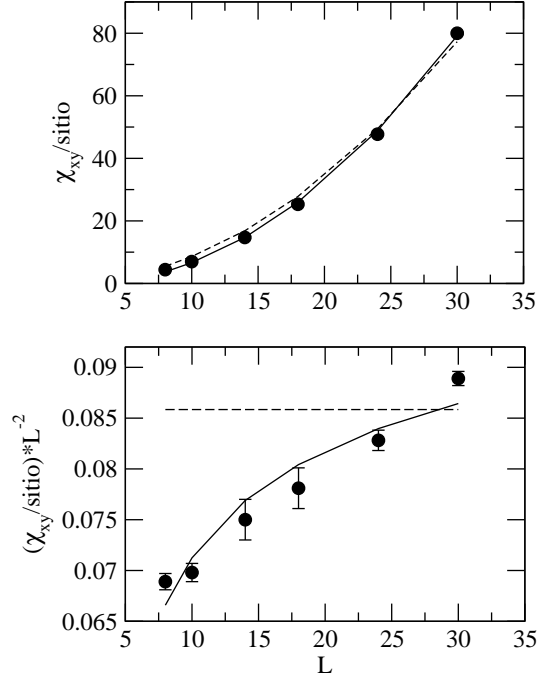


Figura 5.8: Análise de escala finita para a componente planar da susceptibilidade magnética. A função de escala teórica (Eq.(5.11)) se ajusta satisfatoriamente aos pontos obtidos através das simulações, mas a correção logarítmica é fundamental, como mostrado em (b)(vide texto). Nessa análise, $\gamma/\nu = 2$, valor esperado para o ponto tricrítico. Em (a), as barras de erro são menores que o tamanho dos símbolos. A linha contínua representa o melhor ajuste da função considerando-se a correção logarítmica, enquanto a linha tracejada é o ajuste desprezando-se essa correção.

de segunda ordem. As tabelas de energia e magnetização para o método do histograma foram obtidas com 10^6 MCS (após o equilíbrio ser atingido, descartando-se $200 \times L^2$ MCS.).

Para transições de segunda ordem

$$T_c(L) = T_c + \lambda L^{-1/\nu}, \quad (5.12)$$

onde $T_c(L)$ é a temperatura crítica no tamanho finito L da rede, T_c é a temperatura crítica no limite termodinâmico e ν é o expoente crítico associado ao comprimento de correlação na criticalidade.

Em transições de primeira ordem, não há expoentes críticos, e a grandeza associada às leis de escala é a dimensionalidade d do sistema (no nosso caso,

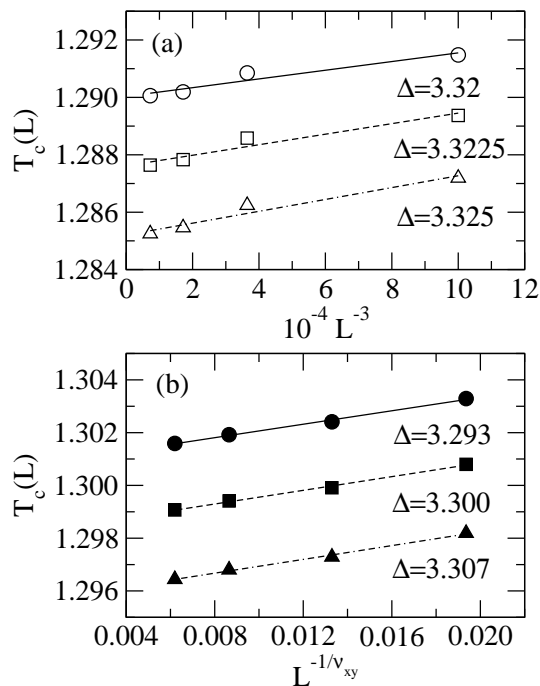


Figura 5.9: Análise de escala finita para alguns pontos sobre as linhas (a) de primeira e (b) segunda ordem na vizinhança do ponto tricrítico. As linhas representam a curva de melhor ajuste dos dados, de acordo com as Eqs. (5.12) e (5.13). As barras de erro são menores que os símbolos.

$d = 3$)

$$T_c(L) = T_c + \lambda L^{-d}, \quad (5.13)$$

onde $T_c(L)$ é a temperatura de transição no tamanho finito L da rede, T_c é a temperatura de transição no limite termodinâmico.

A análise de escala para a temperatura para cada um dos pontos estudados está mostrada na Fig. 5.9, onde utilizamos os valores esperados para os respectivos expoentes (a dimensão do sistema (primeira ordem) e $\nu_{xy} = 0,669$ [14] para o modelo XY em três dimensões).

A partir dos pontos obtidos da análise de escala de tamanho finito, construímos a ampliação do diagrama de fases na vizinhança do ponto tricrítico, no limite termodinâmico, mostrada na Fig. 5.10. Como podemos verificar para a vizinhança do ponto tricrítico, o diagrama de fases obtido para $L = 10$ (Fig. 5.3), é qualitativamente equivalente ao obtido no limite termodinâmico.

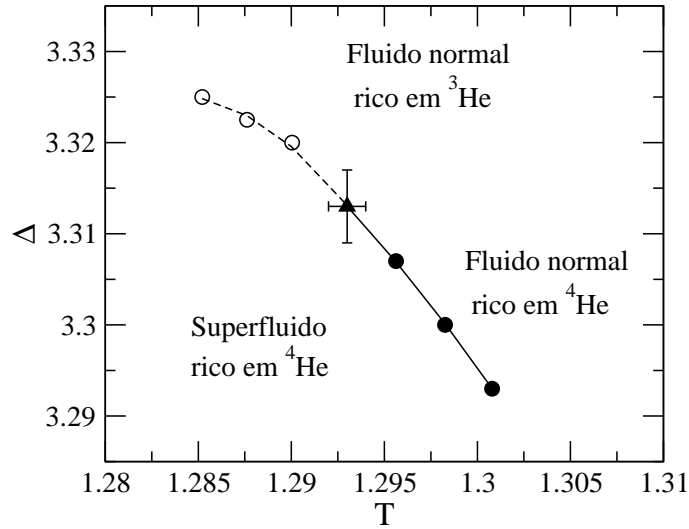


Figura 5.10: Diagrama de fases na vizinhança do ponto tricrítico. Os pontos apresentados foram obtidos para $L \rightarrow \infty$. Os círculos abertos e fechados representam pontos de transição de primeira e segunda ordem, respectivamente. As linhas são apenas para auxiliar a leitura dos gráficos. As barras de erro são menores que os símbolos, exceto para o ponto tricrítico (triângulo fechado).

Acreditamos que essa equivalência se verifique para todo o diagrama.

A distribuição de probabilidades do parâmetro de ordem foi utilizada também para verificar a ordem das transições de fase. A transição de primeira ordem é caracterizada por uma distribuição bimodal, associada aos estados metaestáveis, e a transição de segunda ordem apresenta um único pico (Fig. 5.11). A análise da distribuição de probabilidades foi importante também para determinar a faixa de validade da extrapolação executada pelo método do histograma.

5.2.2 $K < 1$

Como já citamos anteriormente, trabalhamos até então com um parâmetro de interação química entre isótopos $K = 1$. Estudamos também o sistema utilizando outros valores para esse parâmetro, observando a topologia do diagrama de fases, a temperatura e a concentração de átomos de ${}^3\text{He}$ no ponto

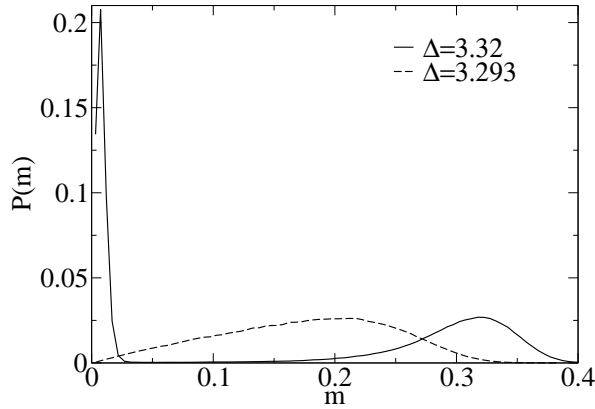


Figura 5.11: Distribuição de probabilidades da magnetização planar para as transições de primeira ($\Delta = 3.32$, $T = 1,29145$; linha contínua) e segunda ordem ($\Delta = 3,293$, $T = 1,30190$; linha tracejada). Resultados para $L = 24$.

tricrítico. As simulações foram realizadas utilizando-se $L = 10$ e os resultados obtidos estão sumarizados na Fig. 5.12 e na Tabela 5.1. Os valores de temperatura e concentração de ${}^3\text{He}$ obtidos são valores preliminares, dado que a localização do ponto tricrítico não foi determinada de maneira tão precisa como fizemos para $K = 1$. Os resultados, entretanto, mesmo preliminares, revelam que, com a redução do parâmetro K , ocorre um aumento na concentração de átomos de ${}^3\text{He}$ e uma redução da temperatura tricrítica, possibilitando uma melhor adequação desses valores àqueles obtidos experimentalmente. É interessante observar também que, para todos os valores de K estudados, à medida que Δ diminui, a temperatura crítica do sistema tende para aquela do modelo XY em três dimensões. Esse comportamento é esperado, pois, quanto menor o valor do parâmetro Δ , maior o valor do potencial químico μ_4 (para partículas de ${}^4\text{He}$) em relação ao potencial químico μ_3 (associado a partículas de ${}^3\text{He}$), o que tende a suprimir a ocorrência de partículas de ${}^3\text{He}$ (não-magnéticas).

5.2.3 $K=1,3$

Os resultados anteriores revelam que, na faixa $-1 \leq K \leq 1$, o modelo estudado reproduz satisfatoriamente a topologia do diagrama de fases para

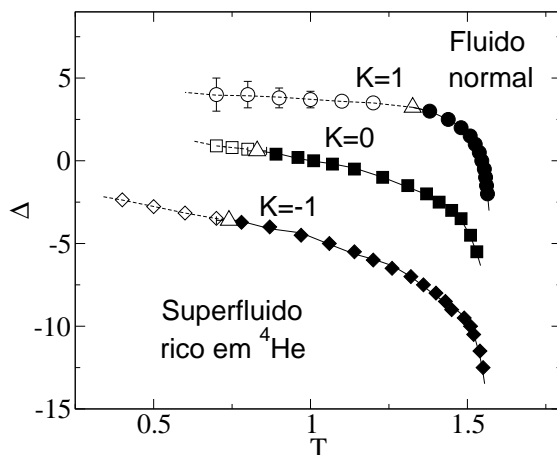


Figura 5.12: Diagrama de fases ($L = 10$) para diferentes valores do parâmetro K . Para os valores apresentados, o diagrama de fases conserva a mesma topologia do diagrama de fases de misturas de ${}^3\text{He}$ - ${}^4\text{He}$. Os símbolos abertos (linhas tracejadas) representam transições de primeira ordem e, os símbolos fechados (linhas contínuas), transições de segunda ordem. O ponto tricrítico para cada valor do parâmetro K é indicado por um triângulo aberto. As linhas de transição de segunda ordem se estendem em direção à temperatura crítica do modelo XY em três dimensões quando $\Delta \rightarrow \infty$ (veja texto). As linhas são apenas para auxiliar a leitura dos gráficos.

misturas de ${}^3\text{He}$ - ${}^4\text{He}$. Para $K \gtrsim 1$, entretanto, esse fato não mais se verifica, pois o diagrama de fases se altera substancialmente, como observamos para $K=1,3$. O ponto tricrítico desaparece e a linha de segunda ordem termina em um ponto sobre a linha de primeira ordem (chamado de ponto crítico terminal). Essa linha de primeira ordem se estende até sua extinção em um

	$x_3(\%)$	T/T_S
Experimental	67	0,4
K=1	18(2)	0,8332(7)
K=0	40(8)	0,53(2)
K=-1	35(8)	0,48(4)

Tabela 5.1: Valores de temperatura e concentração de ${}^3\text{He}$ no ponto tricrítico para diferentes valores do parâmetro K . Os valores experimentais são apresentados para comparação.

ponto crítico duplo terminal[§] (Fig 5.13). No ponto crítico terminal, coexistem uma fase normal rica em ${}^3\text{He}$ e uma outra, onde as fases normal rica em ${}^4\text{He}$ e superfluida se tornam iguais.

A localização aproximada do ponto crítico terminal é dada por $[\Delta_{ct}, T_{ct}] = [4, 18(5), 1, 42(1)]$, obtida facilmente pela extensão da linha de segunda ordem até bem próximo à linha de primeira ordem. A localização do ponto crítico duplo terminal, entretanto, é mais trabalhosa, e foi determinada em duas etapas, como descrito a seguir.

Localização preliminar do ponto crítico duplo terminal

A localização aproximada do ponto crítico duplo terminal foi obtida estudando-se o comportamento do parâmetro de ordem em função da temperatura. Na região do diagrama de fases considerada (onde há apenas fluido normal - veja a Fig. 5.13), o parâmetro de ordem pode ser definido como o salto Δx_3 na concentração de ${}^3\text{He}$ (ou equivalentemente de ${}^4\text{He}$) entre as fases separadas pela linha de transição de primeira ordem. Como ambas as fases se tornam iguais no ponto crítico duplo terminal, o ciclo de histerese observado ao se cruzar a linha de primeira ordem a uma temperatura fixa T deve estreitar-se em ambas as direções à medida em que T se aproxima do ponto crítico. Esse comportamento está ilustrado na Fig. 5.14. para alguns valores de temperatura.

O comportamento do parâmetro de ordem Δx_3 para várias temperaturas está mostrado na Fig. 5.15, para três diferentes tamanhos de rede L . O comportamento esperado para o parâmetro de ordem é

$$\Delta x_3 \sim (1 - T/T_c)^\beta, \quad (5.14)$$

onde β é o expoente crítico apropriado, cujo valor esperado é em torno de $1/3$. Esta é a função utilizada para o ajuste dos dados mostrados na Fig. 5.15, onde

[§]Muito embora esse ponto tenha sido historicamente algumas vezes chamado de ‘ponto bicrítico terminal’, o término de duas linhas de pontos críticos no diagrama de fases estendido (onde se inclui um campo externo adicional) é mais apropriadamente chamado de ponto crítico duplo terminal [47]

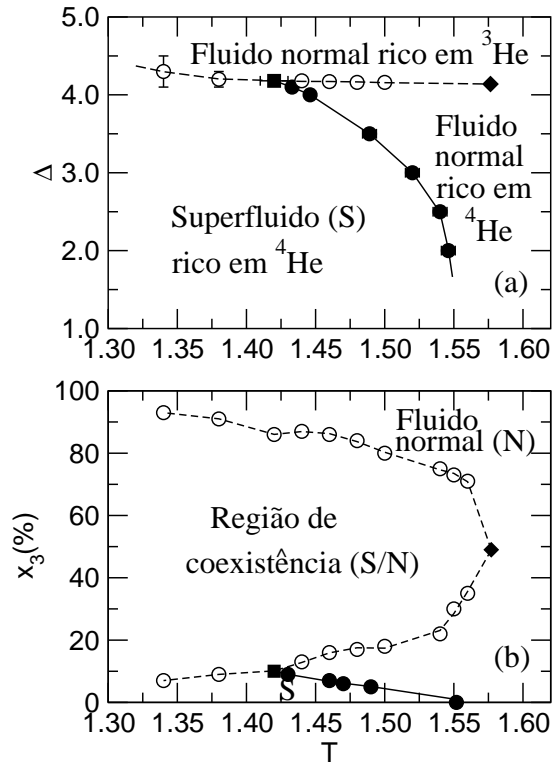


Figura 5.13: Diagrama de fases do modelo (a) no plano Δ - T e (b) no plano concentração-temperatura para $K=1,3$ e $L=10$. A linha de primeira ordem não termina no ponto tricrítico, mas se estende até sua extinção no ponto crítico duplo terminal, representado pelo losango. O ponto crítico terminal, por sua vez, é representado pelo quadrado. Os símbolos abertos (linha pontilhada) referem-se a transições de primeira ordem e, os símbolos fechados (linha contínua), a transições de segunda ordem. As barras de erro são da ordem ou menores que o tamanho dos símbolos. As linhas são apenas para auxiliar a leitura do diagrama. No ponto crítico terminal, $x_{3ct} = 10(1)\%$ e, no ponto crítico duplo terminal, $x_{3ct} = 49(1)\%$.

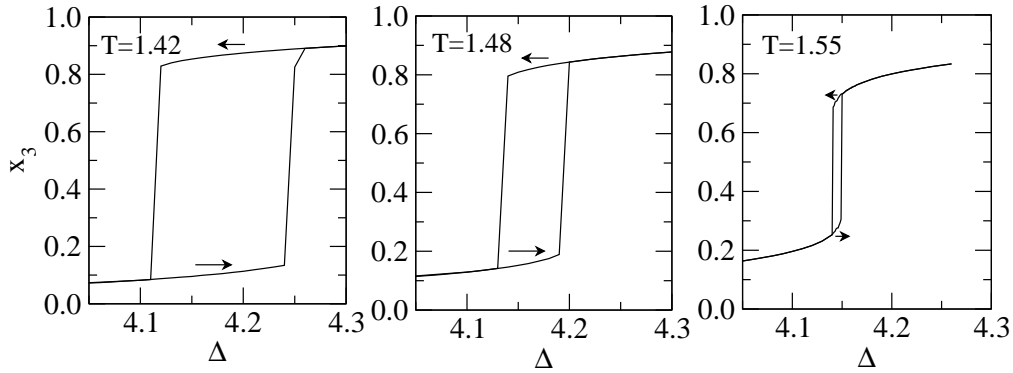


Figura 5.14: Ciclos de histerese ao longo da linha de primeira ordem ($K = 1, 3$). Observe que, quanto mais próximo do ponto crítico duplo terminal (localizado em $T \approx 1, 57$), mais estreito torna-se o ciclo. Resultados obtidos para $L = 30$.

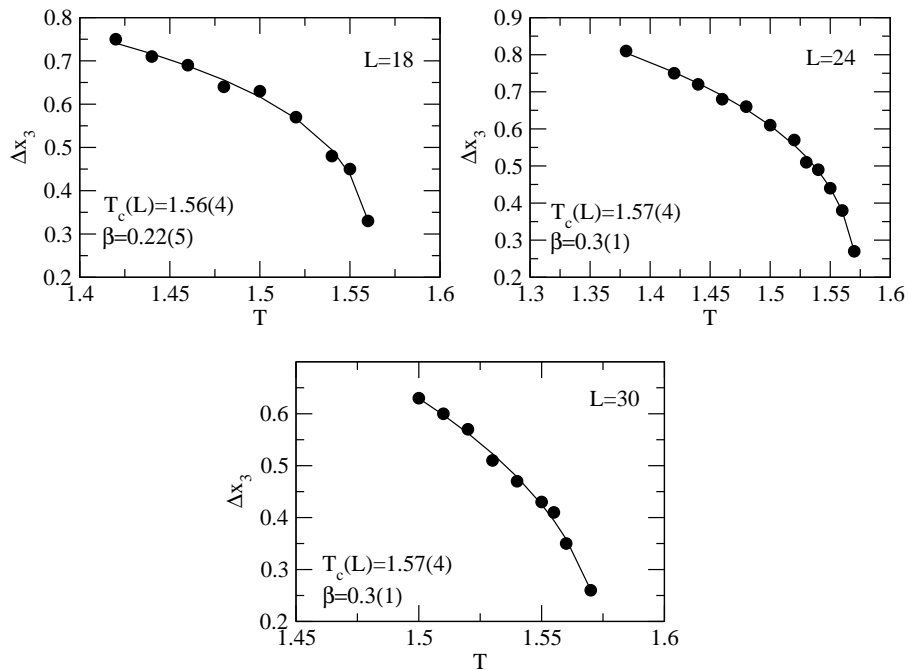


Figura 5.15: Comportamento do parâmetro de ordem Δx_3 em função da temperatura na vizinhança do ponto crítico duplo terminal. Os dados referem-se a três diferentes tamanhos de rede L . As linhas representam a curva de melhor ajuste dos dados para cada caso, de acordo com a Eq.(5.14).

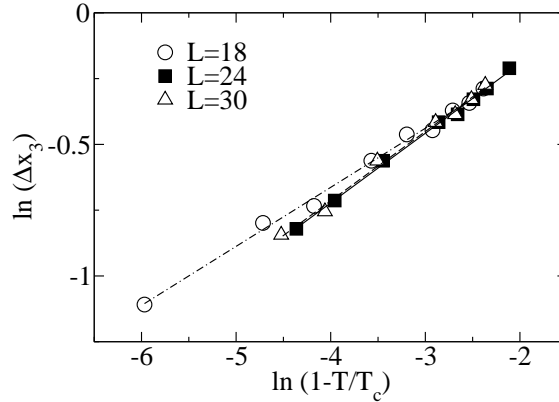


Figura 5.16: Comportamento do parâmetro de ordem Δx_3 em função da temperatura na vizinhança do ponto crítico duplo terminal. Linearização efetuada para verificar a qualidade da análise dos dados. As linhas representam a curva de melhor ajuste dos dados para cada caso, de acordo com a Eq.(5.14).

β e T_c são os parâmetros de ajuste. Essa análise não propiciou a precisão que desejávamos (não foi possível obter o comportamento de escala finita para a temperatura), mas forneceu uma estimativa preliminar para a localização do ponto crítico duplo terminal ($T \approx 1,57(4)$). Além disto, o valor obtido para o expoente β encontra-se dentro da faixa esperada, especialmente se considerarmos os resultados para as redes maiores ($L = 24$ e $L = 30$). Para $L = 18$, os efeitos de tamanho finito revelam-se ainda pronunciados. Isto fica claro na Fig. 5.16, onde apresentamos o ajuste dos dados linearizados. Para as redes maiores, observamos o colapso dos dados, o que indica o estabelecimento do regime de escala assintótico, o que ainda não ocorre para $L = 18$.

Localização mais precisa do ponto crítico duplo terminal

De posse da localização aproximada do ponto crítico duplo terminal, obtida pelo procedimento anterior, foi possível então determiná-lo com boa precisão através do estudo da distribuição de probabilidades associada ao parâmetro de ordem (veja a breve discussão sobre esse tema no Capítulo 3). Se soubermos a priori a classe de universalidade do ponto crítico que desejamos localizar, podemos ‘caminhar’ ao longo da linha de primeira ordem e obter

a distribuição de probabilidades do parâmetro de ordem até encontrarmos o ponto que apresente o comportamento universal esperado, de forma semelhante ao que fizemos para localizar o ponto tricrítico para $K = 1$. De fato, é esse o caso do ponto crítico considerado aqui. Na região do diagrama de fases onde há apenas fluido normal (veja a Fig.5.13), o parâmetro de ordem é essencialmente a concentração de partículas de ${}^3\text{He}$ (ou ${}^4\text{He}$) e o sistema se comporta como um *gás de rede* em três dimensões, que se encontra na mesma classe de universalidade do modelo de Ising tridimensional. Nesse caso, a distribuição de probabilidades correspondente já foi obtida através de extensas simulações Monte Carlo [48].

Devido à assimetria entre as fases envolvidas, precisamos aplicar, nesse caso, o método de mistura de campos (apresentada no Capítulo 3). Recordando o que foi discutido, através dessa técnica, podemos obter a distribuição universal $P_L^*(\mathcal{D})$, que depende somente dos parâmetros do hamiltoniano T e Δ e do fator de mistura de campos s . Assim ajustando esses três parâmetros, com o auxílio do método do histograma bidimensional (para extrapolar a distribuição simultaneamente em T e Δ), podemos colapsar $P_L^*(\mathcal{D})$, para vários tamanhos de rede, sobre a distribuição de probabilidades universal previamente computada para o modelo de Ising tridimensional. Realizando simulações com 3 a 6 milhões de MCS para redes de tamanho $12 \leq L \leq 24$, armazenamos uma tabela de E e Q da qual obtemos a distribuição $P_L^*(\mathcal{D})$. Foi possível então obtermos o valor dos parâmetros T , Δ e s para cada tamanho L de rede utilizado, no ponto pseudocrítico $T_c(L)$.

O colapso das distribuições de probabilidade está mostrado na Fig. 5.17 e apresentamos também, na Tabela 5.2, o valor dos parâmetros empregados para cada tamanho de rede. Como podemos verificar na Tabela 5.2, o grau s de mistura de campos é muito baixo, mas foi importante considerá-la para que obtivéssemos o melhor colapso das distribuições de probabilidade. Observamos também que, de modo geral, o fator s depende do tamanho da rede estudada. Em nosso caso, no entanto, coincidentemente, o valor desse parâmetro, dentro da precisão utilizada, foi o mesmo para todas as redes.

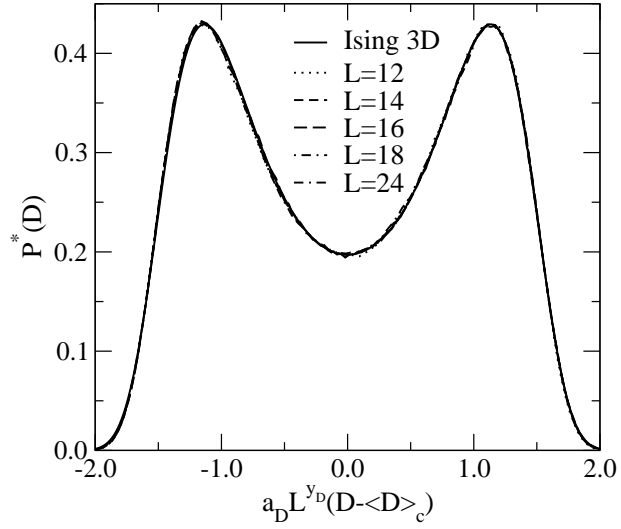


Figura 5.17: Distribuição universal de probabilidades para o ponto crítico duplo terminal ($K = 1, 3$).

L	T	Δ	s
12	1,5759(1)	4,13883(1)	-0,1(1)
14	1,5755(1)	4,13885(1)	-0,1(1)
16	1,5752(1)	4,13889(1)	-0,1(1)
18	1,5750(1)	4,13888(1)	-0,1(1)
24	1,5747(1)	4,13899(1)	-0,1(1)

Tabela 5.2: Parâmetros utilizados para a distribuição $P_L^*(\mathcal{D})$.

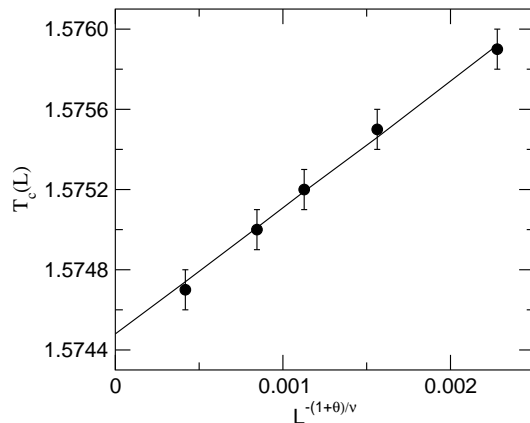


Figura 5.18: Análise de escala finita para o ponto crítico duplo terminal encontrado para $K = 1, 3$. Os valores usados para os expoentes θ e ν são os correspondentes para o modelo de Ising tridimensional.

A alta qualidade do colapso das distribuições permite-nos concluir que o ponto crítico duplo terminal pertence de fato à classe de universalidade do modelo de Ising em três dimensões. A análise de escala finita para a temperatura nesse ponto também corrobora essa afirmação e é apresentada na Fig. 5.18, onde utilizamos os expoentes apropriados $\nu = 0,629$ e $\theta = 0,54$ para o modelo de Ising tridimensional [40]. A temperatura crítica encontrada, no limite termodinâmico, é $T_c = 1,5745(2)$ e $\Delta_c = 4,13899(4)$.

5.2.4 Distribuição de probabilidades para o parâmetro de ordem: linha de segunda ordem

Pesquisamos também a distribuição universal de probabilidades que caracteriza a transição superfluida (linha de transição de segunda ordem). Nesse caso, espera-se que a classe de universalidade do modelo seja a mesma do modelo XY em três dimensões. Na Fig. 5.19, apresentamos as distribuições para três tamanhos de rede distintos. A universalidade da distribuição é reforçada pelo fato de que cada trio de curvas corresponde a diagramas de fase distintos (para $K = 1$ e $K = 1, 3$). Nesse caso, os parâmetros usados foram $K = 1, \Delta = -2, T_c(\infty) = 1,5448$ e $K = 1, 3, \Delta = 3, 5, T_c(\infty) = 1,4755$. A

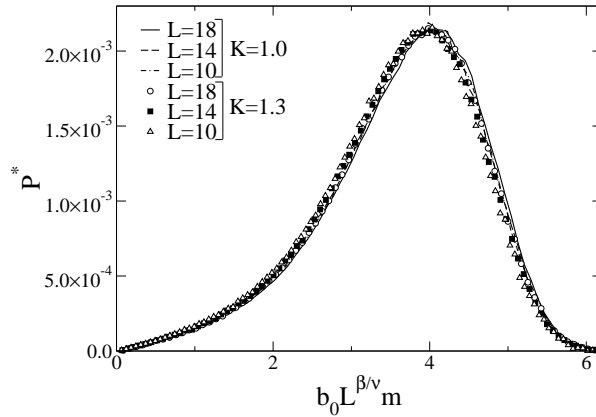


Figura 5.19: Distribuição universal de probabilidades para a linha de transições de segunda ordem do modelo vetorial de Blume-Emery-Griffiths - versão XY. Resultados para três diferentes tamanhos de rede.

temperatura crítica foi obtida através da análise de escala finita para os três tamanhos de rede estudados, apresentada na Fig. 5.20. A temperatura pseudocrítica $T_c(L)$ para cada tamanho de rede foi obtida através de simulação preliminar e posterior refinamento empregando-se, mais uma vez, o método do histograma. A temperatura usada para $K = 1, 3$ difere um pouco (0,08% abaixo) daquela obtida através da análise de escala finita (onde $T_c = 1, 4767$, Fig. 5.20), de modo a obtermos um melhor colapso (o valor obtido para para T_c no limite termodinâmico não é muito acurado, pois apenas três tamanhos de rede pequenos foram utilizados). Os resultados são apresentados apenas a título de ilustração, sendo ainda preliminares. Uma análise mais precisa requer tamanhos de rede maiores, o que levaria à determinação mais acurada da temperatura crítica no limite termodinâmico e melhoraria o colapso das curvas de distribuição de probabilidades. De fato, para $L = 18$, maior tamanho de rede estudado, o colapso já se torna melhor em relação ao obtido para redes menores (Fig. 5.21).

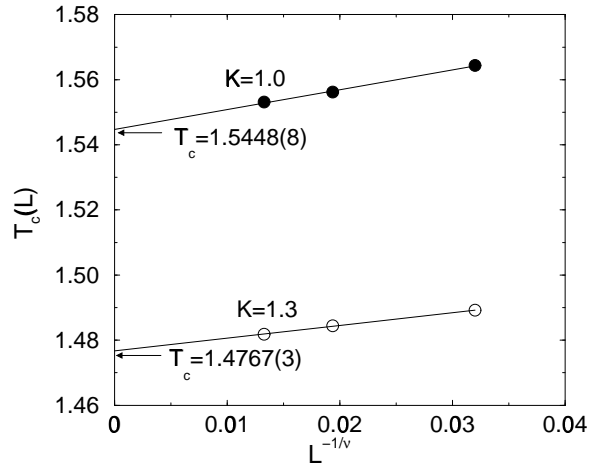


Figura 5.20: Análise preliminar de escala finita para os pontos considerados sobre a linha de transição de segunda ordem para $K = 1$, $\Delta = -2$ e $K = 1, 3$, $\Delta = 3, 5$. As linhas representam a curva de melhor ajuste dos dados, de acordo com as Eq.(5.12). As barras de erro são menores que os símbolos.

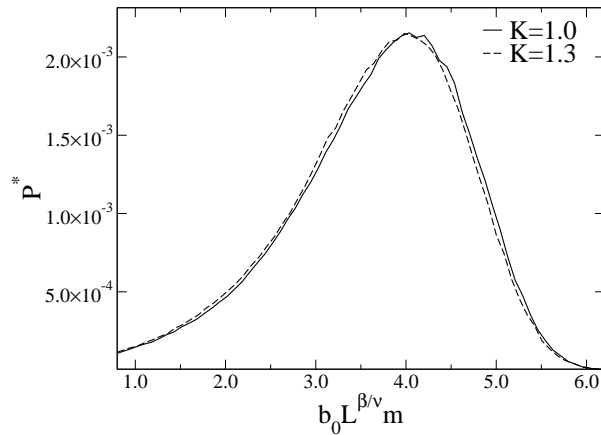


Figura 5.21: Distribuição universal de probabilidades para a linha de transições de segunda ordem do modelo vetorial de Blume-Emery-Griffiths - versão XY. Os resultados apresentados referem-se a $L = 18$.

5.2.5 Outro método para encontrar o ponto crítico duplo terminal?

A concentração de átomos de 3He encontrada para o ponto crítico duplo terminal é de $x_{3cdt} = 49(1)\%$, o que está de acordo com a previsão teórica, de $x_{3cdt} = 50\%$. Sabemos que, no ponto crítico duplo terminal, as duas fases envolvidas tornam-se iguais. Dessa forma, não há como distinguir entre ‘fase normal rica em 3He ’ e ‘fase normal rica em 4He ’, de modo que as concentrações tornam-se necessariamente iguais

$$x_3 = x_4, \quad (5.15)$$

onde $x_3 = (1/L^3) \sum_i^{L^3} [1 - S_i^2]$ e $x_4 = (1/L^3) \sum_i^{L^3} S_i^2$ representam, respectivamente, a concentração de átomos de 3He e 4He . Da forma que as definimos, a soma das concentrações

$$x_3 + x_4 = 1. \quad (5.16)$$

De ambas as equações acima, vem que $x_3 = x_4 = 0,5$. Esse fato inspira um outro método para localizar o ponto crítico duplo terminal. De posse da localização preliminar desse ponto (anteriormente obtida estudando-se o comportamento do parâmetro de ordem em função da temperatura), poderíamos então, com o auxílio do método do histograma bidimensional, investigar o diagrama de fases no plano (T, Δ) a fim de encontrar o ponto que forneça uma concentração de átomos de 3He (ou 4He) de 50%. A precisão na determinação desse ponto seria dada pela precisão com que fosse medida a concentração. Muito embora esse método não tenha a elegância da técnica de análise da distribuição universal de probabilidade associada ao parâmetro de ordem (além de não fornecer informação acerca da classe de universalidade do ponto estudado), cremos que ele possa, também, fornecer uma estimativa precisa do ponto crítico duplo terminal.

5.3 Conclusões

Obtivemos o diagrama de fases da versão XY do modelo vetorial de Blume-Emery-Griffiths e verificamos que ele reproduz a topologia do diagrama de fases de misturas de ${}^3\text{He}$ - ${}^4\text{He}$, para uma faixa de valores do parâmetro K ($K \lesssim 1$). O diagrama do modelo apresenta uma fase superfluida, rica em ${}^4\text{He}$, que sofre uma transição para uma fase normal, que pode ser de primeira ou segunda ordem. Para valores de Δ abaixo do ponto tricrítico, essa transição é de segunda ordem, separando a fase superfluida de uma fase normal, rica em ${}^4\text{He}$. Para valores de Δ acima do ponto tricrítico, a transição é de primeira ordem, entre as fase superfluida e uma fase normal, rica em ${}^3\text{He}$.

Para $K \gtrsim 1$, entretanto (como investigamos para $K = 1, 3$), o diagrama de fases se altera sensivelmente e não mais reproduz a topologia do diagrama de misturas de ${}^3\text{He}$ - ${}^4\text{He}$. O ponto tricrítico desaparece e a linha de transições de segunda ordem termina em um ponto crítico terminal sobre a linha de primeira ordem, a qual se estende até se extinguir em um ponto crítico duplo terminal. Os resultados desse estudo serão muito importantes para nosso estudo futuro acerca da dinâmica de spins do modelo.

Capítulo 6

Conclusões e perspectivas

6.1 Modelo de Heisenberg anisotrópico submetido a um campo cristalino

Estudamos o diagrama de fases do modelo através de simulações Monte Carlo. Observamos que, para $A = 1$, esse diagrama possui uma estrutura bastante rica, apresentando, além da fase trivial desordenada a altas temperaturas, duas fases ordenadas a baixas temperaturas. Para baixos valores do parâmetro D , manifesta-se a fase tipo Ising, que é separada da fase XY, que ocorre para valores mais altos de D , por uma linha de transição de primeira ordem. Ambas as fases ordenadas sofrem transição de segunda ordem para a fase desordenada e as duas linhas de transição de segunda ordem e a de primeira ordem terminam em um ponto bicrítico, cuja localização aproximada é dada por $[T_b, D_b] = [1, 73(3), 3, 95(4)]$.

Topologia semelhante é esperada para outros valores do parâmetro A , com o deslocamento do ponto bicrítico para valores mais baixos de T e D à medida que A diminui. Por exemplo, para $A = 0,5$, encontramos um diagrama de fases com a mesma topologia descrita, com o ponto bicrítico localizado agora em $[T_b, D_b] = [1, 68(4), 2, 00(3)]$.

Desejamos, agora, localizar com mais precisão o ponto bicrítico obtido para os valores de A estudados. Para isto, analisaremos a distribuição

do parâmetro de ordem, como já fizemos para o modelo de Blume-Emery-Griffiths. Em acordo com uma sugestão do Prof. Landau, suspeitamos que o ponto bicrítico pertença à classe de universalidade do modelo de Heisenberg tridimensional, já que, assim sendo, o parâmetro de ordem nesse ponto seria a magnetização nas três dimensões, que poderia tanto degenerar-se no parâmetro de ordem unidimensional tipo Ising, quanto no bidimensional tipo XY, de acordo com a faixa de D considerada, numa espécie de ‘ponte’ entre ambas as simetrias do parâmetro de ordem.

6.2 Modelo vetorial XY de Blume- Emery- Griffiths

Estudamos o diagrama de fases para a versão XY do modelo vetorial de Blume-Emery-Griffiths através de simulações de Monte Carlo. Esse modelo reproduz satisfatoriamente a topologia do diagrama de fases obtido experimentalmente para misturas de ${}^3\text{He}$ - ${}^4\text{He}$ para uma faixa de valores do parâmetro K ($K \lesssim 1$). Esse diagrama de fases revela uma linha de transições de segunda ordem, que é substituída por uma linha de primeira ordem no ponto tricrítico $[\Delta_t, T_t]$. Para $\Delta < \Delta_t$, o sistema exibe uma fase superfluida, rica em ${}^4\text{He}$, que sofre uma transição de segunda ordem para uma fase normal, rica em ${}^4\text{He}$. Para valores de Δ acima do ponto tricrítico, a fase superfluida, rica em ${}^4\text{He}$, sofre uma transição de primeira ordem para uma fase normal, cuja concentração de ${}^3\text{He}$ cresce gradualmente à medida em que o sistema se afasta do ponto tricrítico.

O ajuste do parâmetro K permite o ajuste da concentração de átomos de ${}^3\text{He}$ no ponto tricrítico, bem como da temperatura tricrítica, de modo que é possível aproximar o valor desses parâmetros dos respectivos valores experimentais, tornando o modelo um pouco mais realístico.

Para valores de K pouco acima de $K = 1$, entretanto (no caso, $K = 1, 3$), o diagrama de fases muda substancialmente, não mais reproduzindo a topologia do diagrama de fases de misturas de ${}^3\text{He}$ - ${}^4\text{He}$. O ponto tricrítico

desaparece, cedendo lugar ao ponto crítico terminal. A linha de transição de primeira ordem se estende até sua extinção, no ponto crítico duplo terminal. Essa topologia foi prevista pela teoria de campo médio. Sua observação, entretanto, através de simulações Monte Carlo, tem sido notoriamente difícil.

Os resultados obtidos são fundamentais para nosso estudo subsequente da dinâmica de spins do modelo, cujos resultados contribuirão para a melhor compreensão de características dinâmicas de misturas de hélio, como a sua condutividade térmica.

Bibliografia

- [1] Sílvio R. Salinas, *Introdução à Física Estatística* (Editora da Universidade de São Paulo, São Paulo, 1999).
- [2] N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, A. H. Teller, *J. Chem. Phys.* **21** 1087 (1953).
- [3] D.P. Landau e Kurt Binder, *A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics* (Cambridge University Press, Cambridge, 2000).
- [4] M.E.J. Newman e G.T. Barkema, *Monte Carlo Methods in Statistical Physics* (Clarendon, Oxford, 1999).
- [5] B. V. Costa e A. S. T. Pires, *J. Mag. Mag. Mat.* **262**(2), 316 (2003).
- [6] R. van de Kamp, M. Steiner e H. Tietze-Jaensh, *Physica B* **241-243**, 570 (1998).
- [7] D. Hinzke e U. Nowak, *Phys. Rev. B* **58**(1), 265 (1998).
- [8] J. Ricardo de Sousa e J. A. Plascak, *Phys. Lett. A* **237**, 66 (1997).
- [9] A. Mailhot, M. L. Plumer e A. Caillé, *Phys. Rev. B* **48**, 15835 (1993).
- [10] Luciano Ribeiro, Dissertação de Mestrado (Goiânia, 2002).
- [11] Kun Chen, Alan M. Ferrenberg e D. P. Landau, *Phys. Rev. B* **48**, 1 3249 (1993).

- [12] J. A. Lipa, D. R. Swanson, J. A. Nissen, T. C. P. Chui e U. E. Israelsson, *Phys. Rev. Lett.* **76** 944 (1996).
- [13] T. Matsubara e H. Matsuda, *Prog. Theor. Phys.* **16** 569 (1956).
- [14] M. Krech e D. P. Landau, *Phys. Rev. B* **60** 3375 (1999).
- [15] K. Nho e E. Manousakis, *Phys. Rev. B* **64** 144513 (2001).
- [16] E. H. Graf, D. M. Lee e John D. Reppy, *Phys. Rev Lett.* **19** 417 (1967).
- [17] H. A. Kierstead, *J. Low Temp. Phys.* **35** 25 (1979).
- [18] M. Blume, J. V. Emery e R. B. Griffiths, *Phys. Rev. A* **4** 1071 (1971).
- [19] A. N. Berker e D. R. Nelson, *Phys. Rev. B* **19** 2488 (1979).
- [20] J. L. Cardy e D. J. Scalapino, *Phys. Rev. B* **19** 1428 (1979).
- [21] A. Maciolek, M. Krech e S. Dietrich, *Phys. Rev. E* **69** 036117 (2004).
- [22] H. Eugene Stanley, *Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena* (Oxford University Press, New York, 1987).
- [23] I. D. Lawrie e S. Sarbach, *Phase Transitions and Critical Phenomena*, editado por C. Domb e J. L. Lebowitz (Academic Press, London, 1984), Vol. 9.
- [24] B. J. Widom, *J. Chem. Phys.* **43**, 3892, 3898 (1965).
- [25] M. E. Fisher, *Critical Phenomena*, editado por M. S. Green, (Academic Press, New York, 1971).
- [26] L. M. Castro, Dissertação de Mestrado (Belo Horizonte, 1999).
- [27] G. Marsaglia, *Ann. Math. Stat.* **43** 645 (1972).
- [28] U. Wolff, *Phys. Rev. Lett.*, **62** 361 (1989).

- [29] S. G. Pawig e K. Pinn, *arXiv:cond-mat* 9807137 (1998); S. G. Pawig e K. Pinn, *J. Mod. Phys. C*, **9**, 727 (1998).
- [30] M. Creutz, *Phys. Rev. D* **36** 515 (1987).
- [31] J. A. Plascak, A. M. Ferrenberg e D. P. Landau, *Phys. Rev. E* **65**, 066702 (2002).
- [32] R. H. Swendsen e J.-S. Wang, *Phys. Rev. Lett.* **58**, 86 (1987).
- [33] A. M. Ferrenberg, D. P. Landau e Y. J. Wong, *Phys. Rev. Lett.* **69**, 3382 (1992).
- [34] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, *Numerical Recipes in Fortran 77* (Cambridge University Press, New York, 1992), Vol. 1, 2. ed.
- [35] A. M. Ferrenberg e R. H. Swendsen, *Phys. Rev. Lett.* **61**, 2635 (1988); A. M. Ferrenberg *Computer Simulation Studies in Condensed Matter Physics III*. Springer Proceedings in Physics, **53** (Springer-Verlag, Heidelberg, 1991).
- [36] K. Binder, *Z. Phys. B* **43** 119 (1981).
- [37] A. D. Bruce, *J. Phys. C: Solid State Phys.***14**, 3667 (1981).
- [38] P. H. L. Martins e J. A. Plascak, *Braz. J. Phys.* **34** 433 (2004).
- [39] N. B. Wilding e A. D. Bruce, *J. Phys. Condens. Matter* **4**, 3087 (1992).
- [40] N. B. Wilding, *Phys. Rev. E* **52**, 602 (1995).
- [41] J. Adler e I. G. Enting, *J. Phys. A***17**, L275 (1984).
- [42] J. A. Plascak e D. P. Landau, *Phys. Rev. E* **67**, 015103(R) (2003).
- [43] W. Janke e H. Kleinert, *Nucl. Phys. B* **270** 135 (1986).
- [44] Kun Chen, Tese de Doutorado (Athens, EUA, 1993).

- [45] H. J. Herrmann, E. B. Rasmussen e D. P. Landau, *J. Appl. Phys.* **53**, 7994 (1982).
- [46] J. D. Kimel, S. Black, P. Carter e Y.-L. Wang, *Phys. Rev. B* **35**, 3347 (1987).
- [47] M. E. Fisher (Comunicação particular a D. P. Landau).
- [48] M. M. Tsy-pin e H. W. J. Blöte, *Phys. Rev. E* **62**, 73 (2000).

Apêndice A

O modelo de Heisenberg anisotrópico submetido a um campo cristalino a temperatura zero

O modelo de Heisenberg anisotrópico submetido a um campo cristalino pode ser descrito pelo hamiltoniano

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - A \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^z S_j^z + D \sum_i (S_i^z)^2, \quad (\text{A.1})$$

com spins localizados, no nosso caso, numa rede cúbica simples, como apresentado no Cap. 1.

A temperatura zero, o estado de equilíbrio do sistema é dado pela configuração de menor energia, onde não há flutuações e os spins encontram-se alinhados devido às interações de troca.

Para determinar a configuração de menor energia, escrevamos algumas delas que sejam possíveis candidatas:

$$\begin{aligned} \frac{\mathcal{H}_{\uparrow\uparrow}}{JN} &= -3 - \frac{3A}{J} + \frac{D}{J}, \\ \frac{\mathcal{H}_{\uparrow\downarrow}}{JN} &= 3 + \frac{3A}{J} + \frac{D}{J}, \end{aligned}$$

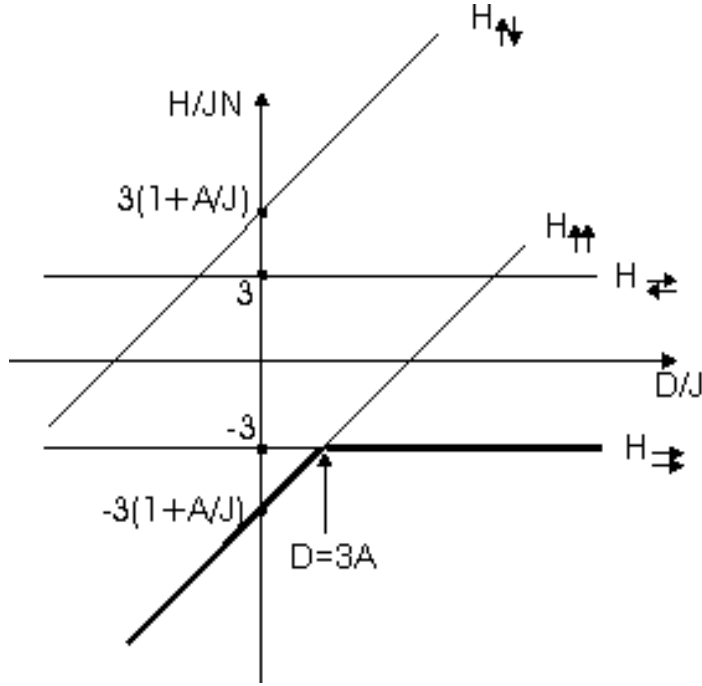


Figura A.1: Esboço da energia em função do parâmetro D para configurações representativas em $T = 0$. Note a transição de primeira ordem em $D = 3A$ entre as fases tipo Ising e tipo XY.

$$\frac{\mathcal{H}_{\vec{\uparrow}}}{JN} = -3,$$

$$\frac{\mathcal{H}_{\vec{\leftarrow}}}{JN} = 3,$$

onde $\uparrow\uparrow$ ($\uparrow\downarrow$) representa spins paralelos (anti-paralelos) na direção z ; $\vec{\uparrow}$ ($\vec{\leftarrow}$) representa spins paralelos (anti-paralelos) alinhados no plano xy .

Representando graficamente essas energias como função do parâmetro D , com A fixo, fica claro o comportamento do sistema a temperatura nula (Fig. A.1). Para $D < 3A$, o sistema encontra-se na fase tipo Ising, onde todos os spins se alinham paralelamente à direção z . Para $D > 3A$, o sistema encontra-se na fase tipo XY, onde os spins se alinham paralelos no plano xy .

Apêndice B

O modelo vetorial XY de Blume-Emery-Griffiths a temperatura zero

O hamiltoniano do modelo vetorial XY de Blume-Emery-Griffiths pode ser escrito:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} [S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y] - K \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^z S_j^z + \Delta \sum_i (S_i^z)^2, \quad (\text{B.1})$$

onde, no nosso caso, os spins encontram-se localizados numa rede cúbica simples, como apresentado no Cap. 1. A temperatura zero, o estado de equilíbrio do sistema é dado pela configuração de menor energia, onde não há flutuações e os spins encontram-se alinhados devido à interação de troca (configurações com spins não-alinhados elevam a energia).

Uma das possíveis configurações de equilíbrio é a que apresenta somente partículas de spin 1 (átomos de ${}^4\text{He}$), alinhados paralelamente no plano xy , cuja energia é

$$\frac{\mathcal{H}_N}{N} = -3(J + K) + \Delta. \quad (\text{B.2})$$

Uma outra configuração plausível no equilíbrio é aquela em que toda a rede é preenchida por átomos de ${}^3\text{He}$, representados por partículas de spin zero,

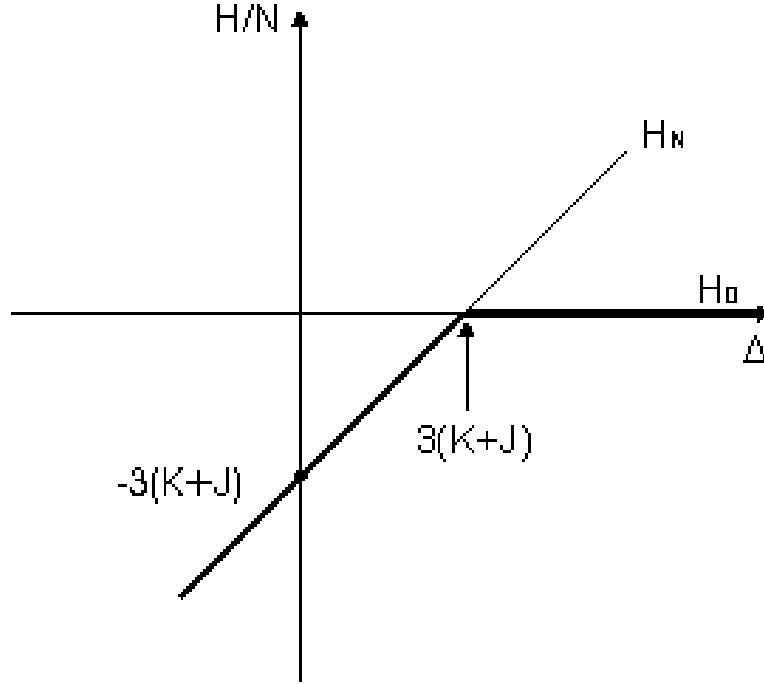


Figura B.1: Esboço do comportamento da energia a temperatura zero para o modelo vetorial XY de Blume-Emery-Griffiths. Note a transição de primeira ordem que ocorre em $\Delta > 3(J + K)$ entre as fases superfluida (de ${}^4\text{He}$ puro) e normal (de puro ${}^3\text{He}$).

de energia

$$\mathcal{H}_0 = 0. \quad (\text{B.3})$$

Representando graficamente as energias dadas pelas Eqs. (B.2) e (B.3) como função do parâmetro Δ , com K fixo, fica claro o comportamento do sistema a temperatura nula (Fig. A.1). Para $\Delta < 3(J + K)$, revela-se a fase superfluida, constituída unicamente de átomos de ${}^4\text{He}$ e, para $\Delta > 3(J + K)$, aparece uma fase normal, de ${}^3\text{He}$ puro. Para $J = K = 1$, temos, então, que a transição de primeira ordem se dá em $\Delta = 6$.

Observação

Outras configurações apresentam energia intermediária entre as apresentadas, de modo que não afetam a análise acima. Por exemplo, consideremos toda a rede ocupada por spins alinhados no plano xy , exceto por um

sítio, ocupado por uma partícula de spin zero. Nesse caso, a energia dessa configuração de $N - 1$ partículas de spin 1, é dada por

$$\mathcal{H}_{N-1} = -3(N - 1)(J + K) + \Delta(N - 1).$$

Para que uma configuração como essa seja a de equilíbrio, deve ter energia menor que \mathcal{H}_N (para $\Delta < 3(J + K)$) ou \mathcal{H}_0 (para $\Delta > 3(J + K)$). Vejamos se isto ocorre.

Para $\mathcal{H}_{N-1} < \mathcal{H}_N$, temos que $\Delta > 3(J + K)$. Nessa região, entretanto, essa configuração tem energia maior que $\mathcal{H}_0 = 0$ e, portanto, não pode ser a configuração de equilíbrio do sistema. Situação análoga ocorre se introduzirmos mais partículas não-magnéticas na rede.

Por outro lado, consideremos agora toda a rede ocupada por zeros, exceto por um único sítio e seus respectivos seis primeiros vizinhos. A energia dessa configuração, que apresenta 7 spins alinhados no plano xy , é dada por

$$\mathcal{H}_7 = -6(J + K) + 7\Delta,$$

Analisemos a possibilidade de essa configuração ser mais estável que as duas consideradas na Fig. B.1. Para $\mathcal{H}_7 < \mathcal{H}_N$, temos que

$$\Delta > \frac{3 - 6/N}{1 - 7/N}(J + K)$$

que, no limite de N grande, torna-se

$$\Delta > 3(J + K).$$

Entretanto, verificamos que nessa região, essa configuração tem energia maior que $\mathcal{H}_0 = 0$, não sendo, portanto configuração de equilíbrio. A inclusão de mais partículas de spin 1 resultaria em análise semelhante.

Portanto as configurações representativas da situação de equilíbrio são, de fato, as de energia dada pelas Eqs.(B.2) e (B.3), representadas na Fig. B.1.

Apêndice C

Teoria de Landau para o Ponto Tricrítico

Para a descrição fenomenológica do ponto tricrítico pela teoria de Landau, é necessário considerar a expansão da energia livre Φ até o termo de sexta ordem.

$$\Phi = \Phi_0 + \frac{1}{2}A\psi^2 + \frac{1}{4!}B\psi^4 + \frac{1}{6!}C\psi^6. \quad (\text{C.1})$$

O primeiro termo Φ_0 constitui a parte regular da energia livre e supõe-se que os coeficientes A , B e C sejam, na vizinhança das transições de fases, funções analíticas da temperatura T e dos demais parâmetros do hamiltoniano (no caso do modelo vetorial de Blume-Emery-Griffiths, dos parâmetros K e Δ). O coeficiente C deve ser positivo para garantir a estabilidade termodinâmica.

Para encontrar os mínimos da energia livre (estados de equilíbrio do sistema), uma condição necessária é

$$\frac{\partial\Phi}{\partial\psi} = A\psi + \frac{1}{3!}B\psi^3 + \frac{1}{5!}C\psi^5 = 0. \quad (\text{C.2})$$

As soluções da Eq.(C.2) são dadas por

$$\psi_0 = 0 \quad (C.3)$$

$$\psi_{1,2} = \pm \left\{ \frac{10}{C} \left[+ \sqrt{B^2 - \frac{6}{5}AC - B} \right] \right\}^{1/2} \quad (C.4)$$

$$\psi_{3,4} = \pm \left\{ \frac{10}{C} \left[- \sqrt{B^2 - \frac{6}{5}AC - B} \right] \right\}^{1/2} \quad (C.5)$$

Consideremos, primeiramente, $A, B > 0$. Nesse caso, não é difícil mostrar que a única solução real é $\psi_0 = 0$, o que representa um mínimo de Φ e corresponde à fase desordenada do sistema.

Para $A < 0$ e $B > 0$, por outro lado, $\psi = 0$ representa um máximo local da energia livre Φ e, analisando-se as demais soluções, conclui-se que $\psi_{1,2}$ são também soluções reais e mínimos da energia livre Φ . Assim, existe então um par de estados ordenados que coexistem, dados por $\psi_{1,2}$. É importante observar que, fazendo $r \rightarrow 0$, as duas raízes $\psi_{1,2}$ se aproximam continuamente de zero. Portanto, a linha $r = r_\lambda(B) = 0$, $B > 0$ pode ser identificada como uma linha de pontos críticos, que denominaremos linha lambda L_λ , no plano (A, B) , mostrado na Fig.C.1.

Consideremos, agora, $B < 0$. Para $A < 0$, as soluções reais da Eq. C.2 são novamente dadas por ψ_0 (Eq.(C.3)) e $\psi_{1,2}$ (Eq.(C.4)). Nesse caso, entretanto, observamos que $\psi_0 = 0$ é um máximo da energia livre, enquanto que $\psi_{1,2}$ são mínimos de Φ . Assim, para $A < 0$, o sistema encontra-se na fase ordenada.

Para $B < 0$ e $A > 0$, por outro lado, a solução $\psi_0 = 0$ torna-se um mínimo da energia livre e todas as demais soluções $\psi_{1,2}$ e $\psi_{3,4}$ são soluções reais da Eq.(C.2) para $A < \frac{5B^2}{6C}$. É fácil mostrar que ocorre um ponto de inflexão na função energia livre para $A = \frac{5B^2}{6C}$. Dessa forma, variando o valor de A desde valores negativos até $A = \frac{5B^2}{6C}$, podemos concluir que, nessa faixa, as soluções $\psi_{1,2}$ são também mínimos de Φ (já que a mudança na concavidade somente ocorre em $A = \frac{5B^2}{6C}$). Por considerações topológicas, se ocorrem três mínimos, é necessário que haja dois máximos, que são dados então pelas soluções $\psi_{3,4}$. À medida que A cresce, os estados ordenados, dados pelas

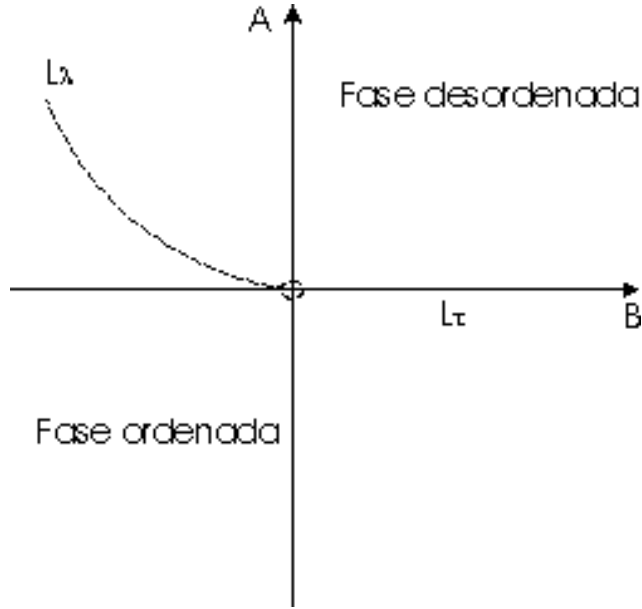


Figura C.1: Diagrama de fases para o ponto tricrítico no plano (A, B) obtido pela teoria fenomenológica de Landau.

soluções $\psi_{1,2}$, permanecem estáveis até que um determinado valor de A seja atingido, para o qual

$$\Phi(\psi_{1,2}) = \Phi(0). \quad (\text{C.6})$$

Para esse valor, as três fases caracterizadas por $\psi_0 = 0$ e $\psi_{1,2}$ coexistem e podemos identificar uma linha de pontos triplos L_t , dada por

$$A = A_t(B) = \frac{5B^2}{8C}, \quad B < 0. \quad (\text{C.7})$$

Essa linha de pontos triplos encontra a linha lambda no ponto

$$A_t = B_t = 0, \quad (\text{C.8})$$

o que caracteriza o ponto tricrítico, onde os três mínimos $\psi_0 = 0$ e $\psi_{1,2}$ coalescem. Para $\frac{5B^2}{8C} < A < \frac{5B^2}{6C}$, os dois mínimos em $\psi = \psi_{1,2}$ ainda estão presentes, mas correspondem a estados meta-estáveis, com $\Phi(\psi_{1,2}) > \Phi(0)$. Para valores mais altos de A , o mínimo em $\psi = 0$ é único, caracterizando a

fase desordenada na região $A > \frac{5B^2}{8C}$, $B < 0$. Podemos, portanto, esboçar o diagrama de fases no plano (A, B) , como mostrado na Fig. C.1.