

Universidade Federal de Minas Gerais

## **O Modelo Baxter-Wu Spin-1**

Autora: Maria Lúcia de Moraes Costa

Orientador: Dr. João Antônio Plascak

Belo Horizonte

2005

Maria Lúcia de Moraes Costa

## O Modelo Baxter-Wu Spin-1

Tese apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física do Instituto de Ciências Exatas da Universidade Federal de Minas Gerais, como requisito parcial à obtenção do título de Doutora em Ciências.

Área de Concentração: Física Estatística e Fenômenos Críticos.

Orientador: Dr. João Antônio Plascak.

Belo Horizonte  
Instituto de Ciências Exatas  
2005

Aos que virão

# Agradecimentos

---

A Deus, pelo Seu dispor.

No convívio que tivemos nestes 4 anos de meu doutorado, eu e o Plascak desenvolvemos uma relação pessoal de muito respeito, confiança e liberdade para conduzirmos este estudo. Sou grata a ele pelas discussões de Física, muitas das quais preciosas na hora de resolver as charadas do problema do Baxter-Wu.

Aos professores do grupo da Física Estatística: Zé Guilherme, Jafferson, Dickman, Américo e Plascak, pela confiança e liberdade que sempre dispuseram aos alunos que utilizam os computadores do grupo.

Aos professores com os quais cursei disciplinas, pela competência e entusiasmo. Foram cursos muito proveitosos à minha formação acadêmica e que se afinaram muito bem à minha paixão pela Física, apesar do trabalho que deram.

Queria agradecer aos funcionários do Colegiado de Pós-Graduação, do Departamento de Física e da Biblioteca Setorial pelas muitas e muitas vezes em que minhas solicitações foram atendidas com eficiência.

Sou grata aos colegas com os quais cursei disciplinas, compartilhei a saleta de estudo, com os que convivi na sala da Física Estatística e com os quais apreciei os restaurantes da UFMG.

Sou grata ao professor Wagner Nunes Rodrigues, coordenador da Pós-Graduação quando cheguei para fazer o Mestrado em 1999, pela receptividade dispensada aos novatos do Pará (eu, Wilson e Wallon).

Ao amigo Moisés, a bússola que indicou as Alterosas para virmos fazer Pós-Graduação e desfrutar da cultura de Minas, e à Carla e ao Eli pela acolhida inicial.

Ao Wilson, sempre presente nas horas boas e nas horas difíceis. Meu físico preferido e fiel escudeiro.

À minha família, em especial à minha mãe Rosa e à tia Delmacy, pelo amor e educação que me deram incondicionalmente.

À Maricéu, Natalina, Antônio e tia Vilma pelo carinho e amizade.

A todos os amigos pela torcida.

Ao contribuinte brasileiro que, através do Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq), financiou este trabalho.

*E ficaste defendida  
Com todas as tuas letras  
Entre cartas e surpresas  
Recírio, chuva e tristeza  
Vês o peso da tua falta  
Nas velas e barcos parados  
Encalhados na saudade  
De Val-de-cans ao Guamá*

Nilson Chaves  
e Cristovan Araújo.

*Basically, I suppose the justification for  
studying these lattice models is very simple:  
they are relevant and they can be solved,  
so why not do so and see what they tell us?*

R. J. Baxter.

# Sumário

---

<b>Resumo</b>	<b>iii</b>
<b>Abstract</b>	<b>iv</b>
<b>1 Introdução</b>	<b>1</b>
1.1 Era Clássica das Transições de Fase . . . . .	2
1.2 Era Moderna das Transições de Fase . . . . .	5
1.3 Simulações . . . . .	11
1.4 O Modelo Baxter-Wu . . . . .	14
1.5 O Modelo Baxter-Wu Spin-1 . . . . .	16
<b>2 Métodos Empregados</b>	<b>19</b>
2.1 Grupo de Renormalização de Campo Médio . . . . .	19
2.2 Grupo de Renormalização de Volume-Superfície . . . . .	21
2.3 Simulações de Monte Carlo e Escala de Tamanho Finito . . . . .	21
2.4 Distribuição de Probabilidades do Parâmetro de Ordem . . . . .	24
2.5 Mistura dos Campos de Escala . . . . .	25
<b>3 Aproximação de GR para o BW Spin-1</b>	<b>29</b>
3.1 GR para o BW Spin-1/2 . . . . .	31
3.2 GR para o BW Spin-1 . . . . .	31

<b>4</b>	<b>Escala de Tamanho Finito para o BW Spin-1</b>	<b>35</b>
4.1	Resultados de ETF para o BW Spin-1 . . . . .	37
4.2	Resultados de ETF para o BW Spin-1/2 . . . . .	45
<b>5</b>	<b>Caracterização Crítica do BW Spin-1</b>	<b>48</b>
5.1	Distribuição de Probabilidades da Magnetização para o BW Spin-1/2 . . . . .	48
5.2	Distribuição de Probabilidades da Magnetização para o BW Spin-1 . . . . .	50
5.3	Transições de Primeira Ordem e Diagrama de Fases Global . . . . .	57
<b>6</b>	<b>Conclusão</b>	<b>62</b>
	<b>Referências</b>	<b>64</b>

# Resumo

---

Este estudo trata do comportamento crítico, multicrítico e de primeira ordem do modelo Baxter-Wu Spin-1 com um campo cristalino. Empregamos a aproximação de grupo de renormalização de campo médio e simulações de Monte Carlo extensivas usando o algoritmo de Metropolis aliado à técnica do histograma. Obtemos o diagrama de fases global, o qual mostra que o sistema possui a mesma classe de universalidade do correspondente modelo Baxter-Wu com Spin-1/2, e exibe um ponto multicrítico separando uma linha de transição de fase de segunda ordem de uma linha de primeira ordem. A distribuição de probabilidades da magnetização no ponto pentacrítico é também determinada.

# Abstract

---

We have studied the critical, multicritical and first order behavior of the Spin-1 Baxter-Wu model in a crystal field. We have employed the mean field renormalization group approach and extensive Monte Carlo simulations using the single spin flip Metropolis algorithm and hystogram techniques. The global phase diagram is obtained and it is shown that the system belongs to the same universality class as the corresponding spin-1/2 version and presents a multicritical point separating a second order phase transition line from a first order line. The probability distribution of this pentacritical point is also determined.

# Capítulo 1

---

## Introdução

A constituição microscópica da matéria e a caracterização de um estado físico macroscópico são duas entre as questões mais remotas no âmbito de investigação da Física.

Avanços significativos no entendimento da natureza da matéria tiveram ensejo no decorrer do século XVIII. Em particular, este momento histórico firmou o método científico experimental e foi marcado por grandes progressos em diversas áreas do conhecimento científico[1].

Foi neste período, portanto, que a Termodinâmica e a Teoria Cinética dos Gases tiveram seus primeiros fundamentos elaborados. Estas teorias físicas desenvolveram abordagens distintas para tratar dos mesmos problemas fundamentais, de modo que elas proveram uma ponte entre as questões anteriormente citadas. A Teoria Cinética dos Gases foi a precursora da Mecânica Estatística (ME), que por sua vez consolidou-se a partir do início do século XX, e inaugurou o tratamento estatístico no estudo das interações microscópicas.

Como todo conhecimento científico, a pesquisa em ME é desafiadora, exigindo reflexões conceituais suscitadas pelo sistema físico em questão e o desenvolvimento de abordagens e métodos novos, permitindo, assim, a renovação do campo de atuação da teoria. Após seu estabelecimento, a maior parte dos resultados refere-se aos fenômenos de equilíbrio termodinâmico, sendo o estudo das transições de fase e dos fenômenos críticos o tema que concentra maior atenção. Mais recentemente, notamos uma incursão maior em sistemas físicos fora do equilíbrio e uma forte tendência a tratar de temas interdisciplinares.

Pela Mecânica Estatística o comportamento termodinâmico de equilíbrio de um sistema físico é derivado a partir do conhecimento das interações entre seus constituintes microscópicos[2]. O método dos *ensembles* ou das coleções apresentado por Gibbs[3] em 1902 fornece a formalização para este procedimento. Ensemble seria uma coleção de sistemas físicos seguindo uma distribuição estatística, em correspondência a uma situação

termodinâmica particular. Para o ensemble Canônico, o qual descreve a situação de equilíbrio térmico, a função partição é expressa como

$$Z_N = \sum_{\mu} e^{-\beta E_{\mu}}, \quad (1.1)$$

a qual envolve a soma sobre todos os microestados  $\mu$  ou configurações admitidas pelo sistema. Na expressão acima  $\beta = 1/k_B T$ ,  $T$  é a temperatura absoluta,  $k_B$  é a constante de Boltzmann, cujo valor é  $1,38 \times 10^{-23} JK^{-1}$ ,  $E_{\mu}$  é a energia do microestado  $\mu$  e  $N$  é o número de constituintes do sistema físico. Em geral a energia é dependente do volume  $V$  do sistema,  $E_{\mu} = E_{\mu}(V)$ . Segue que encontramos uma equação termodinâmica fundamental, aqui chamada de Energia Livre de Helmholtz, a partir da qual as grandezas termodinâmicas de interesse são estimadas,

$$F = -k_B T \ln Z_N = F(T, V, N). \quad (1.2)$$

Por exemplo, o valor esperado da energia  $\langle E \rangle$  ou energia média, a qual é identificada como a energia interna  $U$ , é dada por  $\langle E \rangle = -T^2 \frac{\partial}{\partial T} \left( \frac{F}{T} \right) |_{V, N}$ .

O problema tratado por esta tese aborda o fenômeno físico da transição de fase magnética. Como colocado de uma maneira bem simples por Andrade em [1], as transições de fase referem-se “às situações em que há uma mudança do estado de agregação dos átomos e moléculas ou de alteração de suas propriedades mecânicas, elétricas ou magnéticas”. Há portanto uma grande diversidade de sistemas físicos em que a fenomenologia das transições de fase constitui o assunto de interesse. Citamos[2] o ponto crítico líquido-vapor, a fusão de sólidos, a separação de fases em líquidos, em misturas de sólidos ou soluções, a transição ordem-desordem em ligas, o ferromagnetismo, o antiferromagnetismo, a supercondutividade, a superfluidez, entre outros.

## 1.1 Era Clássica das Transições de Fase

A investigação das transições de fase em uma abordagem mais específica ocorreu nos fins do século XIX. Posteriormente a teoria foi sendo gradualmente aprofundada, consolidando-se a partir de 1970. Podemos dizer que a compreensão deste assunto foi o maior desafio da Mecânica Estatística de equilíbrio no século XX e, já agora no século XXI, temos a extensão da teoria para sistemas físicos fora do regime de equilíbrio.

A primeira classificação formulada para as transições, devido a Ehrenfest, identificava uma transição de fase como de enésima ordem se qualquer enésima derivada da energia livre com respeito a um de seus argumentos apresentasse uma descontinuidade na transição. A classificação atual[4], devido a Fisher, assinala uma transição de fase não só por descontinuidades mas também por divergências em algumas das derivadas termodinâmicas, as quais são adequadas na descrição do comportamento físico do sistema. Definindo a densidade volumétrica de energia livre  $f_V[\mathbf{K}]$ , sendo  $[\mathbf{K}] \equiv \{K_n\}$  o vetor que define o

conjunto das constantes de acoplamento, denominamos de transição de fase de primeira ordem para o caso de uma ou mais derivadas ( $\partial f_V/\partial K_i$ ) apresentarem descontinuidades na chamada fronteira de fase. No caso de todas ( $\partial f_V/\partial K_i$ ) serem contínuas e, no entanto, haver descontinuidades ou ainda divergências nas chamadas derivadas segundas, denominamos de transição de fase de segunda ordem ou contínua.

As transições contínuas exibem os chamados fenômenos críticos, que conferem um caráter peculiar às transições. A fenomenologia é entendida explorando-se a região crítica, a qual é a vizinhança em torno da temperatura em que ocorre a transição, a chamada temperatura crítica, representada por  $T_c$ . Os fenômenos críticos implicam em comportamentos termodinâmicos não usuais, que em uma descrição quantitativa consiste em tomar as quantidades termodinâmicas dadas por leis de potência, definidas por um conjunto de expoentes, denominados de expoentes críticos[4].

A intenção agora é fazermos uma descrição histórica da Teoria dos Fenômenos Críticos, comentando brevemente os assuntos que conduziram às formalizações dos principais conceitos e métodos teóricos, bem como às realizações de experimentos. A maior parte das informações apresentadas nesta introdução foi baseada no primeiro capítulo do livro de Domb[5], o qual aborda o desenvolvimento da teoria em uma contextualização histórica.

Foram os estudos sobre dois sistemas físicos, um fluido e um magneto, que deram início à compreensão do comportamento crítico. O estágio inicial é conhecido como Período Clássico e iniciou-se em 1869 com a introdução do termo ponto crítico por Andrews[6], ao realizar experimentos com o dióxido de carbono e identificar em um diagrama de fases o ponto em que as fases líquida e gasosa fundem-se em uma única fase fluida. Andrews chamou a atenção para um novo conceito de simetria entre as fases líquida e gasosa, o que foi enfatizado no título de seu seminário, *On the Continuity of the Gaseous and Liquid States of Matter*. Este período inicial foi marcado por cooperação intensa entre experimentos e teoria. As técnicas experimentais disponíveis favoreceram a exploração de substâncias gasosas e líquidas, motivando por conseguinte uma descrição unificada para os pontos críticos.

A próxima contribuição relevante, considerada como um suporte teórico para o ponto crítico líquido-gás, foi elaborada por van der Waals no ano de 1873 em sua tese de doutorado[7]. A idéia principal foi assumir as moléculas do gás como sendo de caroço duro e com interações mútuas atrativas de longo alcance. Posteriormente a teoria foi refinada por Maxwell em 1875 com o conhecido argumento das áreas iguais[8], com o objetivo de descrever a região horizontal da isoterma na equação de van der Waals.

Outro marco importante foram os resultados de Curie[9] em um artigo de 1895 sobre o magneto, o qual consiste em um conjunto de momentos magnéticos residindo sobre os vértices de uma rede cristalina. O mérito de Curie foi em identificar a analogia entre fluidos e magnetos, ao comparar isotermas de pressão contra densidade ( $P \times \rho$ ) e de campo magnético contra magnetização ( $H \times M$ ). A fase paramagnética em altas temperaturas fazia correspondência à fase gasosa, e a fase ferromagnética em baixas temperaturas à fase líquida. Curie indagou ainda quanto a existência de um ponto crítico ferromagnético definido precisamente e com constantes críticas iguais às do fluido.

A derivação teórica do ponto crítico ferromagnético foi dada por Weiss em 1907, em sua hipótese do campo molecular[10]. Weiss substituiu as interações moleculares por um campo uniforme proporcional a magnetização, o qual chamou de campo interno. A partir de uma equação de estado magnética encontrou um ponto crítico, que ficou identificado como a Temperatura de Curie.

Nesta época outros aspectos do comportamento crítico foram esclarecidos, como é o caso da opalescência crítica, a qual ficou entendida posteriormente como um fenômeno crítico. A mesma consiste no fato de que um fluido transparente torna-se opaco na região crítica, o que corresponde a um aumento no espalhamento da luz à medida que a temperatura aproxima-se do valor de  $T_c$ . Smoluchowski[11] e Einstein[12] explicaram esta questão como sendo uma resposta ao crescimento das flutuações da densidade do fluido, que é experimentado na região crítica. Logo depois em 1914, Ornstein e Zernick deram um entendimento mais profundo a este assunto, ao tratarem das correlações entre as flutuações[13]. A questão central era diferenciar as interações moleculares, que deveriam ser de curto alcance e as correlações entre as densidades, as quais se manifestam como de longo alcance próximo a  $T_c$ . Destacamos ainda a já citada classificação organizada por Ehrenfest em 1933 e a transição crítica ordem-desordem em ligas binárias, a qual foi descrita em um artigo destacado de Bragg e Williams[14] em 1934, relacionando forças de curto alcance com o conceito de ordem de longo alcance.

Em 1937 Landau[15] propôs uma teoria generalizada para as transições críticas, a qual é referenciada como a teoria clássica dos fenômenos críticos. Seus pontos mais relevantes são:

- O conceito de parâmetro de ordem, significando a grandeza física adequada a indicar a transição, assumindo portanto valores não nulos em temperaturas menores que  $T_c$  e valor nulo em temperaturas maiores e igual a  $T_c$ . Por exemplo, na transição líquido-gás o parâmetro de ordem é naturalmente escolhido como a diferença entre as densidades das fases líquida e gasosa, representada como  $(\rho_L - \rho_G)$ . Na transição paramagnética-ferromagnética o parâmetro de ordem é a magnetização espontânea, dada por  $M$ .
- Uma expansão da energia livre em uma série de potências do parâmetro de ordem, representado por  $\eta$ , de modo a resumir o comportamento adotado pelo sistema na região crítica. Por questões de simetria a expansão da função de Gibbs é expressa por

$$\Phi(P, T, \eta) = \Phi_0(P, T) + A(P, T)\eta^2 + B(P, T)\eta^4 + \dots \quad (1.3)$$

A temperatura de Curie ( $T_c$ ) corresponde a  $A(P, T) = 0$  e  $B(P, T) > 0$ . A fase de maior simetria (desordenada) é encontrada em temperaturas maiores que a de Curie, com  $A > 0$  e  $\eta = 0$ . Valores não nulos  $\eta^2 = -A/2B$  são atribuídos à fase de menor simetria (ordenada), em temperaturas menores que  $T_c$ .

## 1.2 Era Moderna das Transições de Fase

Outras considerações foram desenvolvidas em anos subsequentes. Por exemplo, além das soluções exatas de alguns modelos teóricos, chegou-se a constatação de que na região crítica as grandezas termodinâmicas de interesse são governadas por um conjunto de expoentes. Para um ferromagneto exposto a um campo magnético  $H$  e  $t = (\frac{T}{T_c} - 1)$ , a teoria clássica prevê a seguinte descrição próximo a  $T_c$ :

$$\text{Magnetização Espontânea} \quad M_0 \sim (-t)^{1/2} \quad (t < 0),$$

$$\text{Susceptibilidade Magnética} \quad \chi_0 \sim t^{-1} \quad (t > 0),$$

$$\text{Isoterma Crítica} \quad H \sim M^3 \quad (t = 0).$$

Grandezas termodinâmicas análogas são caracterizadas pelo mesmo valor do expoente crítico, como a compressibilidade de um fluido e a susceptibilidade de um ferromagneto, o que conduziu à noção de universalidade associada ao ponto crítico.

No entanto surgiram resultados tanto a nível de descrições teóricas, por meio de alguns modelos físicos, como de medidas experimentais, que discordavam com algumas das prescrições da teoria de Landau, como os valores dos expoentes críticos. Estas descobertas inauguraram um período novo no entendimento dos fenômenos críticos, o qual ficou conhecido como a Era Moderna da teoria.

Um destes resultados foi a solução exata dada por Onsager em 1944 para o conhecido modelo de Ising, estendida para uma rede cristalina quadrada com campo magnético externo nulo. Inicialmente o modelo foi proposto em 1925 por Lenz a seu estudante Ising. O modelo é uma proposta simplificada para um ferromagneto ou um antiferromagneto, onde cada spin localizado em um sítio da rede está restringido a apontar paralelamente ou antiparalelamente a um campo magnético externo e a interagir somente com seus vizinhos mais próximos. A energia do sistema é representada como

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j - H \sum_i s_i, \quad (1.4)$$

em que a constante de troca  $J$  positiva define o estado de mais baixa energia como aquele em que os spins  $s_i$  ficam paralelos e alinhados com o campo externo  $H$ , descrevendo o modelo ferromagnético. A condição contrária corresponde a descrição antiferromagnética.

A questão primordial era sobre a existência de magnetização espontânea quando o campo externo fosse reduzido a zero. Para a dimensão  $d = 1$ , Ising[16] mostrou que o sistema não apresenta transição crítica em qualquer temperatura  $T > 0$ , e concluiu que não deveria existir transição nas mesmas condições para dimensões  $d > 1$ , logo o modelo não descrevia o comportamento de qualquer sistema físico real. No entanto, como já citamos acima, Onsager[17] apresentou a solução exata da função partição do modelo para a rede quadrada em campo nulo, indicando a existência de uma transição contínua entre as fases ferromagnética e paramagnética em uma temperatura finita, dada pelo valor  $k_B T_c / J = 2 / \ln(1 + \sqrt{2}) \approx 2,2691... .$  O calor específico em vez de uma descontinuidade

exibe uma divergência logarítmica em torno da temperatura crítica e a função partição é não analítica em  $T_c$ .

A resolução de Onsager foi um resultado decisivo para o modelo de Ising e que se juntou a outros trabalhos anteriores sobre o modelo. Por outro argumento, Peierls[18] mostrou em 1936 que o modelo de Ising bidimensional exibia uma magnetização espontânea, assim como a divergência no calor específico foi conjecturada em 1941 por Kramers e Wannier[19]. Independentemente Onsager[20] em 1949 e Yang[21] em 1952 mostraram que a magnetização espontânea obedece a forma  $(-t)^{1/8}$  na região crítica, o que destoava novamente da previsão clássica. Além disso, medidas realizadas em sistemas físicos reais também destacaram mais diferenças em relação à teoria clássica. Citamos a famosa curva de coexistência de alguns gases aferida por Guggenheim[22] em 1945. Enquanto a teoria de van der Waals indica uma função quadrática, a curva de Guggenheim segue a forma  $\Delta\rho \sim (-t)^{1/3}$ .

Outro resultado surpreendente foi anunciado em 1957 por Fairbank *et al.*[23] e indicava a divergência no calor específico em torno da transição crítica do Hélio-4 líquido. Em 1962 Heller e Benedek[24] forneceram a primeira medida experimental de um expoente crítico para um sistema magnético. Eles indicaram  $\beta = 0,335(5)$  para o antiferromagnético MnF<sub>2</sub>, e que aproximava-se da medida de Guggenheim para um fluido, corroborando o argumento da universalidade, no entanto discordando da previsão clássica. A partir deste período a investigação dos fenômenos críticos é cada vez mais promissora, desenvolvendo-se métodos de cálculo para vários modelos, tanto em duas como em três dimensões, como a análise de expansões em séries perturbativas em altas e baixas temperaturas. Obtiveram-se previsões teóricas para expoentes críticos próximas das estimativas experimentais e medidas mais precisas com novos materiais magnéticos.

Esclarecimentos novos foram dados para a questão da universalidade. Domb[25] e outros pesquisadores chamaram a atenção para os expoentes críticos parecerem não depender da estrutura da rede cristalina em uma dada dimensão, nem tão pouco do valor do spin, tendo-se definido a interação física. Logo em seguida, Essam e Fisher[26] estudaram o modelo de gotas (*droplet model*), e encontraram uma relação interessante para os expoentes críticos, dada como  $(\alpha' + 2\beta + \gamma) = 2$ , a qual é igualmente satisfeita pelo modelo de Ising bidimensional. O expoente  $\alpha'$  caracteriza o calor específico em temperaturas  $T \leq T_c$ ,  $c_H \sim (-t)^{-\alpha'}$ , o expoente  $\beta$  caracteriza a magnetização espontânea,  $M_0 \sim (-t)^\beta$ , e a susceptibilidade magnética em temperaturas maiores que  $T_c$  é governada pelo expoente  $\gamma$ , considerando  $\chi_0 \sim t^{-\gamma}$ . Entretanto ainda em 1963 Rushbrooke[27] indica, por argumentos termodinâmicos, uma relação de desigualdade entre os expoentes, dada como

$$\alpha' + 2\beta + \gamma \geq 2. \tag{1.5}$$

Outra questão de muita relevância, demonstrada por cálculos exatos de alguns modelos[28], foi a verificação de que o comportamento clássico é recuperado para forças de longo alcance.

Neste ponto fazemos a observação de que o perfil representativo da teoria crítica já se encontrava fortemente delineado, destacando-se alguns *traços que foram pincelados*

*com cores admiravelmente instigantes.* Na primeira conferência científica dedicada ao tema, realizada em abril de 1965, os especialistas da área discutiram os aspectos chave e as exigências que se faziam necessárias de modo a elucidar alguns pontos ainda em abertos sobre a fenomenologia dos fenômenos críticos. Como enfatizado por Uhlenbeck, os resultados apontavam para uma universalidade no ponto crítico, a qual era guiada pelas interações de curto alcance, no entanto obtinha-se o comportamento prescrito pelas teorias clássicas ao se considerar determinadas condições, como as interações de longo alcance. O problema central era a formulação de uma teoria que abarcasse esta descrição[5].

A solução para a questão começou a ser traçada ainda em 1965 independentemente por três grupos: Widom[29] a partir de uma generalização da equação de van der Waals que produzisse os expoentes críticos não clássicos; Domb e Hunter[30] com uma análise de expansões em séries usando derivadas de ordens elevadas com respeito ao campo magnético no ponto crítico, e Patashinskii e Pokrovskii[31] em 1966, analisando o comportamento das correlações múltiplas na região crítica. Os resultados destas três formulações foram reunidos por Griffiths[32] em 1967, fornecendo uma equação de estado para um ferromagneto, dada como

$$H = M^\delta g(tM^{-1/\beta}), \quad (1.6)$$

com os demais expoentes determinados a partir dos parâmetros  $\beta$  e  $\delta$ , sendo  $g(x)$  uma função analítica. A teoria clássica prevê os valores  $\beta = 1/2$ ,  $\delta = 3$  e  $g(x)$  linear. Já os resultados não clássicos levam a valores diferentes destes para os expoentes e formas distintas para  $g(x)$ . Para a descrição de um fluido, o campo magnético  $H$  é substituído por diferenças de pressões ( $P - P_c$ ) ou de potenciais químicos ( $\mu - \mu_c$ ), e a magnetização  $M$  por diferenças de volumes ( $v - v_c$ ) ou de densidades ( $\rho - \rho_c$ ).

Dois resultados seguem do comportamento dado na equação (1.6). O primeiro é que as desigualdades relacionando os expoentes críticos são satisfeitas exatamente como relações de igualdades. O segundo é uma relação de escala satisfeita pelos dados críticos, ou seja, em um gráfico de  $tM^{-1/\beta}$  contra  $HM^{-\delta}$  verifica-se os valores numéricos ajustados à uma curva única  $g(x)$ . Ressaltamos que medidas experimentais[33] corroboraram estas implicações.

Relações de escala como a (1.6) são obtidas a partir de uma hipótese sobre a forma básica dos potenciais termodinâmicos, isto é, os potenciais são funções homogêneas generalizadas. Para um sistema magnético escrevemos  $G(\lambda^{a_t}t, \lambda^{a_H}H) = \lambda G(t, H)$ , com variáveis  $t = (T - T_c)/T_c$  e campo magnético externo  $H$  e parâmetros  $a_t$ ,  $a_H$  e  $\lambda$ . Estas funções conferem certas propriedades adequadas à descrição analítica dos diagramas de fases. No entanto, como destacado no livro de Stanley[34], esta representação não especifica valores para os expoentes. Como eles são derivados unicamente a partir dos parâmetros de escala  $a_t$  e  $a_H$ , resulta em número restrito de expoentes independentes, ou seja, se dois expoentes são dados, todos os demais ficam determinados. Esta hipótese é conhecida como Lei de Escala Estática ou Aproximação de Função Homogênea e suas exposições mais concisas são devidas a Widom, Domb e Hunter.

Seguido a esta contribuição, Kadanoff expôs sua hipótese de universalidade[35] em um artigo de 1966, com o intuito de oferecer a base teórica para as propriedades de

escala. Os argumentos elaborados por Kadanoff propõem um procedimento natural para a manifestação do comportamento universal na transição crítica. Considerando que próximo a  $T_c$  o parâmetro  $\xi(T)$ , denominado de comprimento de coerência ou de correlação, torna-se extremamente grande, Kadanoff sugeriu encontrar um comprimento  $L = l a$  ( $l > 1$ ), maior que o espaçamento da rede cristalina ( $a$ ), porém pequeno comparado a  $\xi(T)$ , de modo que se possa substituir a interação entre spins individuais por uma interação entre blocos com  $l^d$  spins. O modelo de Ising com spins  $s_i$  e interação  $J$  é reescrito por variáveis novas, os *spins-blocos*  $\tilde{s}_i$  e interação  $\tilde{J}$ . A idéia principal é que o estado de criticalidade permite fazer uma mudança de escala conservando o comportamento físico do sistema original. As densidades de energia livre dos dois sistemas, o original e o escalado, são relacionadas por

$$f(h, t) = l^{-d} f(\tilde{h}, \tilde{t}), \quad (1.7)$$

sendo  $h = (\beta H)$  o campo magnético externo reduzido, e o parâmetro  $d$  é a dimensão espacial. A relação entre os campos físicos é dada como

$$\tilde{h} = l^x h, \quad \tilde{t} = l^y t, \quad (1.8)$$

onde os expoentes críticos são derivados dos expoentes  $x$  e  $y$ . A explanação de Kadanoff produz as relações de escala e as igualdades críticas.

Posteriormente, chega-se à peça chave do quebra-cabeça sobre a natureza do comportamento crítico, elaborada por Wilson em 1971, denominada de Grupo de Renormalização (GR)[36] e que representa um dos principais avanços teóricos da área. Ressaltamos que a técnica do GR foi desenvolvida 20 anos antes do procedimento do Wilson, por Stueckelberg e Peterman em 1953, e Gell-Mann e Low em 1954, relacionada à Teoria Quântica de Campos. Em uma escola de verão organizada por Mel Green[37] em 1970 foi dada a sugestão de que GR poderia ser relevante para o comportamento crítico. A teoria desenvolvida por Wilson formaliza as idéias de Kadanoff em um método preciso de cálculo. O Grupo de Renormalização implica na transformação do Hamiltoniano original  $\mathcal{H}$  com  $N$  graus de liberdade em um distinto Hamiltoniano  $\mathcal{H}'$  com um número  $N'$  menor de graus de liberdade,

$$\mathcal{H}' = \mathbf{R}[\mathcal{H}], \quad (1.9)$$

preservando a invariância da função partição

$$Z_{N'}(\mathcal{H}') = Z_N(\mathcal{H}). \quad (1.10)$$

Uma variedade de operadores  $\mathbf{R}$  permite satisfazer a condição (1.10). Por exemplo, há o procedimento denominado de decimação, o qual elimina metade dos spins realizando um somatório parcial. Este método é classificado de renormalização no espaço real. Em outros casos a renormalização é estendida no espaço dos momentos, onde se aplica cálculos

oriundos da Teoria Quântica de Campos, considerando o limite do contínuo para o sistema cristalino.

O próximo passo é aplicar sucessivas transformações  $\mathbf{R}$ . Este processo iterativo irá produzir as propriedades de universalidade, e escrevemos

$$\mathcal{H}'' = \mathbf{R}[\mathcal{H}'], \quad \mathcal{H}''' = \mathbf{R}[\mathcal{H}''], \dots \quad (1.11)$$

No espaço multidimensional dos parâmetros do Hamiltoniano representamos as transformações por

$$\mathbf{K}_{n+1} = f(\mathbf{K}_n). \quad (1.12)$$

Como bem sintetizadas por Barber[38], as consequências deste formalismo são:

- Criticalidade, a qual está associada às soluções denominadas de pontos fixos ( $\mathbf{K}^*$ ) do Grupo de Renormalização, tal que  $\mathbf{K}^* = f(\mathbf{K}^*)$ , e definem conjuntos de campos que são invariantes sob a transformação.
- Expoentes críticos estão relacionados com o comportamento das relações de recursão em torno do ponto fixo, isto é, um operador linear é derivado tomando-se uma expansão linear nas proximidades de  $\mathbf{K}^*$ , cujos autovalores são relacionados aos expoentes críticos.
- Todos os sistemas que tendem a um dado ponto fixo exibem o mesmo comportamento crítico, possuindo, portanto, os mesmos expoentes críticos.
- Campos físicos tomados como perturbações em torno de um ponto fixo particular são classificados como relevantes, irrelevantes ou marginais, de acordo com os efeitos dessas perturbações.

Uma explicação mais detalhada deste último ponto é dada pela seguinte argumentação[39]: a partir de uma relação de recursão deriva-se o diagrama de fluxo no espaço dos parâmetros do Hamiltoniano, sendo que os denominados atratores (pontos fixos triviais) e suas bacias no diagrama de fluxo correspondem às regiões de fases termodinâmicas distintas. Estas regiões são separadas por fronteiras de fases, as quais estão associadas aos atratores semi-estáveis (pontos fixos relevantes), que determinam as classes de universalidade de seus expoentes críticos. Há também atratores instáveis em superfícies críticas direcionando o fluxo para fronteiras multicríticas, além de outras condições mais específicas.

A teoria de GR também proporcionou uma reconciliação entre as descrições clássicas, englobadas pela teoria de Landau, e as não clássicas, dadas por resultados empíricos, teóricos e pelas hipóteses de escala. Com o objetivo de dar uma explicação coerente para a teoria clássica, Wilson retomou a formulação microscópica dada por Ginzburg e Landau em 1950, e também serviu-se de algumas idéias dadas anteriormente por Fisher e Gaunt em

1964, para tomar a famosa expansão- $\epsilon$ [40], com o parâmetro  $\epsilon = 4 - d$ . A teoria clássica corresponde a  $\epsilon = 0$ . Resultados de expansões em séries concordavam com os dados provenientes da análise de GR, como o de Le Guillou e Zinn-Justin[41] de 1977. Logo em seguida utilizaram-se dos métodos de renormalização no espaço real, os quais forneceram resultados satisfatórios em duas dimensões. Por exemplo, Niemeijer e van Leeuwen[42] em 1976 reproduziram com precisão a solução de Onsager. Mais recentemente desenvolveram-se outras técnicas dedicadas a estudar sistemas em três dimensões. Vale ressaltar ainda que a teoria de GR explicou os resultados empíricos.

No decorrer dos anos as técnicas de GR foram, e ainda são, muito estudadas no contexto dos fenômenos críticos. Há um vasto material de trabalho conhecido na literatura científica relacionando estes resultados, alguns deles referem-se a cálculos sobre modelos magnéticos, indicando estimativas mais precisas de grandezas críticas, como expoentes e amplitudes. Alguns modelos teóricos com ou sem correspondência a um sistema físico real possuem destacadamente soluções exatas de seus comportamentos críticos, como a resolução de sua função partição, com a determinação de  $T_c$  e de alguns expoentes, de modo que estudos de GR ou de expansões em séries sobre estes modelos representam confirmações adicionais na compreensão do tema e, por outro lado, vão constituindo-se em recursos técnicos da área de pesquisa.

Em determinados problemas foram desenvolvidas abordagens novas do procedimento de GR de modo a satisfazer certos propósitos de análise. Seguindo o esquema de GR no espaço real temos a já citada aproximação de decimação, as células de Niemeijer-van Leeuwen e as de Migdal-Kadanoff. Muitos livros-texto conhecidos apresentam o critério de decimação servindo como um exercício didático aplicado a modelos físicos interessantes. Como sugestão de leitura, Salinas[2] resolve o ferromagneto de Ising nas redes quadrada e triangular. Outros procedimentos mais precisos incluem o denominado Grupo de Renormalização de Monte Carlo, o que preserva a Função de Correlação e o Fenomenológico. Este último apresenta várias versões dependendo da grandeza física escolhida, mas essencialmente consiste em determinar exatamente grandezas termodinâmicas de sistemas finitos caracterizados por seus comprimentos lineares e considerar uma relação de escala satisfeita no ponto crítico, tomando o limite termodinâmico nos sistemas finitos tratados. Conforme a escolha de certos critérios de elaboração, como a geometria e o tamanho dos sistemas e as condições de contorno impostas sobre as interações físicas, os métodos mostram uma certa eficiência, permitindo obter informações sobre os chamados comportamentos críticos de volume e de superfície.

A primeira proposta neste sentido foi elaborada por Nightingale em 1976, considerando o comprimento de correlação em tiras de larguras finitas e comprimentos ilimitados[43]. Outra aproximação conhecida, e que para nós é especial pois a utilizamos na análise de nosso problema específico, é o denominado GR de Campo Médio, proposto em 1982 por Indekeu, Maritan e Stella[44], o qual considera o parâmetro de ordem do sistema e cálculos de campo médio. Por sua vez o Campo Médio é um método bem estabelecido, que já foi aplicado a vários modelos, como sistemas clássicos, quânticos, puros ou com diluição. Há um artigo[39] de revisão valioso que sintetiza os principais métodos de renormalização fenomenológicos, indicando também uma lista sugestiva de artigos que tratam do tema.

Retornando à propriedade de universalidade, os expoentes críticos são determinados

por pouquíssimos parâmetros, a saber: a dimensionalidade espacial dos sistemas físicos ( $d$ ), o número de dimensões do parâmetro de ordem ( $n$ ) e um terceiro, o qual descreva o alcance das interações intermoleculares e possíveis simetrias do modelo. Este caráter universal dos expoentes críticos é representado pelo conjunto discreto das classes de universalidade. Uma determinada classe define um grupo específico de expoentes críticos, e os sistemas físicos que pertencem a esta classe possuem os mesmos expoentes. Este arquétipo permite construir uma descrição conjunta dos comportamentos clássicos e não clássicos. Destacamos ainda o chamado comportamento de cruzamento (*crossover*), cuja análise envolve o diagnóstico de classes de universalidade distintas.

## 1.3 Simulações

Até este ponto acompanhamos os principais acontecimentos e descobertas que levaram ao surgimento e ao posterior desenvolvimento da teoria dos fenômenos críticos. Observamos que a teoria atingiu uma posição de estar bem definida, tendo respondido suas questões primordiais. Para chegar a esta condição, vimos o empenho conjunto das duas principais *ferramentas* que constituem o método científico, ou seja, a teoria e a experimentação. Deste modo contamos com a elaboração de vários conceitos, definições, métodos teóricos e de pequenas teorias, as quais davam conta de certas fenomenologias, casadas, na maioria das vezes, com verificações experimentais cada vez mais sofisticadas. No entanto é a partir deste momento que uma especialidade nova de exploração científica toma corpo, que são as chamadas técnicas de simulação computacional. Ao considerarmos todo o processo de aperfeiçoamento dos recursos e técnicas computacionais, alcançado no decorrer dos últimos cinquenta anos, podemos entender a importância dos métodos computacionais na resolução de uma variedade de problemas, originados em diversos campos do conhecimento, não apenas o científico. Muitos pesquisadores consideram o método computacional fechando o tripé ferramental, aliado à teoria e à experiência. Voltando à Mecânica Estatística e, em especial, aos fenômenos críticos, temos que uma fase nova na história da evolução da teoria crítica foi inaugurada com a introdução das técnicas de simulação na investigação das transições de fase.

Dois dos principais métodos de simulação utilizados na Física são o Monte Carlo, elaborado por Metropolis *et al.*[45] em 1953 e a Dinâmica Molecular, devido a Alder e Wainwright[46] em 1957. A partir de um ensemble representativo do sistema físico em equilíbrio termodinâmico, o método de Monte Carlo (MC)[47] fornece uma amostragem do espaço configuracional do sistema, em que a mesma não tem uma sequência temporal definida, mas apresenta uma determinada distribuição estatística em acordo com os vínculos termodinâmicos do sistema. A geração das configurações é determinada pela energia potencial intermolecular e com o conhecimento do estado inicial e da lei de probabilidade do ensemble. A Dinâmica Molecular (DM)[47] produz deterministicamente um conjunto de configurações ou microestados dispostos sequencialmente no tempo, dado pelos valores das posições e velocidades das moléculas constituintes. As condições primordiais da DM são o conhecimento das posições e velocidades iniciais; a força exercida sobre cada molécula; e o algoritmo para efetivar a integração numérica das equações de movimento.

Como enunciamos no início desta introdução, a função partição é tomada como a função determinante na derivação das propriedades de interesse. No entanto a estimação da função partição, salvo alguns casos específicos, reside em um problema de cálculo não trivial. Particularmente, o método de MC faz um paralelo mais próximo com o procedimento da Mecânica Estatística, no sentido de medir as próprias probabilidades das configurações que constituem o ensemble, permitindo-se determinar valores esperados das quantidades desejadas. Devido a esta característica, o MC tornou-se um aliado imprescindível no estudo de vários sistemas físicos tratados pela Mecânica Estatística. Nas próximas linhas vamos apresentar resumidamente as idéias principais do método de MC. Nossa exposição foi baseada no segundo e terceiro capítulos do livro de Newman e Barke-  
ma[48].

Tratando com sistemas físicos em equilíbrio, a implementação do MC consiste na geração aleatória de um conjunto finito de configurações ou estados do sistema, sendo que cada estado tem exatamente uma probabilidade de equilíbrio apropriada. Na condição de equilíbrio térmico, esta probabilidade é dada pela distribuição canônica de Boltzmann, a qual é representada pela expressão

$$p_\mu = \frac{1}{Z} e^{-E_\mu/k_B T}, \quad (1.13)$$

onde  $Z$  é a função partição definida anteriormente na equação (1.1).

A primeira questão a ser analisada é em como se medir, na prática, este conjunto finito de configurações, de modo a fornecermos uma estimativa boa para uma quantidade  $Q$ . A resposta surge com a denominada amostragem por importância, a qual consiste na técnica de tomar somente os estados mais importantes ou mais prováveis, entre a grande variedade de estados possíveis. No caso, isto significa construir uma amostra de estados do sistema sendo que a probabilidade de qualquer estado particular ser escolhido para compor a amostra é proporcional ao seu peso de Boltzmann, dado em (1.13). Deste modo, escolhendo-se um subconjunto com  $M$  estados  $\{\mu_1, \dots, \mu_M\}$ , o valor esperado  $\langle Q \rangle$  de uma quantidade  $Q$  é expresso como

$$Q_M = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M Q_{\mu_i}. \quad (1.14)$$

Para assegurar esta condição, ou seja, gerar estados com a distribuição de equilíbrio de Boltzmann, a receita do MC apresenta três requisitos fundamentais:

- O conjunto apropriado de estados é obtido por meio de um processo de Markov, constituindo-se assim em uma cadeia de estados de Markov. O processo consiste em gerar, de um modo aleatório, um estado novo  $\zeta$ , dado um estado inicial  $\mu$ , associando-se a esta mudança uma probabilidade de transição,  $P(\mu \rightarrow \zeta)$ .

Estas probabilidades respeitam às propriedades: permanecem constantes no tempo; dependem somente dos estados relacionados  $\mu$  e  $\zeta$  e não de qualquer etapa anterior do processo e, por último, satisfazem o vínculo de que  $\sum_\zeta P(\mu \rightarrow \zeta) = 1$ , em que não necessariamente a probabilidade  $P(\mu \rightarrow \mu)$  toma um valor nulo.

- A regra de evolução do processo deve satisfazer a propriedade de ergodicidade, a qual implica em ser sempre possível alcançar qualquer estado particular a partir de qualquer outro estado, tomando-se uma sequência suficiente de passos para tal fim.
- A terceira exigência advém da própria condição de equilíbrio, esta, por sua vez, é declarada pela expressão

$$\sum_{\zeta} p_{\mu} P(\mu \rightarrow \zeta) = \sum_{\zeta} p_{\zeta} P(\zeta \rightarrow \mu), \quad (1.15)$$

denotando que as taxas na qual o sistema faz transições sobre um estado particular  $\mu$  devem ser iguais, sendo  $p_{\mu}$  e  $p_{\zeta}$  as probabilidades de num certo tempo o sistema estar nos respectivos estados  $\mu$  e  $\zeta$ . Pois bem, a exigência é dada pela denominada equação de balanço detalhado, dada como

$$p_{\mu} P(\mu \rightarrow \zeta) = p_{\zeta} P(\zeta \rightarrow \mu), \quad (1.16)$$

a qual garante que após um certo número de iterações o processo tenderá a uma distribuição de equilíbrio.

Portanto, escolhendo-se a distribuição de Boltzmann, o esquema do MC estabelece a seguinte relação entre as probabilidades de transição entre dois estados dados  $\mu$  e  $\zeta$ ,

$$\frac{P(\mu \rightarrow \zeta)}{P(\zeta \rightarrow \mu)} = e^{-\beta(E_{\zeta} - E_{\mu})}. \quad (1.17)$$

Dando prosseguimento, a questão central agora é eleger um algoritmo eficiente, ou seja, que percorra agilmente o espaço dos estados, fornecendo uma seleção ampla de estados diferentes. O denominado algoritmo de Metropolis é o mais famoso algoritmo de MC, o qual é conhecido por produzir uma amostragem satisfatória para uma enorme variedade de modelos físicos. A prescrição de Metropolis[48] é dada por:

$$P(\mu \rightarrow \zeta) = \begin{cases} e^{-\beta(E_{\zeta} - E_{\mu})} & \text{se } (E_{\zeta} - E_{\mu}) > 0 \\ 1 & \text{caso contrário,} \end{cases} \quad (1.18)$$

denotando que se selecionamos um estado  $\zeta$  com energia menor ou igual a do presente estado do sistema, devemos sempre aceitar a transição para aquele, caso contrário, podemos vir a aceitá-lo com a probabilidade dada acima.

No planejamento do algoritmo há ainda que se considerar outras questões até que se obtenha um procedimento completo que dê conta de resolver os problemas de interesse. Por exemplo, temos as chamadas condições iniciais, que tratam do preparo do sistema para o início da simulação; a verificação do regime de equilíbrio; a medida dos valores esperados e o cálculo dos erros estatísticos.

No estudo das transições de fase, particularmente, a pesquisa dada por métodos numéricos equiparou-se em nível de importância ao conhecimento produzido pelos métodos analíticos e pelas investigações experimentais, sendo que em algumas circunstâncias

boa parte do comportamento físico do sistema é prescrita pelas medidas obtidas de simulação[49]. Este é o caso do modelo de Ising estendido para três dimensões[50], o qual ainda carece de resultados exatos. Salientamos, ademais, que há um arquivo bibliográfico extenso desta área de pesquisa, e que se mostra cada vez mais específico[51]. Por exemplo, identificamos uma categoria de resultados que tratam das estratégias de geração e manipulação da amostragem estatística dos dados (microestados ou configurações do sistema), como é o caso da técnica do Histograma de Ferrenberg e Swendsen[52], e o mais recente algoritmo de Wang e Landau[53]. Outra classe de análise numérica é a Escala de Tamanho Finito[48], cuja idéia central é obter os valores críticos a partir de extrapolações sobre sistemas finitos.

## 1.4 O Modelo Baxter-Wu

O conceito de modelo desempenhou um papel essencial na própria construção da teoria e, mais além, entendemos que um modelo pode encerrar informações interessantes e originais, implicando em referenciar-mos-lo no plano geral de sistematização da fenomenologia crítica. Como colocado por Baxter[54], um modelo físico é uma representação simplificada de um sistema real, sendo possível especificar a função energia, os estados característicos e obter respostas qualitativas do comportamento dos sistemas reais próximo a  $T_c$ . Entretanto resolvendo-se um modelo com a mesma dimensão e simetrias de um sistema real, a universalidade assegura que os dados obtidos correspondem aos expoentes críticos exatos do sistema físico.

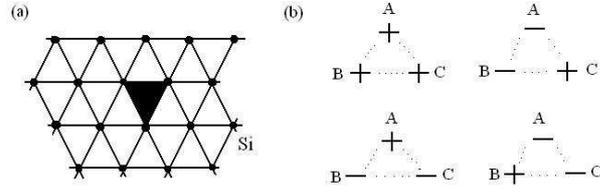
Os modelos com funções partições resolvidas exatamente podem ser reunidos em quatro classes: os unidimensionais; os de dimensionalidade infinita; o Modelo Esférico e os modelos bidimensionais. Dentre os bidimensionais, destacamos o de Ising[2, 34, 48], que desfruta de uma posição singular na teoria; o denominado Modelo de Oito-Vértices, resolvido exatamente por Baxter[54] e que promoveu uma compreensão mais profunda dos conceitos de escala e universalidade; e o modelo Baxter-Wu[55], cuja solução analítica foi dada em 1973 por Baxter e Wu, encontrando a transição contínua na mesma temperatura crítica do modelo de Ising na rede quadrada, porém com expoentes críticos distintos dos de Ising e iguais aos do modelo de Potts de 4-Estados[48, 56] ( $\alpha = \nu = 2/3$ ). Em um artigo de revisão excitante, Barber[38] destaca os trabalhos de Baxter e comenta as contribuições dos modelos exatos na teoria crítica.

A motivação que levou à proposição do modelo Baxter-Wu (BW) foi introduzir um modelo de interação magnética que não exibisse a simetria por inversão dos spins e produzisse a transição de fases tipo ordem-desordem. O modelo foi tratado inicialmente por Wood, Griffiths e Merlini[57] no começo da década de 70. O BW descreve um sistema magnético definido na rede cristalina triangular, com as variáveis de spins  $s_i$  assumindo valores  $\pm 1$  e localizadas sobre os vértices da rede, com energia de interação dada por

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j,k \rangle} s_i s_j s_k, \quad (1.19)$$

sendo  $J$  a constante de acoplamento que fixa a escala de energia e o somatório aplicado

aos sítios chamados de primeiros vizinhos, e que formam os triângulos elementares da rede cristalina, como ilustra a Figura (1.1-a).



**Figura 1.1:** (a) Esboço da rede cristalina triangular, destacando a interação de tripletos definida sobre as faces elementares da rede. (b) Arranjos elementares dos quatro estados fundamentais do BW.

Podemos representar a rede original como formada por três subredes triangulares A, B e C, sendo que qualquer face triangular  $(i, j, k)$  contém um sítio da classe A, um da classe B e outro da C. Deste modo fica claro que o modelo apresenta uma invariância por inversão de todos os spins de duas quaisquer subredes. Por esta simetria identificamos que o estado fundamental é satisfeito igualmente por qualquer uma das quatro configurações: uma ferromagnética, com todos os spins para cima ( $s_i = +1$ ), e três ferrimagnéticas, formadas com duas subredes com os spins para baixo ( $s_i = -1$ ) e a terceira com os spins para cima, como mostra a Figura (1.1-b). Como explicitado por Xavier[58], esta simetria não local pode vir a ser espontaneamente rompida em uma temperatura suficientemente baixa devido as flutuações promovidas entre os domínios das configurações fundamentais. Baxter e Wu descreveram a fase ferromagnética[55] escolhendo o parâmetro de ordem como a magnetização por sítio, a qual assume o valor +1 na temperatura nula. Outra escolha possível do parâmetro de ordem é assumir

$$m = \sqrt{\frac{m_A^2 + m_B^2 + m_C^2}{3}}, \quad (1.20)$$

sendo  $m_A$ ,  $m_B$  e  $m_C$  as magnetizações das respectivas subredes. Neste caso  $m$  assume o valor  $N/3$  na temperatura nula, onde  $N$  é o número total de sítios. Podemos escolher ainda a média dos valores absolutos destas magnetizações. Observamos também que a inversão de uma das subredes é equivalente a tomar a constante  $J$  negativa, portanto, sem perda de generalidade pode-se tratar somente o caso da constante de interação positiva para obter o comportamento completo do modelo.

Diversos trabalhos foram desenvolvidos sobre o modelo BW. Há resultados explorando métodos teóricos de GR[59] e medidas usando Monte Carlo e GR de Monte Carlo[60] para o modelo puro e com distribuição de impurezas. Estes dados tratam dos expoentes críticos e de correções de escala, ampliando o conhecimento das propriedades críticas e servindo como testes rigorosos das técnicas aplicadas. Por exemplo, resultados de expansão em séries indicam para o expoente da magnetização[61]  $\beta = 1/12$  e para o expoente da susceptibilidade[57]  $\gamma \approx 1,17$ . Mais recentemente, destacamos o tratamento do modelo por meio de Invariância Conforme[58, 62], que confirmou categoricamente que o BW apresenta a mesma classe de universalidade do modelo de Potts de 4-estados

bidimensional. Estudos da dinâmica crítica[63] determinaram estimativas para o chamado expoente crítico dinâmico  $z$ . Os resultados mais novos tratam de uma análise de escala de tamanho finito, a qual determinou a distribuição crítica do parâmetro de ordem[64] e da avaliação do BW puro e diluído por meio do algoritmo de Wang-Landau[65].

## 1.5 O Modelo Baxter-Wu Spin-1

Esta tese aborda o modelo Baxter-Wu Spin-1 por meio de GR Fenomenológico e técnicas de Escala de Tamanho Finito. O BW Spin-1 é uma extensão fenomenológica do modelo original para o comportamento multicrítico.

Particularmente, consideramos o modelo BW Spin-1 apresentando o termo da interação de três spins e um segundo termo que descreve o acoplamento anisotrópico de spin único. As variáveis de spin estão situadas nos vértices da rede cristalina triangular e assumem os valores  $s_i = \pm 1, 0$ . A energia do modelo é descrita por

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j,k \rangle} s_i s_j s_k + D \sum_{i=1}^N s_i^2, \quad (1.21)$$

$D$  é denominado campo cristalino e o segundo somatório é aplicado aos  $N$  sítios da rede. Neste sentido a descrição do BW Spin-1 é semelhante a do conhecido modelo Blume-Capel[66], que introduziu esta interação cristalina com a extensão do modelo de Ising para spin-1. Especificamente, o comportamento multicrítico do Blume-Capel reside em apresentar um ponto tricrítico separando uma linha de transição de 1<sup>a</sup> ordem de uma linha de transição de 2<sup>a</sup> ordem, ou seja, marca o fim da condição de coexistência de três fases (as duas fases ordenadas  $s_i = +1$  e  $s_i = -1$  e a fase  $s_i = 0$ ), em que as mesmas tornam-se simultaneamente críticas. O comportamento multicrítico vem sendo investigado há pelo menos meio século tanto por estudos teóricos como experimentais. Quanto aos fenômenos tricríticos[67], sabe-se que os expoentes tricríticos diferem dos correspondentes expoentes críticos, e são iguais aos valores clássicos para dimensões  $d \geq 3$ . No caso do BW Spin-1 conjectura-se quanto a presença de um ponto pentacrítico em seu diagrama de fases[58].

O problema central do BW Spin-1, e que nos motivou a este estudo, é a determinação precisa de seu diagrama de fases e de sua classe de universalidade. Por argumentos termodinâmicos podemos inferir algumas informações qualitativas da fenomenologia do diagrama de fases do modelo. No limite da temperatura nula ( $T = 0$ ) e para valores do campo cristalino  $D < 2J$  a rede triangular bidimensional com  $N$  sítios tem como estados fundamentais as mesmas quatro fases ordenadas do BW Spin-1/2, com os spins assumindo os valores  $\pm 1$ . Entretanto, para valores  $D > 2J$  o estado fundamental é dado por uma única fase com todos os spins  $s_i = 0$  e magnetização nula, sendo que este microestado é o que minimiza a energia livre. Uma transição de fases descontínua ocorre em  $D = 2J$ , com as cinco fases descritas coexistindo. Por outro lado, em temperaturas suficientemente baixas e valores do campo cada vez mais decrescentes ( $D \rightarrow -\infty$ ) o BW Spin-1 fica equivalente ao BW original, com apenas  $s_i = \pm 1$  e espera-se portanto a

presença da transição contínua, onde as quatro fases ordenadas tornam-se iguais à fase paramagnética.

O estudo que nos apresentou o contexto da investigação do BW Spin-1 foi a análise de Invariância Conforme (IC) feita por Xavier[58] e que forneceu uma descrição quantitativa do diagrama de fases junto com uma avaliação preliminar do comportamento crítico. O estudo comparou o BW Spin-1 com outros dois modelos, o BW Spin-1/2 diluído[68] e o Potts de 4-estados diluído[69]. No primeiro caso, foi notado que o acoplamento cristalino  $D$  do BW Spin-1 faz correspondência ao potencial químico do BW diluído. No segundo caso, foi ressaltado que o modelo de Potts de 4-estados diluído pertence à classe de universalidade do seu correspondente sem diluição, o Potts de 4-estados, que por sua vez é a mesma classe do BW Spin-1/2. A partir destas considerações, pôde-se conjecturar que o BW Spin-1 deve pertencer também a esta classe de universalidade. Para valores finitos do campo cristalino e temperaturas suficientemente baixas, a IC revelou o diagrama de fases do BW Spin-1 apresentando uma linha crítica e uma linha de 1<sup>a</sup> ordem separadas por um ponto multicrítico. Este resultado discorda explicitamente do BW diluído, que apresenta a transição contínua somente no limite  $D \rightarrow -\infty$ . Quanto aos valores críticos, a IC sugere que os expoentes do BW Spin-1 variam ao longo da linha crítica. Esta previsão difere do comportamento do Potts de 4-estados diluído, o qual apresenta a curva crítica governada por apenas um único ponto fixo, exibindo ao longo da linha de 2<sup>a</sup> ordem e no ponto tricrítico os mesmos expoentes do modelo de Potts de 4-estados puro[58, 69]. Portanto, entendemos que a descrição das propriedades do modelo BW Spin-1 não está concluída.

A proposta que apresentamos para tentar solucionar este assunto consta de dois estudos. O primeiro trata de uma análise de GR de Campo Médio, que resolve magnetizações definidas para aglomerados finitos de sítios, fornecendo uma relação de recursão para a linha crítica. Estudamos duas versões do método: a original (GRCM) e de Volume-Superfície (GRVS). O segundo estudo é uma análise minuciosa de Monte Carlo, composta de duas partes: a primeira é uma aplicação intensiva de simulações em vista de obter o comportamento termodinâmico de algumas grandezas físicas, como o calor específico e a susceptibilidade magnética. Neste esquema usamos o algoritmo de Metropolis e a técnica do Histograma, e obtemos os dados críticos por meio de Escala de Tamanho Finito (ETF). A segunda parte da análise de MC usa a relação de escala da distribuição de probabilidades do parâmetro de ordem, e tem por objetivo obter a função crítica que define a classe de universalidade do modelo. Tratamos ainda da região do diagrama de fases que exhibe as transições descontínuas. Caracterizamos estas transições com a técnica da Mistura dos Campos de Escala, que permite obtermos uma estimativa precisa do ponto multicrítico.

As considerações deste trabalho estão organizadas da seguinte forma. No capítulo 2 apresentamos uma síntese dos métodos utilizados, destacando as relações principais. Mostramos no capítulo 3 a verificação do GRCM para o modelo BW e seguimos com os resultados de GRCM para o BW Spin-1. O capítulo 4 relata o comportamento termodinâmico e a análise de ETF para o BW Spin-1, mostrando ainda o teste dos procedimentos para o BW puro. O capítulo 5 trata da avaliação do comportamento crítico do BW Spin-1 e da estimação do diagrama de fases por meio da distribuição do parâmetro de ordem e da Mistura dos Campos. Expomos as conclusões no capítulo 6.

Fechamos esta introdução declarando que este estudo representa uma resolução numérica do comportamento do modelo BW Spin-1, onde constatamos que o diagrama de fases apresenta um ponto multicrítico e o modelo tem a mesma classe de universalidade crítica do modelo BW original.

# Capítulo 2

---

## Métodos Empregados

### 2.1 Grupo de Renormalização de Campo Médio

As aproximações fenomenológicas do grupo de renormalização proporcionam algumas informações gerais sobre o comportamento crítico. Em essência, o comportamento crítico aproximado de um modelo para a rede infinita é obtido quantitativamente por meio de hipóteses de escala de tamanho finito, e com a determinação exata de algumas quantidades físicas para aglomerados finitos de sítios. Entre os formalismos fenomenológicos há o Grupo de Renormalização de Campo Médio (GRCM)[44], que foi estendido em diferentes versões e aplicado a várias classes de modelos, como redes de spins e problemas de percolação[39].

O GRCM está baseado na comparação do parâmetro de ordem para diferentes redes finitas na presença de campos de contorno de quebra de simetria. Seja então um bloco de  $N$  sítios com spins interagentes, e com um valor fixo  $b$  atribuído aos spins da vizinhança do mesmo. A magnetização por spin é  $m_N(\mathbf{K}, h; b)$ , onde o vetor  $\mathbf{K}$  representa todas as constantes de interação reduzida presentes no Hamiltoniano do sistema (por exemplo,  $K_1 = \beta J_1$ , em que  $J_1$  é a interação de primeiros vizinhos e  $\beta = 1/k_B T$ ),  $h = \beta H$  é o campo magnético externo reduzido e  $b$  é o campo de contorno, que representa magnetizações efetivas.

Para dois blocos com  $N'$  e  $N$  sítios ( $N' < N$ ), o GRCM assume a seguinte relação de escala entre as respectivas magnetizações  $m_{N'}$  e  $m_N$

$$m_{N'}(\mathbf{K}', h'; b') = l^{d-y_H} m_N(\mathbf{K}, h; b), \quad (2.1)$$

sendo o fator de escala  $l = (N/N')^{1/d}$ ,  $d$  é a dimensão da rede e  $y_H$  o expoente magnético.

A relação é obedecida pelo parâmetro de ordem na região crítica e no limite termodinâmico.

As magnetizações são pequenas próximo ao ponto crítico, portanto é razoável tomar os campos  $b \ll 1$  e  $b' \ll 1$ , assim como  $h \ll 1$  e  $h' \ll 1$ , uma vez que qualquer sistema finito não tem magnetização espontânea. Uma expansão nas magnetizações permite escrever

$$m_N(\mathbf{K}, h; b) = f_N(\mathbf{K}) b + g_N(\mathbf{K}) h, \quad (2.2)$$

em que  $f_N(\mathbf{K}) = \frac{\partial m_N(\mathbf{K}, h; b)}{\partial b} |_{h=0, b=0}$  e  $g_N(\mathbf{K}) = \frac{\partial m_N(\mathbf{K}, h; b)}{\partial h} |_{h=0, b=0}$ .

A relação de escala é válida também para os campos  $b'$  e  $b$ ,

$$b' = l^{d-y_H} b. \quad (2.3)$$

A partir das equações acima, obtemos

$$\begin{aligned} f_{N'}(\mathbf{K}') &= f_N(\mathbf{K}) \\ g_{N'}(\mathbf{K}') h' &= l^{d-y_H} g_N(\mathbf{K}) h. \end{aligned} \quad (2.4)$$

A primeira equação é uma relação de recursão para as constantes de acoplamento, livre de qualquer expoente. Com a segunda equação estimamos o expoente crítico magnético  $y_H$ . A primeira relação escalar não provê o diagrama de fluxo completo no espaço multidimensional dos parâmetros do Hamiltoniano, entretanto estima expoentes e superfícies críticas locais a partir do mapa  $K_1 \rightarrow K'_1 = R(K_1, K_2/K_1, K_3/K_1, \dots)$  para valores fixos das razões dos acoplamentos, sendo  $\mathbf{K} = (K_1, K_2, \dots)$ . Portanto a solução de ponto fixo ( $K_1 = K'_1 = K_1^*$ ) determina uma superfície crítica, e o expoente  $\nu$  associado ao comprimento de correlação é dado por

$$\nu = \frac{\ln l}{\ln \lambda_T}, \quad (2.5)$$

em que  $\lambda_T = (\partial K'_1 / \partial K_1) |_{\mathbf{K}^*}$ . Para o expoente magnético  $y_H$ , obtemos  $g_{N'}(\mathbf{K}^*) = l^{d-2y_H} g_N(\mathbf{K}^*)$  a partir da relação  $h' = l^{d-2y_H} h$ .

Entretanto observa-se algumas dificuldades a cerca do GRCM. Para blocos cada vez maiores a aplicação do método torna-se uma tarefa custosa e, em geral, dada a própria natureza do GRCM, o método não reproduz os resultados exatos mesmo crescendo indefinidamente o tamanho dos sistemas.

## 2.2 Grupo de Renormalização de Volume-Superfície

O Grupo de Renormalização de Volume-Superfície (GRVS), proposto também por Indekeu e colaboradores[44], descreve as magnetizações fixas que contornam os aglomerados de spins como quantidades de superfície, em acordo com uma derivação rigorosa de escala de tamanho finito[70]. A relação de GRVS para os campos de contorno é dada por

$$b' = l^{y_{HS}} b, \quad (2.6)$$

sendo  $y_{HS}$  o correspondente expoente crítico de superfície.

A relação de escala para as magnetizações dos blocos continua a ser dada pela equação (2.1), e desta forma temos que considerar três blocos distintos ( $N > N' > N''$  sítios) de modo a conseguirmos uma transformação de GR.

Partindo do procedimento anterior que estima as magnetizações dos blocos e que, neste caso, admite respectivamente  $m_N(\mathbf{K}, h; b)$ ,  $m_{N'}(\mathbf{K}', h'; b')$  e  $m_{N''}(\mathbf{K}'', h''; b'')$ , e tomando os campos externos nulos ( $h = h' = h'' = 0$ ), obtemos

$$\begin{aligned} f_{N'}(\mathbf{K}') &= l_{NN'}^{d-y_H-y_{HS}} f_N(\mathbf{K}) \\ f_{N''}(\mathbf{K}'') &= l_{N'N''}^{d-y_H-y_{HS}} f_{N'}(\mathbf{K}'), \end{aligned} \quad (2.7)$$

com os respectivos fatores de escala  $l_{NN'} = (N/N')^{1/d}$  e  $l_{N'N''} = (N'/N'')^{1/d}$ .

As equações encontradas constituem relações de recursão com o expoente ( $d-y_H-y_{HS}$ ) determinado unicamente, impondo-se a mesma solução de ponto fixo ( $\mathbf{K} = \mathbf{K}' = \mathbf{K}'' = \mathbf{K}^*$ ) sobre os dois mapas. Duas estimativas para os expoentes críticos  $\nu$ ,  $y_H$  e  $y_{HS}$  são ainda obtidas considerando-se cada relação dada em (2.7), visto que ambos os fatores de escala são diferentes. Não há distinção entre os métodos GRCM e GRVS usando-se blocos pequenos, no entanto para sistemas grandes a aproximação de GRVS produz resultados melhores. No capítulo 3 mostramos a aplicação destes dois procedimentos para o modelo BW Spin-1.

## 2.3 Simulações de Monte Carlo e Escala de Tamanho Finito

A mais importante classe de métodos numéricos usada para resolver problemas em Física Estatística é a de simulações de Monte Carlo. O método MC permite simular a flutuação térmica aleatória do sistema físico a partir de um estado para o outro no decorrer de um experimento. Há várias técnicas de análise de dados destinadas a complementar o estudo das simulações, como o Histograma Simples, a Escala de Tamanho Finito (ETF) e o

GR de Monte Carlo, sendo estas duas últimas importantes na discriminação do fenômeno crítico.

Particularmente, tomar as simulações combinadas com o método do Histograma permite obter mais informação a partir de uma simulação realizada em uma única temperatura. Esta estratégia além de aumentar a precisão do método MC, oferece vantagens mais práticas do que a de realizar as simulações pelo procedimento padrão. Com este propósito usamos o algoritmo de Metropolis junto com o Histograma Simples para obtermos o comportamento térmico de equilíbrio do modelo BW Spin-1. Em seguida investigamos as propriedades críticas usando ETF.

O método do Histograma Simples consiste em fazer a simulação em alguma temperatura específica  $T_0$  ( $\beta_0 = 1/k_B T_0$ ) e extrapolar os resultados para outras temperaturas vizinhas[48, 50, 52]. A equação fundamental para a correspondente média térmica em uma temperatura  $T$  é dada por

$$Q_M = \frac{\sum_{i=1}^M Q_i e^{-(\beta-\beta_0)E_i}}{\sum_{j=1}^M e^{-(\beta-\beta_0)E_j}}, \quad (2.8)$$

para um conjunto de  $M$  medidas da grandeza  $Q$ , representadas por  $Q_i$ , as quais são estimadas durante o processo de MC. Observamos que  $E_i$  é a energia total referente a um microestado do sistema. Em alguns casos é possível adotar um histograma  $H(E, Q)$ , avaliando o número de vezes em que o par de valores  $(E, Q)$  ocorreu em todo o processo. Por exemplo, a energia interna é estimada por

$$U = \frac{\sum_E E H(E) e^{-\Delta\beta E}}{\sum_E H(E) e^{-\Delta\beta E}}, \quad (2.9)$$

sendo  $H(E)$  o histograma unidimensional das energias dos estados amostrados no MC e  $\Delta\beta = (\beta - \beta_0)$ .

No entanto o método é sensível à faixa em que consideramos a extrapolação, produzindo erros estatísticos pronunciados para temperaturas  $T$  muito afastadas da temperatura da simulação original. Contudo é possível estimar um limite de validade para a aplicação do Histograma, calculado diretamente a partir das medidas do MC em  $T_0$ , como sugerido em [48]. Esta faixa de referência para a variação das temperaturas ( $\Delta T = T - T_0$ ) é dada por

$$\Delta T = \sqrt{\frac{T_0^2}{C(T_0)}}, \quad (2.10)$$

$C(T_0)$  é a capacidade térmica determinada em  $T_0$ . Simulações longas podem fornecer medidas razoáveis até  $2\Delta T$ .

Tratando com sistemas de tamanho finito, a região crítica é analisada usando o Histograma para determinar o comportamento das grandezas termodinâmicas, de modo a

localizar com certa precisão a posição de máximo destas derivadas, e definindo neste ponto uma temperatura de transição efetiva da rede finita, dada por  $T_c(L)$ . O método de Escala de Tamanho Finito, desenvolvido inicialmente por Fisher[?], apresenta-se como uma técnica bem estabelecida, sendo referência no estudo numérico do comportamento crítico. A ETF avalia o comportamento crítico no limite termodinâmico, examinando como as grandezas medidas para sistemas finitos variam com o tamanho do sistema[48, 51, 50].

A ETF se manifesta pelas conhecidas formas de escala. Mostramos abaixo as correspondentes relações de escala para a magnetização, o calor específico e a susceptibilidade magnética por spin

$$\begin{aligned} m_L(t) &= L^{-\beta/\nu} \tilde{m}(tL^{1/\nu}) \\ c_L(t) &= L^{\alpha/\nu} \tilde{c}(tL^{1/\nu}) \\ \chi_L(t) &= L^{\gamma/\nu} \tilde{\chi}(tL^{1/\nu}), \end{aligned} \tag{2.11}$$

em que  $L$  é o tamanho linear da rede,  $t = (T - T_c)/T_c$  é a temperatura reduzida e  $T_c$  é a temperatura crítica no limite termodinâmico. Definimos  $x_t = tL^{1/\nu}$  como a variável de escala da temperatura, e  $\tilde{m}(x_t)$ ,  $\tilde{c}(x_t)$  e  $\tilde{\chi}(x_t)$  são denominadas funções de escala. Os máximos nas derivadas termodinâmicas ocorrem nas temperaturas efetivas  $T_c(L)$  definidas em  $x_t = x_t^*$ , sendo que as funções de escala são máximas ou apresentam um gradiente máximo, como no caso da magnetização. Note que a dependência com o tamanho  $L$  é descrita explicitamente nas equações acima e os expoentes críticos  $\beta$ ,  $\alpha$ ,  $\gamma$  e  $\nu$  têm os valores apropriados para o sistema infinito.

As temperaturas  $T_c(L)$  dependem de  $L$  na forma

$$T_c(L) = T_c + T_c x_t^* L^{-1/\nu}, \tag{2.12}$$

de modo que o gráfico de  $T_c(L)$  contra  $L^{-1/\nu}$ , atribuído a um conjunto de tamanhos, produz uma estimativa para  $T_c$  a partir da extrapolação para  $L$  infinito. Outra técnica para determinar a temperatura crítica é a Intersecção do Cumulante de Binder[?].

O expoente crítico  $\nu$  é associado à divergência do comprimento de correlação exibida no limite termodinâmico e em  $T_c$ . Estimativas independentes de  $\nu$  são dadas pelos comportamentos de escala de outras quantidades[50]. Por exemplo, a derivada logarítmica de qualquer potência da magnetização exibe escala com  $L^{1/\nu}$ . Estas derivadas são expressas pela relação

$$\frac{\partial}{\partial K} \ln \langle m^n \rangle = \left[ \frac{\langle m^n E \rangle}{\langle m^n \rangle} - \langle E \rangle \right] = a_n L^{1/\nu}, \tag{2.13}$$

sendo  $K$  a constante de acoplamento reduzida e  $a_n$  uma constante.

Determinando  $\nu$  com certa precisão, volta-se à equação (2.12) para obter estimativas de  $T_c$ . As temperaturas  $T_c(L)$  são medidas pelas derivadas em (2.13), bem como pelo uso de grandezas mais comuns, como o calor específico e a susceptibilidade magnética, ou ainda com a derivada de  $m$ . Estas últimas são obtidas respectivamente por

$$\begin{aligned} c &= K^2 L^{-d} (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2), \\ \chi &= K L^d (\langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2), \\ \frac{\partial}{\partial K} \langle m \rangle &= \langle m | E \rangle - \langle m \rangle \langle E \rangle, \end{aligned} \tag{2.14}$$

para redes cristalinas com dimensão espacial  $d$ . Os expoentes  $\beta$ ,  $\alpha$  e  $\gamma$  são medidos tomando-se as respectivas relações de escala das grandezas termodinâmicas associadas, dadas em (2.11).

## 2.4 Distribuição de Probabilidades do Parâmetro de Ordem

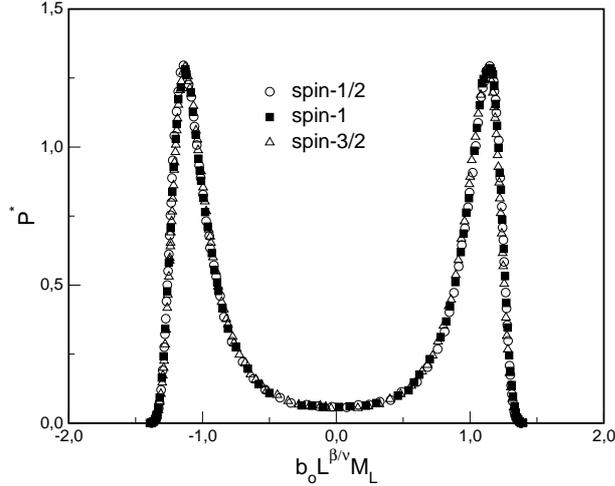
Outra quantidade importante na descrição do comportamento crítico é a denominada função distribuição do parâmetro de ordem, representada para sistemas magnéticos por  $P(M)$ , sendo  $M$  a magnetização por sítio da rede. Esta função fornece a distribuição dos microestados do sistema com respeito a sua magnetização. Para modelos tipo Ising exibindo a transição contínua, verifica-se com redes grandes e temperaturas menores que  $T_c$  que a distribuição  $P(M)$  apresenta dois picos centrados nas magnetizações espontâneas  $+M$  e  $-M$ . Exatamente em  $T_c$  os dois picos ainda sobrevivem, e para temperaturas bem maiores que  $T_c$ ,  $P(M)$  tem um pico único centrado na magnetização nula[?].

Analogamente às hipóteses de ETF, há uma relação de escala para a distribuição crítica  $P_L(M)$ , como sugerem Binder e Bruce[?, 71]. A relação é dada por

$$P_L(M) = b_0 L^{\beta/\nu} P^*(\tilde{M}), \tag{2.15}$$

para um sistema finito e de dimensão linear  $L$ , em que  $b = b_0 L^{\beta/\nu}$  é o fator de escala, sendo  $b_0$  uma constante,  $\beta$  e  $\nu$  são expoentes críticos,  $\tilde{M} = bM$  é a magnetização escalada e  $P^*(\tilde{M})$  é a função de escala universal característica da classe de universalidade. Portanto sistemas na mesma classe têm funções de escala idênticas. Um exemplo interessante é mostrado na Figura (2.1), que trata das distribuições normalizadas  $P^*(\tilde{M})$  para os modelos de Ising Spin-1/2, Spin-1 e Spin-3/2 bidimensionais, e que foram medidas nas respectivas temperaturas críticas.

Entretanto a distribuição  $P_L(M)$  depende das condições de contorno impostas sobre as redes finitas, e o próprio esquema de obtenção da função assume um caráter importante.



**Figura 2.1:** Função de escala  $P^*(\tilde{M})$  para o Ising bidimensional Spin-1/2, Spin-1 e Spin-3/2 sobre redes quadradas com  $L = 32$ . Gráfico obtido da referência [72].

No estudo do BW Spin-1 tratamos dois procedimentos distintos para a determinação de  $P_L(M)$ . O primeiro consiste em tomar uma rede triangular grande e dividi-la exatamente em blocos similares de tamanho  $L$ . A distribuição crítica é estimada para os blocos, com as simulações realizadas em  $T_c$ . Deste modo é necessário o conhecimento da temperatura crítica do modelo, assim como dos expoentes  $\beta$  e  $\nu$ , os quais são usados na escala da magnetização. Este método é devido a Binder[?] e o chamamos em nosso estudo de método dos blocos.

O segundo caso consiste em obter a *criticalidade* (temperatura crítica, expoentes e a distribuição crítica) por uma análise da própria função distribuição avaliada na suposta vizinhança de  $T_c$ , adotando-se a relação de ETF para as temperaturas de transição. As simulações são feitas individualmente para cada rede triangular de tamanho  $L$ . Esta análise foi usada com sucesso na referência [72] no modelo de Ising. Vamos denominá-la método das redes para diferenciar do procedimento anterior.

## 2.5 Mistura dos Campos de Escala

No tratamento das transições de fase de 1<sup>a</sup> ordem, as quais são caracterizadas distintamente por coexistência de fases, usamos o método conhecido como Mistura dos Campos de Escala, cuja aplicação surgiu na caracterização de pontos críticos em fluidos[73].

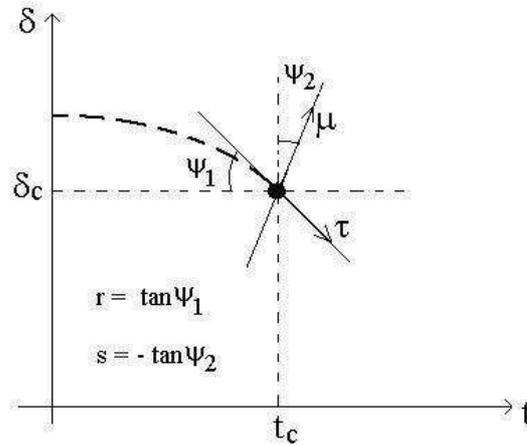
O método define grandezas mais adequadas à descrição dos diagramas de fases não simétricos[67], propondo campos de escala novos, dados como uma combinação linear dos campos termodinâmicos originais (temperatura e campo cristalino por exemplo), e considera ainda como válidos os conceitos de invariância de escala e universalidade para as distribuições de probabilidades correspondentes.

A Figura (2.2) mostra um diagrama de fases descrito pelos campos termodinâmicos

temperatura  $t$  e campo  $\delta$ , e apresenta uma linha de coexistência de fases cujo término é indicado pelo ponto crítico  $(t_c, \delta_c)$ . A falta de simetria na linha de separação entre fases distintas implica em se tomar os campos de escala misturados, ou seja, escolhe-se outros campos de escala relevantes dados por [73]

$$\begin{aligned}\tau &= t - t_c + s(\delta - \delta_c), \\ \mu &= \delta - \delta_c + r(t - t_c),\end{aligned}\tag{2.16}$$

sendo  $r$  e  $s$  parâmetros que controlam o grau da mistura. Por exemplo, se  $r = s = 0$  tem-se um diagrama simétrico.



**Figura 2.2:** Esquema geral de uma linha de transição de primeira ordem (linha tracejada) terminando num ponto crítico (círculo cheio).  $t$  e  $\delta$  são os campos termodinâmicos e  $\tau$  e  $\mu$  são os novos campos de escala.

No caso simétrico do modelo de Ising num campo externo  $H$ , as quantidades extensivas  $\langle u \rangle$  e  $\langle M \rangle$  são dadas respectivamente por

$$\begin{aligned}\langle u \rangle &= L^{-2} \langle \sum s_i s_j \rangle = L^{-2} \frac{\partial Z(t, \delta)}{\partial t}, \\ \langle M \rangle &= L^{-2} \langle \sum s_i \rangle = L^{-2} \frac{\partial Z(t, \delta)}{\partial \delta}\end{aligned}\tag{2.17}$$

onde  $t = \beta J$ ,  $\delta = h = \beta H$  e  $Z = Z(t, \delta)$  é a função partição descrita originalmente em termos dos campos  $t$  e  $\delta$ . Associamos aqui as quantidades  $u$  e  $M$  como operadores

conjugados dos campos  $t$  e  $\delta$ . No caso não simétrico tratado neste trabalho, equação (1.21), temos

$$\begin{aligned}\langle u \rangle &= L^{-2} \langle \sum s_i s_j s_k \rangle = L^{-2} \frac{\partial Z(t, \delta)}{\partial t}, \\ \langle q \rangle &= L^{-2} \langle \sum s_i^2 \rangle = -L^{-2} \frac{\partial Z(t, \delta)}{\partial \delta},\end{aligned}\tag{2.18}$$

onde se vê claramente que não correspondem aos operadores conjugados de  $\tau$  e  $\mu$ . Esses operadores podem entretanto ser obtidos através da definição

$$\begin{aligned}\langle \mathcal{E} \rangle &= L^{-2} \frac{\partial \ln Z(t, \delta)}{\partial \tau}, \\ \langle \mathcal{D} \rangle &= L^{-2} \frac{\partial \ln Z(t, \delta)}{\partial \mu}.\end{aligned}\tag{2.19}$$

A partir das equações em (2.16) obtemos as relações  $t = t(\tau, \mu)$  e  $\delta = \delta(\tau, \mu)$ , as quais são necessárias para se aplicar as derivadas indicadas em (2.19), de modo que obtemos as relações

$$\begin{aligned}\langle \mathcal{E} \rangle &= \frac{1}{1 - rs} (u - rq), \\ \langle \mathcal{D} \rangle &= \frac{1}{1 - rs} (q - su).\end{aligned}\tag{2.20}$$

A distribuição de interesse nesse caso é  $P_L(\mathcal{E}, \mathcal{D})$ . Entretanto, as simulações de Monte Carlo podem gerar a distribuição conjunta  $P_L(u, q)$ . Porém, esta última está relacionada a anterior através da equação

$$P_L(u, q) = \frac{1}{1 - rs} P_L(\mathcal{E}, \mathcal{D}).\tag{2.21}$$

Argumentos de ETF e procedimentos de GR indicam que na região crítica e para sistemas suficientemente grandes, a distribuição de probabilidade conjunta  $P_L(\mathcal{E}, \mathcal{D})$  segue uma relação de escala (para mais detalhes veja as referências indicadas em [67]), servindo

também para caracterizar a classe de universalidade. A quantidade que iremos empregar é a distribuição unidimensional  $P_L(\mathcal{D})$ , obtida com a integração da variável  $\mathcal{E}$ , visto que  $\mathcal{D}$  é o operador conjugado ao correspondente campo de escala  $\mu$ . Escrevemos a relação de escala para  $P_L(\mathcal{D})$  em uma notação simples como [73]

$$P_L(\mathcal{D}) = b(L) P^*(b(L) (\mathcal{D} - \langle \mathcal{D}_c \rangle)), \quad (2.22)$$

em que  $b(L) = b_o L^{\beta/\nu}$  é o fator de escala. Medindo-se distribuições  $P_L(\mathcal{D})$  com norma e variância unitária para redes de qualquer tamanho  $L$  ficamos com três parâmetros: a temperatura reduzida  $t = (k_B T/J)^{-1}$ , o campo cristalino  $\delta = D/J$  e o parâmetro de mistura  $s$ . Com o uso da técnica do Histograma e com o ajuste adequado destes parâmetros pode-se analisar a forma da distribuição  $P_L^*(\mathcal{D})$  e pesquisar medidas que dêem comportamentos com dois picos simétricos, obtendo-se deste modo um critério para determinação de coexistência de fases.

# Capítulo 3

---

## Aproximação de GR para o BW Spin-1

Antes de expormos os resultados de GRCM para o BW Spin-1/2 e Spin-1, discutimos os aspectos relevantes apreciados na análise. A primeira questão que surgiu foi quanto as escolhas da geometria e dos tamanhos dos blocos finitos, que devem naturalmente traduzir a geometria triangular da rede infinita e propiciar as interações físicas do modelo.

Considerando a simetria do BW, os sistemas de blocos devem acomodar as fases magnéticas de um modo equivalente. Esta condição poderia reduzir firmemente o tamanho dos blocos. Entretanto verificamos que ao tomar as magnetizações das subredes  $m_A$ ,  $m_B$  e  $m_C$ , junto com três campos de contorno correspondentes, dados por  $b_A$ ,  $b_B$  e  $b_C$ , produz a mesma equação que a do caso de um bloco homogêneo com magnetização  $m$  e campo  $b$ . Este resultado claramente condiz com a situação de coexistência das quatro fases dominantes em baixas temperaturas, como sabemos, as três fases ferrimagnéticas e uma ferromagnética. Isto significa que podemos considerar apenas o arranjo ferromagnético, tomando blocos com qualquer número de sítios, resultando em uma considerável simplificação na resolução numérica das funções  $f_N(K, \delta)$ .

Os blocos usados são triângulos simétricos com  $N = 6, 10, 15, 21, 28$  spins, sendo que com o BW Spin-1 foi considerado até 15 spins. A título de ilustração mostramos na Figura (3.1) um bloco com 6 spins interagentes. As magnetizações são determinadas exatamente partindo dos ensembles definidos sobre os respectivos Hamiltonianos dos blocos. Por exemplo, para um bloco com 6 spins escrevemos a relação

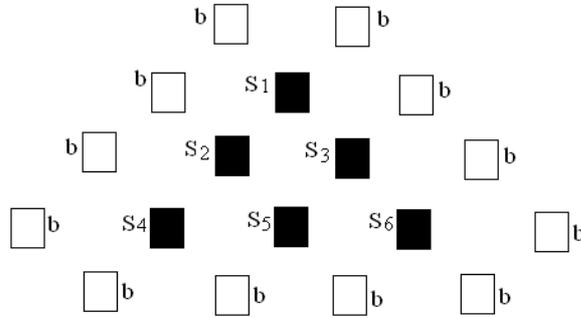
$$m_6(K, \delta, h; b) = \frac{\mathbf{Tr} \left[ \sum_{i=1}^6 s_i e^{-\beta \mathcal{H}_6} \right]}{6 \mathbf{Tr} e^{-\beta \mathcal{H}_6}}, \quad (3.1)$$

sendo  $K = \beta J$  e  $\delta = D/J$ , em que partimos de

$$\begin{aligned}
-\beta\mathcal{H}_6 = & K [s_1 s_2 s_3 + s_2 s_4 s_5 + s_2 s_3 s_5 + s_3 s_5 s_6] + \\
& + K [s_1 s_2 + s_1 s_3 + s_3 s_6 + s_5 s_6 + s_4 s_5 + s_2 s_4] b + \\
& + K [3s_1 + s_2 + s_3 + 3s_6 + s_5 + 3s_4] b^2 + \\
& - K \delta [s_1^2 + s_2^2 + s_3^2 + s_4^2 + s_5^2 + s_6^2] + \\
& + h [s_1 + s_2 + s_3 + s_4 + s_5 + s_6],
\end{aligned} \tag{3.2}$$

depois fazemos o campo magnético reduzido  $h$  nulo. Para  $N = 6$  obtemos facilmente as expressões analíticas de  $m_6(K, \delta, h; b)$  e  $f_6(K, \delta)$ , no entanto para  $N \geq 10$  é necessário calcular as quantidades numericamente. Por exemplo, para o BW a magnetização do bloco com seis spins é escrita como

$$\begin{aligned}
m_6 = & \frac{[4K \cosh(4K) + 8K \cosh(2K) + 4K^2 \sinh(4K) + 4K] b^2}{\cosh(4K) + 4 \cosh(2K) + 3} + \\
& + \frac{2K \sinh(4K) b}{\cosh(4K) + 4 \cosh(2K) + 3}.
\end{aligned}$$



**Figura 3.1:** Bloco homogêneo definido na rede triangular com 6 spins ( $s_1, s_2, s_3, s_4, s_5, s_6$ ) e campos de contorno  $b$ .

### 3.1 GR para o BW Spin-1/2

Com o objetivo de testarmos os procedimentos, resolvemos aplicar os esquemas de GRCM e GRVS ao BW Spin-1/2. A Tabela 3.1 apresenta os valores da temperatura crítica e do expoente crítico estimados de acordo com GRCM e a partir de GRVS.

**Tabela 3.1:** Resultados para o modelo BW Spin-1/2 de acordo com as aproximações de GRCM e GRVS.

$N - N'$	$k_B T_c / J$ (GRCM)	$\nu$
10 - 6	3,4883	2,7820
15 - 10	2,7349	1,8987
21 - 15	2,5421	1,5588
28 - 21	2,4345	1,3718
extrapolado	2,294(8)	0,70(6)
exato	2,2692	2/3
$N - N' - N''$	$k_B T_c / J$ (GRVS)	$\nu$
15 - 10 - 6	1,7200	1,0688
21 - 15 - 10	2,0794	1,0806
28 - 21 - 15	2,0907	0,9957

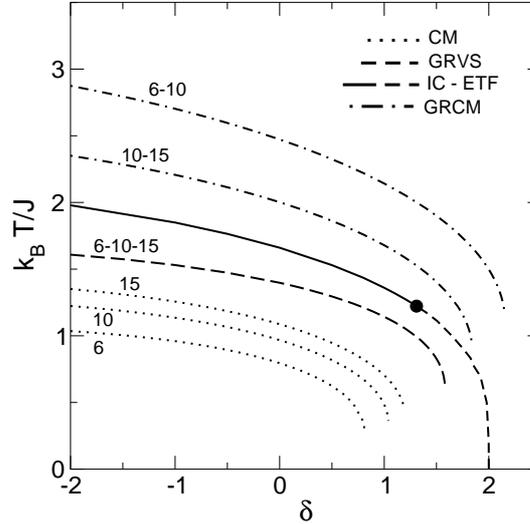
Foi possível obter extrapolações para o GRCM, embora os valores não sejam tão próximos dos resultados exatos. Quanto ao GRVS, os blocos são ainda pequenos para se conseguir uma extrapolação razoável. Mas de modo geral para os dois casos as temperaturas ficam mais próximas do valor exato a medida que crescem os tamanhos dos blocos, sendo interessante que os valores de GRCM são sobrestimados, enquanto os de GRVS são subestimados. Uma característica comum deste grupo de renormalização é prover estimativas fracas do expoente crítico em relação a temperatura crítica. Mesmo assim vemos por este exemplo que é possível obter uma compreensão moderada sobre o comportamento crítico.

### 3.2 GR para o BW Spin-1

Procedemos ao estudo do BW Spin-1 com anisotropia de campo cristalino. Da mesma forma anterior as magnetizações são determinadas como na equação (3.1), no entanto agora cada spin de um bloco assume três valores possíveis  $s_i = \pm 1, 0$ , sendo que para um bloco com  $N$  spins temos ao todo  $3^N$  configurações, implicando em determinarmos as magnetizações numericamente. Devido ao tempo de computação ficamos limitados aos blocos com  $N = 6, 10$  e  $15$  spins.

A Figura (3.2) mostra a estimativa do diagrama de fases no plano  $\delta = D/J$  contra  $k_B T/J$  de acordo com ambos os procedimentos (GRCM e GRVS). O diagrama também apresenta o resultado de Invariância Conforme e ETF obtido independentemente por

Xavier[58], e a aproximação usual de campo médio, a qual assume a condição  $m_N = b$  para qualquer bloco individualmente, resultando em tomar as funções  $f_N(K, \delta) = 1$ .



**Figura 3.2:** Diagrama de fases para o modelo BW Spin-1 na presença de um campo cristalino. Nossos resultados são o GRCM (dois blocos), o GRVS (três blocos) e o CM (um bloco). Mostramos também o resultado de Invariância Conforme[58]. Os tamanhos dos blocos são identificados sobre cada uma das linhas de 2ª ordem aferidas.

As linhas críticas de GR terminam em algum ponto, os quais são identificados como o ponto multicrítico. Linhas de transições de fases de 1ª ordem não são possíveis de serem obtidas por GRCM e GRVS. Acharmos interessante comparar o diagrama de fases obtido pelo GR com o resultado indicado por Invariância Conforme. Notadamente, o GRCM fornece valores sobrestimados da temperatura crítica em relação à linha crítica de IC, enquanto as estimativas de GRVS são subestimadas. Esta disposição é semelhante a apresentada pelos valores referentes ao modelo puro (Tabela 3.1) quando comparados ao valor crítico exato. Para valores do campo cristalino cada vez mais decrescentes o modelo com Spin-1 deve ficar equivalente ao Spin-1/2, e as medidas de GR indicam este comportamento. A Tabela 3.2 mostra as temperaturas críticas para o Spin-1 com o valor do campo  $\delta = -20$  e vemos a concordância destes dados com os valores do Spin-1/2 mostrados na Tabela 3.1, e que foram obtidos com os mesmos tamanhos de blocos.

**Tabela 3.2:** Temperaturas críticas obtidas com GRCM e GRVS para o BW Spin-1 com campo cristalino  $\delta = -20$ .

$N - N'$	$k_B T_c / J$ (GRCM $\delta = -20$ )
10 - 6	3,483252
15 - 10	2,734115
$N - N' - N''$	$k_B T_c / J$ (GRVS $\delta = -20$ )
15 - 10 - 6	1,720054

A exemplo da Invariância Conforme, destacamos que os métodos de GR indicaram linhas críticas até a região com valores positivos do campo cristalino. Entendemos que a descrição do grupo de renormalização representa uma sinalização considerável do caráter do diagrama de fases do BW Spin-1.

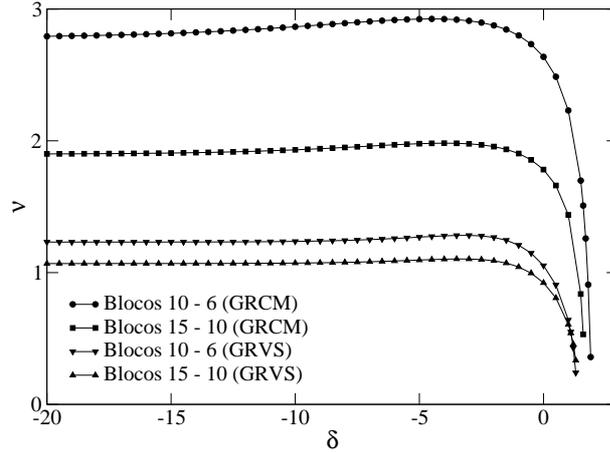
Como indicado no capítulo 2, o expoente crítico  $\nu$  é determinado avaliando-se  $\lambda_T = (\partial K'_1 / \partial K_1)|_{\mathbf{K}^*}$ . Para o GRCM partimos da relação (2.4) entre as funções  $f_N(K, \delta)$  e  $f_{N'}(K', \delta')$  e escrevemos

$$\lambda_T = ((\partial f_N / \partial K)(\partial f_{N'} / \partial K')^{-1})|_{(K^*, \delta = \delta')}.$$

No caso do GRVS a relação entre pares de blocos com  $N$  e  $N'$  sítios é dada por  $f_{N'}(\mathbf{K}') = l_{N, N'}^\phi f_N(\mathbf{K})$ , equação (2.7), sendo  $\phi = d - y_H - y_{HS}$ , e obtemos

$$\lambda_T = \{(\partial f_N(K, \delta) / \partial K) (\partial f_{N'}(K', \delta') / \partial K')^{-1} f_{N'}(K', \delta') / f_N(K, \delta)\}|_{(K^*, \delta = \delta')}.$$

Portanto, avaliamos numericamente as duas relações dadas acima no intervalo de valores do campo cristalino que geraram as temperaturas críticas ( $k_B T / J$ ), e encontramos valores para o expoente crítico  $\nu$  usando a equação (2.5) com os correspondentes fatores de escala. Estes resultados estão resumidos no gráfico da Figura (3.3), indicando o expoente  $\nu$  variando ao longo das linhas de 2<sup>a</sup> ordem.



**Figura 3.3:** Estimativas do expoente crítico  $\nu$  com o campo cristalino de acordo com GRCM e GRVS para o BW Spin-1.

Com o campo cristalino decrescendo os valores de  $\nu$  parecem tender aos resultados correspondentes apresentados pelo BW Spin-1/2, mostrados na Tabela 3.1. Entretanto este comportamento de  $\nu$  pode ser justificado como um resultado próprio destes métodos de GR[39], desde que há somente uma relação de recursão para se analisar, significando que não é possível avaliar se os expoentes mudam ou não com o parâmetro  $\delta$ .

A Tabela 3.3 apresenta as estimativas dos pontos multicríticos ( $K_m, \delta_m$ ) indicados nos termos das curvas críticas de GRCM, GRVS e CM, e também apresenta o valor sugerido por Invariância Conforme.

**Tabela 3.3:** Estimativas do ponto multicrítico para as curvas críticas mostradas na Figura (3.2).

$N - N'$	$k_B T_m / J$ (GRCM)	$\delta_m$
10 - 6	1,1816	2,1523
15 - 10	0,9330	1,8462
$N - N' - N''$	$k_B T_m / J$ (GRVS)	$\delta_m$
15 - 10 - 6	0,6408	1,5835
$N$	$k_B T_m / J$ (CM)	$\delta_m$
6	0,3133	0,8141
10	0,3539	1,0328
15	0,4513	1,1902
$N - N' - N''$	$k_B T_m / J$ (IC-ETF)	$\delta_m$
9 - 6 - 3	1,2225	1,3089

Esta análise para o BW Spin-1 com Grupo de Renormalização Fenomenológico foi reunida com o estudo de Invariância Conforme[58] para uma divulgação conjunta na referência [75].

# Capítulo 4

---

## Escala de Tamanho Finito para o BW Spin-1

Por meio de Escala de Tamanho Finito é possível derivar estimativas de temperaturas e expoentes críticos válidas no limite termodinâmico, com a primazia em avaliar sistemas finitos na região crítica, exigindo-se contudo estratégias para reduzir os erros sistemáticos e estatísticos inerentes à análise.

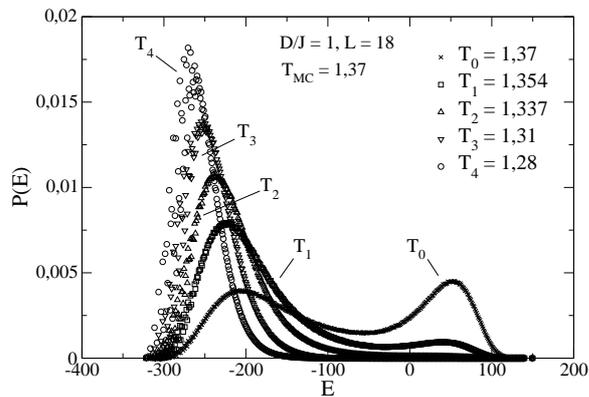
Para o modelo BW Spin-1, definido pelo Hamiltoniano na equação (1.21), tratamos do ensemble canônico, com a temperatura absoluta  $T$  e a anisotropia cristalina  $D$  sendo os parâmetros principais do tratamento termodinâmico. Essencialmente, usamos o algoritmo de Metropolis com a dinâmica de inverter um spin aliado ao Histograma para obter as grandezas físicas em uma faixa de temperaturas, e consideramos uma nova configuração independente a cada passo de MC sobre a rede. As variáveis de spins  $s_i$  assumem os valores  $\pm 1, 0$  e são localizadas sobre os sítios de uma rede triangular bidimensional, dados em um arranjo de dimensões lineares  $L \times L$  e com condições periódicas de contorno. Os tamanhos  $L$  são escolhidos de modo que os estados fundamentais presentes em uma rede infinita são ajustados igualmente sobre qualquer rede finita. Usamos a rotina de geração de números aleatórios conhecida como  $a * x + b$ , a qual requer um par de sementes aleatórias.

Iniciamos as simulações partindo de dois estados: o estado fundamental ferromagnético, em que todos os spins têm valor  $+1$ , ou no chamado *estado de temperatura infinita*, com a rede preparada aleatoriamente. Na maioria das vezes desprezamos  $3 \times 10^5$  configurações iniciais durante o processo de equilíbrio, e fazemos as estatísticas de interesse sobre  $5 \times 10^6$  medidas. A cada passo de MC percorremos a rede de maneira regular, escolhendo em aleatório um valor novo para o spin, o qual é testado de acordo com o critério de Metropolis, dado pela condição (1.18) e, ao final, anotamos as mudanças ocorridas na energia total do sistema, representada por  $E$ , e as magnetizações das subredes, dadas por  $m_A$ ,  $m_B$  e  $m_C$ .

Temos interesse inicial em avaliar a região de transições contínuas em um diagrama de

fases definido pelo campo cristalino ( $D/J$ ) contra a temperatura ( $k_B T/J$ ). Baseados nos resultados de GR e Invariância Conforme[58, 75], decidimos analisar os seguintes valores do campo  $D/J = \{-2; -1, 5; -1; -0, 5; 0; 0, 5; 1; 1, 2; 1, 3\}$ . As grandezas termodinâmicas avaliadas foram o parâmetro de ordem, dado na equação (1.20), a susceptibilidade magnética, o calor específico, e as derivadas com respeito a temperatura das seguintes quantidades:  $m$ ,  $\ln m$  e  $\ln m^2$ . As médias térmicas envolvendo  $E$  e  $m$ , necessárias na determinação de certas quantidades, foram estimadas usando a equação fundamental do método do Histograma, dada em (2.8), e para cada rede específica verificamos o intervalo de temperaturas confiável para extrapolar. Com relação à temperatura, no que segue faremos  $k_B/J = 1$  por conveniência.

Primeiramente apresentamos um exemplo da avaliação que fizemos quanto a precisão dos resultados gerados pelo procedimento de MC. A Figura (4.1) apresenta o gráfico da distribuição de probabilidades (normalizada) da energia  $E$  do sistema para a rede  $L = 18$  e com o campo cristalino  $D/J = 1$ , cujo histograma foi medido em  $T_0 = 1,37$ . Mostramos também as distribuições avaliadas para quatro temperaturas menores, obtidas a partir do histograma original. A faixa de referência de acordo com a equação (2.10) é em torno de  $\Delta T = 0,016$ , de modo que teríamos resultados bons até  $T_1 = 1,354$ . Notamos, entretanto, que as distribuições são ainda razoáveis mesmo para temperaturas menores que  $T_1$ , por exemplo,  $T_2 = 1,337$ . Para temperaturas mais afastadas ainda  $T_3$  e  $T_4$ , observamos que os erros estatísticos são consideráveis nos lados esquerdos das curvas, mostrando que, nestes casos, as extrapolações estão próximas do limite de validade. Situação análoga ocorre para temperaturas maiores que  $T_0$ . Notamos ainda, neste exemplo, o caráter de dois picos sendo transformado para somente um pico.



**Figura 4.1:** Distribuições de probabilidades da energia contra a energia adimensional  $E$  avaliadas para a rede  $L = 18$  e com o campo  $D/J = 1$ .

O método do Histograma também pode exibir erros sistemáticos, principalmente devido as simulações serem sempre finitas. Para investigar esta classe de erros, por exemplo para  $D/J = 1$  e com a rede  $L = 18$ , mostramos na Tabela 4.1 os valores das grandezas termodinâmicas obtidos em duas simulações em que usamos pares distintos das

sementes aleatórias, mantendo a mesma temperatura  $T_0$  para realizar o Monte Carlo. Em uma terceira simulação fizemos o contrário, mudamos a temperatura do MC para  $T_1$  e conservamos o par de sementes aleatórias.

**Tabela 4.1:** Valores máximos do calor específico, susceptibilidade e das derivadas termodinâmicas obtidos a partir de três diferentes simulações para  $D/J = 1$ ,  $L = 18$  e com  $5 \times 10^6$  passos de MC.  $T_0$  e  $T_1$  são as temperaturas em que as simulações foram realizadas utilizando-se as sementes: a = (530271665, 137608149) e b = (746012823, 950413701).

Grandezas Termodinâmicas	$T_0 = 1,37$ sementes-a	$T_0 = 1,37$ sementes-b	$T_1 = 1,377$ sementes-b
c	21,2(1)	21,2(1)	21,2(1)
$\chi$	2,47(1)	2,48(1)	2,48(1)
$(\frac{dm}{dT})_{max}$	1952(4)	1960(4)	1956(4)
$(\frac{d \ln m}{dT})_{max}$	36,73(6)	36,85(6)	36,80(6)
$(\frac{d \ln m^2}{dT})_{max}$	61,8(1)	62,0(1)	61,9(1)

A Tabela 4.2 mostra as temperaturas efetivas da transição e que fazem par aos valores máximos das grandezas termodinâmicas mostrados na Tabela 4.1. Podemos assim notar que, dentro dos erros estatísticos observados nas tabelas acima, encontramos uma ótima concordância entre os diversos resultados, indicando que as extrapolações pelo método do histograma estão dentro dos limites aceitáveis.

**Tabela 4.2:**  $T_c(L)$  para várias quantidades termodinâmicas para a rede  $L = 18$  e  $D/J = 1$  e  $5 \times 10^6$  passos de MC.

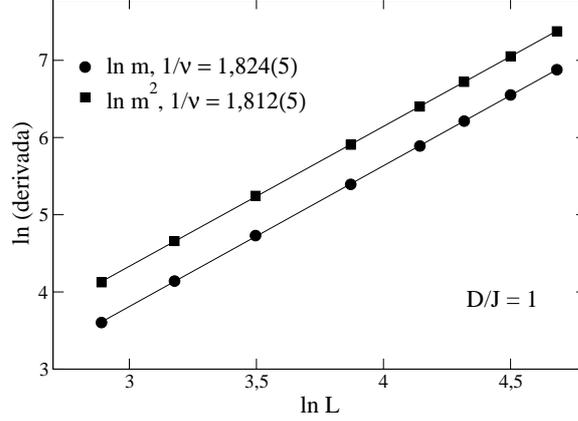
Grandezas Termodinâmicas	$T_0 = 1,37$ sementes-a	$T_0 = 1,37$ sementes-b	$T_1 = 1,377$ sementes-b
c	1,370(1)	1,370(1)	1,370(2)
$\chi$	1,372(1)	1,372(1)	1,372(1)
$(\frac{dm}{dT})_{max}$	1,3711(2)	1,3708(2)	1,3710(2)
$(\frac{d \ln m}{dT})_{max}$	1,3784(2)	1,3781(2)	1,3783(2)
$(\frac{d \ln m^2}{dT})_{max}$	1,3831(2)	1,3828(2)	1,3829(2)

## 4.1 Resultados de ETF para o BW Spin-1

Mostramos a seguir as medidas de ETF para  $T_c$  e correspondentes expoentes considerando o campo cristalino  $D/J = 1$ .

Estimativas independentes para o expoente crítico  $\nu$  são dadas pelo comportamento

de escala das derivadas logarítmicas de  $m$  e  $m^2$ . Para redes suficientemente grandes, um ajuste linear do logaritmo destas grandezas em função de  $\ln L$  fornece valores para  $1/\nu$ , como expresso pela equação (2.13). A Figura (4.2) mostra os ajustes usando-se todas as redes consideradas na análise, ou seja,  $L = 18, 24, 33, 48, 63, 75, 90, 108$ . O comportamento linear é evidente nesta Figura.



**Figura 4.2:** Dependência com o tamanho dos máximos das derivadas usadas para determinar  $1/\nu$ . As medidas estão mostradas na legenda. Os erros são menores que os símbolos.

Fizemos também a seguinte análise: para cada derivada medimos ajustes lineares usando tamanhos  $L_{min} \leq L \leq 108$ , escolhendo a cada ajuste um valor diferente para  $L_{min}$ , num total de quatro valores:  $L_{min} = 48, 33, 24$  e  $18$ . A Tabela 4.3 mostra as estimativas finais a partir desses ajustes adicionais. A média final fornece  $1/\nu = 1,816(8)$  ou  $\nu = 0,551(3)$ , que está próximo dos valores indicados na Figura (4.2) tomando-se todas as redes. Nota-se, entretanto, que o valor é diferente do valor esperado  $\nu = 2/3$ .

**Tabela 4.3:** Medidas de  $1/\nu$  obtidas por ETF dos máximos das derivadas logarítmicas de  $m$  e  $m^2$ .

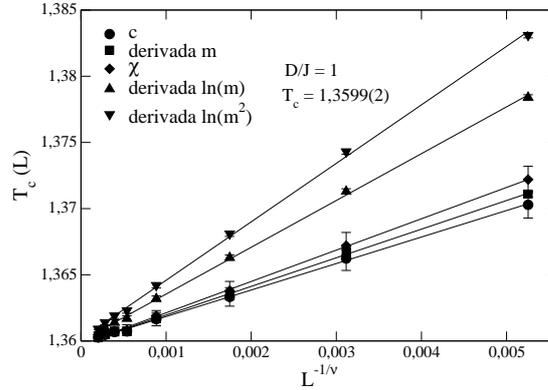
Derivadas	$1/\nu$
$\ln m$	1,824(8)
$\ln m^2$	1,809(6)

Para ilustrar a ordem dos valores das grandezas físicas, a Tabela 4.4 inclui os máximos do calor específico e da susceptibilidade magnética conforme as redes finitas consideradas, e que foram determinados minuciosamente pela técnica do Histograma. Mostramos as temperaturas  $T_0$  das simulações geradoras dos histogramas, as temperaturas de transição  $T_c(L)$  e  $T_\chi(L)$  e os limites  $\Delta T$ . Valores típicos são também obtidos para as derivadas da magnetização.

**Tabela 4.4:** Medidas do calor específico e da susceptibilidade magnética que indicam as transições para as redes finitas no caso de  $D/J = 1$ , com  $5 \times 10^6$  passos de MC.

$L$	$T_0$	$c$	$T_c$	$\chi$	$T_\chi$	$\Delta T$
18	1,37	21,16(1)	1,370(1)	2,470(1)	1,372(1)	0,02
24	1,366	31,750(1)	1,366(1)	4,333(1)	1,367(1)	0,01
33	1,363	50,115(2)	1,363(1)	8,061(1)	1,364(1)	0,006
48	1,362	84,08(1)	1,362(1)	16,282(1)	1,362(1)	0,003
63	1,361	125,40(1)	1,361(2)	27,59(1)	1,361(1)	0,002
75	1,36	161,299(1)	1,361(1)	38,516(1)	1,361(1)	0,002
90	1,36	210,332(1)	1,360(1)	54,741(1)	1,361(1)	0,001
108	1,36	274,065(2)	1,360(1)	77,265(1)	1,360(1)	0,0008

Os resultados para a temperatura de transição da Tabela 4.4, juntamente com os obtidos pelas derivadas de  $m$ ,  $\ln m$  e  $\ln m^2$ , estão mostrados na Figura (4.3) em função de  $L^{-1/\nu}$ , com  $1/\nu = 1,816$  obtido anteriormente. Pode-se notar claramente um comportamento linear, cujas extrapolações encontramos na Tabela 4.5. De acordo com os resultados dessa Tabela obtem-se  $T_c = 1,3599(2)$  para  $D/J = 1$ .

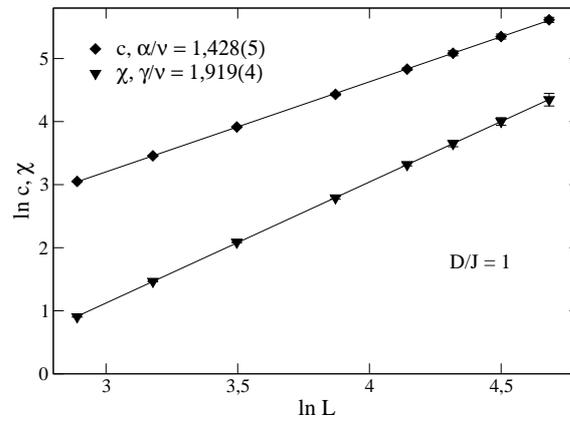


**Figura 4.3:** Comportamento de escala para a temperatura crítica de sistemas finitos de acordo com várias quantidades termodinâmicas.

Os expoentes críticos  $\alpha$  e  $\gamma$  são obtidos das respectivas relações dadas em (2.11) e usando o valor  $\nu = 0,551(3)$ . A Figura (4.4) mostra o calor específico e a susceptibilidade (Tabela 4.4) em função de  $\ln L$  com todas as oito redes utilizadas. Do comportamento linear obtem-se os valores de  $\alpha/\nu$  e  $\gamma/\nu$  indicados na própria Figura. De forma análoga ao expoente  $\nu$ , temos na Tabela 4.6 os valores da razão dos expoentes para diferentes  $L_{min}$ , que nos fornece estimativas finais  $\alpha = 0,79(1)$  e  $\gamma = 1,06(1)$ . Podemos notar que estes valores são bem diferentes dos esperados.

**Tabela 4.5:** Estimativas das temperaturas críticas a partir de diferentes quantidades e de acordo com os ajustes lineares da Figura (4.3).

Grandezas	$T_c$
$c$	1,35984(5)
$d(m)/dT$	1,35980(6)
$\chi$	1, 35976(5)
$d(\ln m)/dT$	1,36001(8)
$d(\ln m^2)/dT$	1,3602(1)

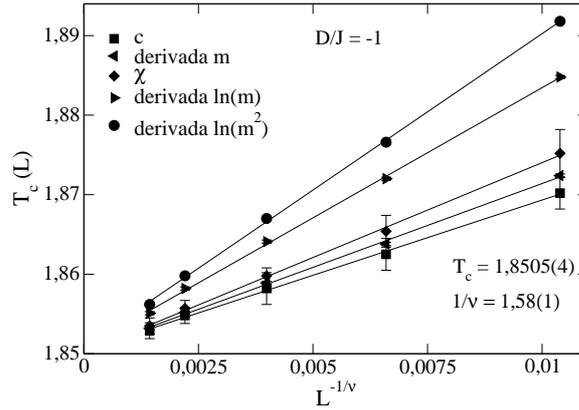


**Figura 4.4:** Logaritmos dos valores máximos de  $c$  e  $\chi$  contra  $\ln L$ . As linhas retas são ajustes lineares correspondendo aos valores de  $\alpha/\nu$  e  $\gamma/\nu$  mostrados na legenda.

**Tabela 4.6:** Medidas de  $\alpha/\nu$  e  $\gamma/\nu$  obtidas pela análise de escala de  $c$  e  $\chi$  a partir de quatro conjuntos de redes.

$\alpha/\nu$	$\gamma/\nu$
1,456(3)	1,921(5)
1,437(8)	1,911(5)
1,432(6)	1,914(4)
1,428(5)	1,919(4)

Aplicamos o mesmo procedimento acima para outros valores do campo cristalino e em alguns casos usamos de quatro a seis redes. Por exemplo, a Figura (4.5) mostra o gráfico das estimativas de  $T_c$  tomando  $D/J = -1$ . Figuras da mesma qualidade da (4.2) e (4.4) são obtidas para os expoentes críticos. Nesse caso obtem-se  $1/\nu = 1,58(1)$ ,  $\alpha/\nu = 1,056(3)$  e  $\gamma/\nu = 1,81(1)$ . A Tabela 4.7 mostra os resultados assim obtidos para a transição de segunda ordem nos vários valores de  $D/J$ .



**Figura 4.5:** ETF para a temperatura crítica com  $D/J = -1$ . O valor final estimado é  $T_c = 1,8505(4)$ .

**Tabela 4.7:** Temperaturas e expoentes críticos dados por ETF para o BW Spin-1. A terceira coluna refere-se aos resultados de IC de [58, 75].

$D/J$	$T_c$	$T_c - IC$	$1/\nu$	$\alpha/\nu$	$\gamma/\nu$
$-\infty$	$2/\ln(1 + \sqrt{2})$	–	$3/2$	1	$7/4$
-2	1,9799(4)	1.9790	1,53(2)	1,013(9)	1,79(1)
-1,5	1,9211(3)	–	1,55(3)	1,02(2)	1,79(3)
-1	1,8505(4)	1.8497	1,58(1)	1,056(3)	1,81(1)
-0,5	1,7657(4)	1.7645	1,61(2)	1,09(1)	1,83(1)
0	1,6613(6)	1.6603	1,643(3)	1,129(3)	1,838(3)
0,5	1,5309(4)	1.5300	1,67(1)	1,195(5)	1,841(7)
1	1,3599(2)	1.3601	1,816(8)	1,44(1)	1,916(5)
1,2	1,2744(6)	1.2750	1,967(9)	1,60(1)	2,021(5)
1,3	1,2261(6)	1.2270	2,06(2)	1,71(2)	2,078(5)

A segunda linha da Tabela 4.7 mostra a temperatura  $T_c$  e as relações entre expoentes críticos indicadas para o BW Spin-1 com  $D/J = -\infty$  e que são as mesmas do modelo BW Spin-1/2. A partir da terceira linha temos os valores obtidos pela análise de ETF. Primeiro ressaltamos que as temperaturas  $T_c$ , assim determinadas, estão próximas daquelas obtidas por Invariância Conforme[58, 75], conforme pode ser constatado da própria

Tabela 4.7. Segundo, a qualidade dos ajustes quanto aos expoentes críticos sugerem que estes variam ao longo da linha de transições contínuas, em concordância também com os resultados de IC. Os resultados de ETF para  $D/J = 0$  foram publicados em [74].

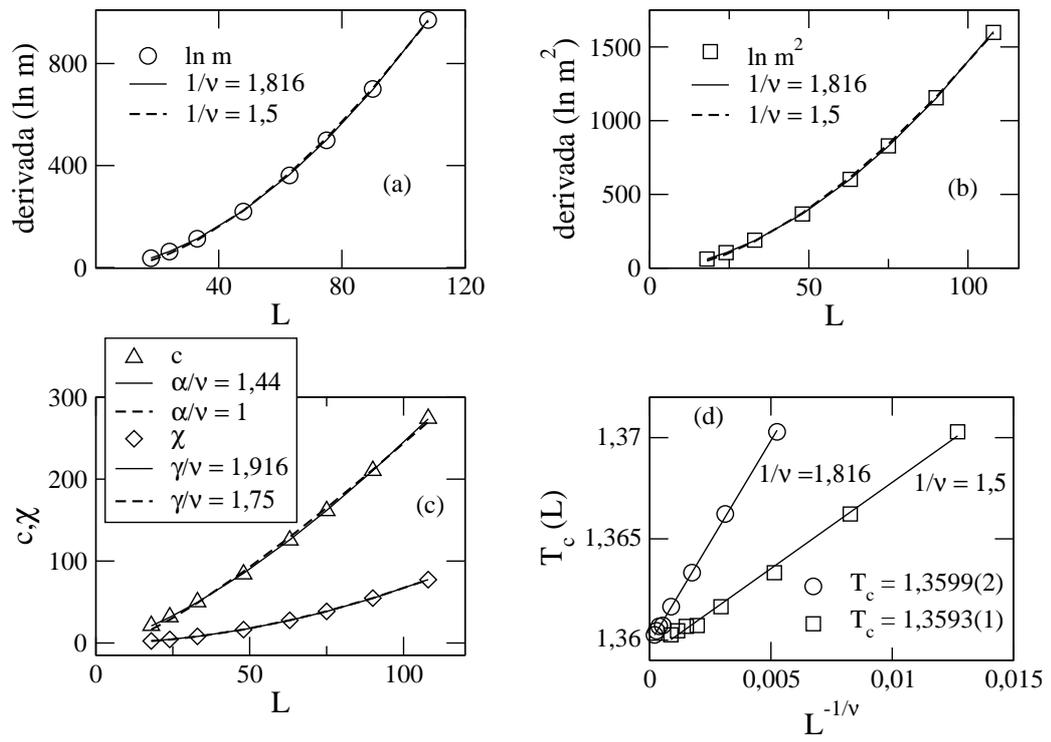
No entanto, esperamos que os expoentes sejam iguais ao do Spin-1/2 para qualquer valor do campo cristalino marcando uma transição crítica. Como comentado no primeiro capítulo, o critério da Universalidade[25, 54] das transições críticas mostra que os expoentes são independentes do valor do spin para um dado modelo físico.

Uma hipótese que se pode admitir é de que as redes aqui empregadas sejam ainda pequenas para se conseguir gerar valores satisfatórios dos expoentes. Nestes casos pode-se propor correções de ETF[50], caracterizadas por leis de potências com um expoente de correção de escala  $w$ . Por exemplo, a relação para as diversas grandezas empregadas pode ser escrita como

$$grandezas = a L^\lambda (1 + bL^{-w}), \quad (4.1)$$

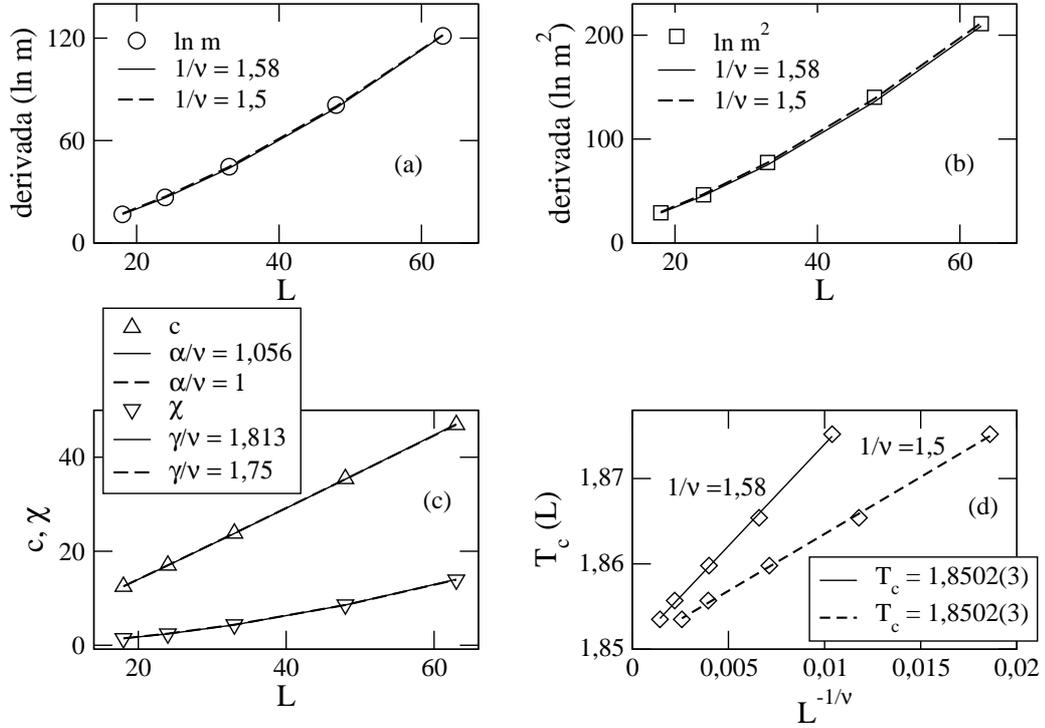
com constantes numéricas não universais  $a$  e  $b$  e  $\lambda$  o correspondente expoente crítico da grandeza utilizada. Portanto, voltamos a analisar todas as grandezas termodinâmicas envolvidas, onde acrescentamos o termo de correção  $L^{-w}$  e usamos os expoentes do BW Spin-1/2, ou seja, tomamos  $1/\nu = 1,5$ ,  $\alpha/\nu = 1$  e  $\gamma/\nu = 1,75$ . Verificamos então quais os valores de  $w$  que fornecem os ajustes mais adequados.

A Figura (4.6) apresenta as análises de correção de ETF para  $D/J = 1$ . Nos gráficos as curvas cheias são os ajustes sem correção de escala obtidos anteriormente e as linhas tracejadas são os ajustes com a correção da forma (4.1). Todas as correções correspondem a  $w = 0,3$ , exceto no caso do calor específico em que  $w = 0,1$ . Observamos que as curvas com correção de escala praticamente coincidem com as curvas sem correção à medida que  $L$  cresce, o que de certa forma justifica uma primeira impressão errônea de que os expoentes sejam variáveis com o campo cristalino [74].



**Figura 4.6:** Tratamento de correções de ETF para o BW Spin-1 com  $D/J = 1$ .

A Figura (4.7) mostra a mesma análise para  $D/J = -1$ , onde também obtemos resultados satisfatórios concordando com  $w = 0,3(2)$ . O último gráfico refere-se a medida de  $T_c$  por meio da susceptibilidade.

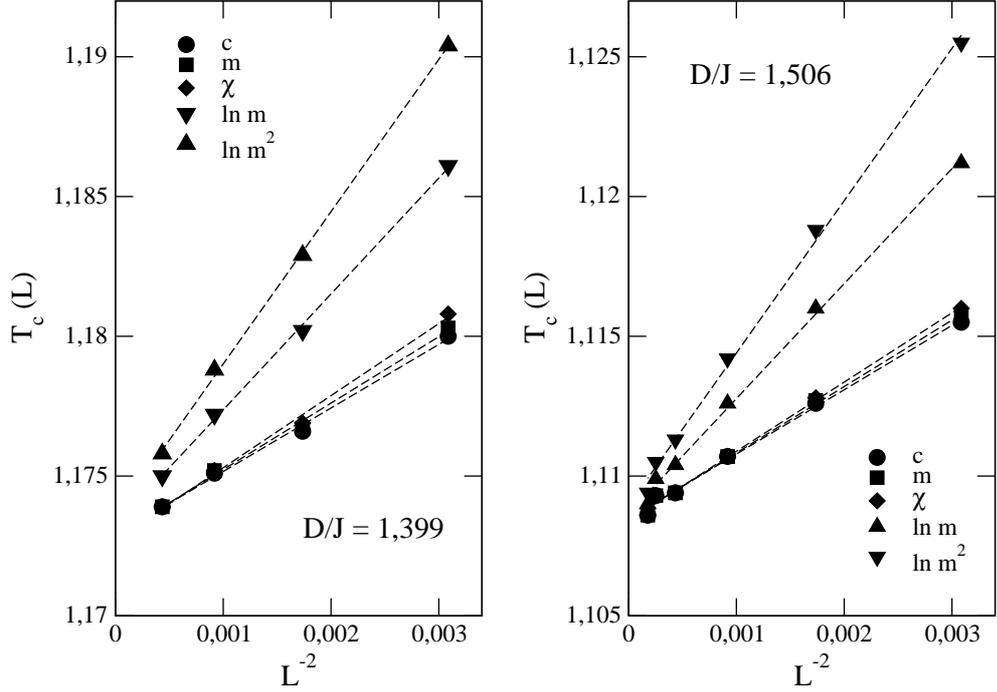


**Figura 4.7:** Tratamento de correções de ETF para o BW Spin-1 com  $D/J = -1$ .

Concluimos então que os resultados da Tabela 4.7 estão razoáveis para  $T_c$  porém os expoentes são os mesmos do modelo de spin-1/2, como esperado. Este ponto será ainda discutido no próximo capítulo.

Resta ainda investigar o intervalo de  $D/J$  para as transições descontínuas. Escolhemos três valores do campo para fazer as simulações,  $D/J = 1,333; 1,399$  e  $1,506$ , que segundo Invariância Conforme[58, 75] fazem parte da linha de 1ª ordem.

Para transições de 1ª ordem verifica-se que a dependência com o tamanho linear é da forma  $L^{\pm d}$ , onde  $d$  é a dimensão espacial[76] e o sinal  $\pm$  depende da grandeza avaliada. As simulações foram feitas da mesma maneira anterior, onde usamos para  $D/J = 1,333$  e  $D/J = 1,399$  apenas os tamanhos  $L = 18, 24, 33$  e  $48$ . Para  $D/J = 1,506$  acrescentamos as redes  $L = 63$  e  $75$ . A Figura (4.8) mostra os ajustes de  $T_c$  para os dois maiores valores de  $D/J$ . Os resultados estão agrupados na Tabela 4.8, onde se nota claramente que a lei de potência segue na verdade um valor bem próximo da dimensão do sistema (com exceção do calor específico), e as temperaturas estão próximas dos valores estimados por Invariância Conforme[58, 75].



**Figura 4.8:** Análise de ETF para valores do campo cristalino indicando transições descontínuas.

**Tabela 4.8:** Medidas de ETF para as transições de 1<sup>a</sup> ordem para o BW Spin-1.

$D/J$	$T_c$	$T_c - IC$	$\ln m$	$\ln m^2$	$c$	$\chi$
1,333	1,2089(5)	1,21	2,11(2)	2,07(1)	1,75(2)	2,09(1)
1,399	1,1731(5)	1,176	2,179(8)	2,133(4)	1,84(2)	2,135(4)
1,506	1,1086(4)	1,111	2,248(5)	2,173(8)	1,960(7)	2,152(6)

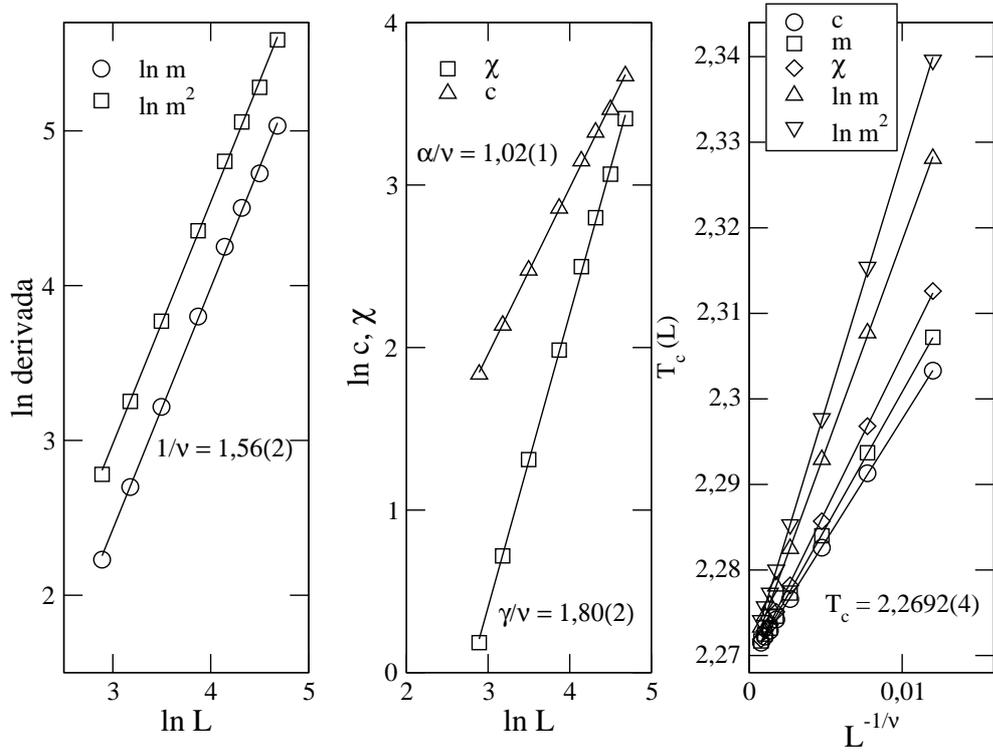
## 4.2 Resultados de ETF para o BW Spin-1/2

Notamos na Tabela 4.7, que para  $D/J$  grande e negativo os resultados de nossa simulação sem correções de escala tendem aos valores esperados do Spin-1/2. Analisamos então o modelo BW Spin-1/2 por meio de ETF com o objetivo de testarmos todo o procedimento que empregamos ao Spin-1. Usamos também  $5 \times 10^6$  passos de MC para fazermos as medidas e iniciamos as simulações a partir do estado ferromagnético. Anotamos a energia total do sistema e as magnetizações das subredes a cada passo de MC. Adotamos um total de oito redes com  $18 \leq L \leq 108$  e medimos por ETF as razões críticas  $1/\nu$ ,  $\alpha/\nu$  e  $\gamma/\nu$  analisando sucessivamente quatro conjuntos de redes, tomando  $L_{min} \leq L \leq 108$ . Reunimos estes resultados na Tabela 4.9 seguinte, e obtivemos as estimativas finais  $1/\nu = 1,53(4)$ ,  $\alpha/\nu = 1,01(2)$  e  $\gamma/\nu = 1,77(4)$ , que estão em bom acordo com as medidas exatas do BW[55], dadas na Tabela 4.7.

**Tabela 4.9:** Medidas de ETF para o BW Spin-1/2.

$1/\nu$	$\alpha/\nu$	$\gamma/\nu$
1,49(4)	0,99(3)	1,73(4)
1,52(3)	1,00(2)	1,76(3)
1,55(2)	1,02(1)	1,79(2)
1,56(2)	1,02(1)	1,80(2)

Na Figura (4.9) mostramos os ajustes lineares com todos os tamanhos  $L$  adotados. O último gráfico refere-se aos ajustes considerados para estimar a temperatura crítica da rede infinita. As correspondentes estimativas individuais de  $T_c$  são mostradas na Tabela 4.10 e fornecem  $T_c = 2.2692(4)$ , bem próximo do valor exato  $T_c \approx 2.2691\dots$



**Figura 4.9:** Análise de ETF para o BW Spin-1/2. As linhas cheias são ajustes lineares.

Embora esses resultados nos mostram que as simulações estão bem controladas, voltaremos a analisar no capítulo seguinte o diagrama completo do Spin-1 segundo um método diferente que emprega a função distribuição de probabilidades para o parâmetro de ordem.

**Tabela 4.10:** Estimativas para a temperatura crítica do BW Spin-1/2.

derivadas	$T_c$
c	2,26917(7)
m	2,26904(9)
$\chi$	2,2688(2)
$\ln m$	2,2695(1)
$\ln m^2$	2,2692(4)

# Capítulo 5

---

## Caracterização Crítica do BW Spin-1

Por meio da distribuição de probabilidades do parâmetro de ordem é possível obter informações úteis do comportamento físico do sistema e caracterizar as próprias transições de fases críticas.

Um resultado recente para o modelo BW Spin-1/2 é a determinação da função distribuição crítica da magnetização, obtida por Martinos[64]. Neste estudo os autores aplicaram o método dos blocos de Binder[71] para obter a curva da distribuição e, adicionalmente, propuseram um ajuste analítico para a mesma. Como  $T_c$  e os expoentes críticos têm valores conhecidos para o BW[55], a estimação da distribuição crítica foi uma medida muito adequada à descrição do modelo, a despeito da técnica exigir simulações muito dispendiosas para garantir resultados satisfatórios.

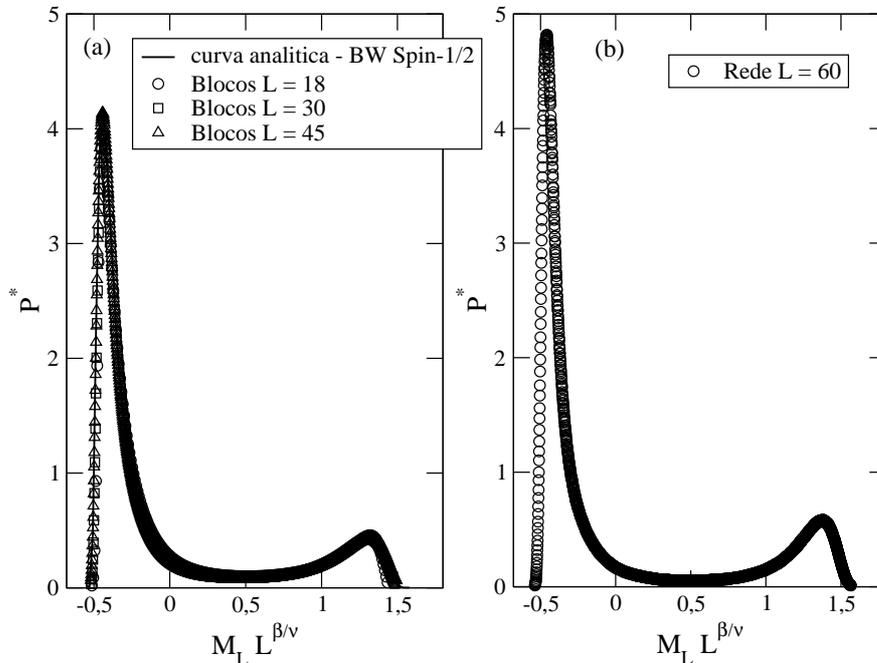
No estudo do BW Spin-1 pretendemos determinar a distribuição crítica, tomando a distribuição do Spin-1/2 como comparação da classe de universalidade. Portanto, a primeira questão foi reproduzir os resultados do Spin-1/2. Iniciamos então com a seção seguinte mostrando estas medidas.

### 5.1 Distribuição de Probabilidades da Magnetização para o BW Spin-1/2

Para aplicar o método dos blocos usamos uma rede triangular com  $90 \times 90$  sítios, e a dividimos em blocos similares de dimensão linear  $L = 18, 30$  e  $45$ , ou seja, trabalhamos com vinte e cinco blocos de dimensão  $18 \times 18$ , nove blocos de  $30 \times 30$  e quatro blocos de  $45 \times 45$ . Como comentado anteriormente, o método avalia a função distribuição para os blocos de sítios, assim, definimos o parâmetro de ordem como a magnetização por spin do bloco, representada por  $M$ .

Determinamos a função  $P_L(M)$  para cada  $L$  da seguinte maneira: impomos condições de contorno periódicas sobre a rede original; usamos o algoritmo de Metropolis com a dinâmica de inverter um spin para fazer a simulação na temperatura crítica, dada por  $T_c = 2J/k_B \ln(1 + \sqrt{2})$ , partindo do estado fundamental ferromagnético ( $s_i = +1$ ); atualizamos as magnetizações dos blocos a cada passo de MC sobre a rede matriz; desprezamos  $10^5$  configurações iniciais para garantir o processo de equilíbrio e armazenamos as magnetizações dadas por  $10^8$  configurações restantes. A distribuição de probabilidades é avaliada pelas frequências relativas das magnetizações apresentadas durante o decurso finito do Monte Carlo. Usamos um segundo algoritmo para obter a distribuição, e que determina um histograma das magnetizações definindo uma variável  $hist_L(i, indice_i)$  para cada possível valor  $M_L(i)$  do bloco  $i$ , e que corresponde a frequência deste valor específico da magnetização do bloco, sendo  $1 \leq i \leq nb$ ,  $nb$  é o número total de blocos de mesmo tamanho, e  $indice_i = (L^2 + 1 + M_L(i))$ . As respectivas frequências são aferidas acrescentando uma unidade a  $hist_L(i, indice_i)$  a cada valor correspondente  $M_L(i)$  verificado a partir da leitura das configurações geradas pelo MC. Obtemos uma estimativa final da distribuição tomando a média de  $P_L(M)$  referente aos blocos de mesmo tamanho.

Analisamos a relação de escala para  $P_L(M)$ , equação (2.15), com o fator  $b = L^{\beta/\nu}$ , onde os expoentes assumiram os valores do BW Spin-1/2, ou seja,  $\beta = 1/12$  e  $\nu = 2/3$ . Verificamos que o gráfico de  $L^{-\beta/\nu} P_L(M) \times \tilde{M}$  avaliado na temperatura crítica do modelo fornece uma curva universal, representada por  $P^*(\tilde{M})$ . Na Figura (5.1) o gráfico (a) mostra as estimativas de  $P^*(\tilde{M})$  a partir dos três blocos distintos e verificamos a concordância com a curva analítica de Martinos.



**Figura 5.1:** Distribuição crítica universal do BW Spin-1/2 gerada com condições de contorno (a) abertas (blocos) e (b) periódicas (rede).

A distribuição do bloco  $L = 45$  foi a que melhor se ajustou à curva analítica. Os outros dois blocos parecem exibir efeito de tamanho finito, pois os picos das respectivas distribuições ficaram ligeiramente abaixo dos picos da função analítica.

Os picos assimétricos observados na função distribuição da magnetização traduzem a simetria conhecida do modelo BW, ou seja, o domínio das quatro fases ordenadas. A fase ferro responde pelo pico centrado em uma magnetização positiva  $M_0$  e as três fases ferrimagnéticas pelo pico centrado em  $-M_0/3$ . Esta forma da distribuição permanece para temperaturas bem abaixo de  $T_c$  e assume um comportamento gaussiano centrado na magnetização nula para temperaturas bem maiores que a crítica.

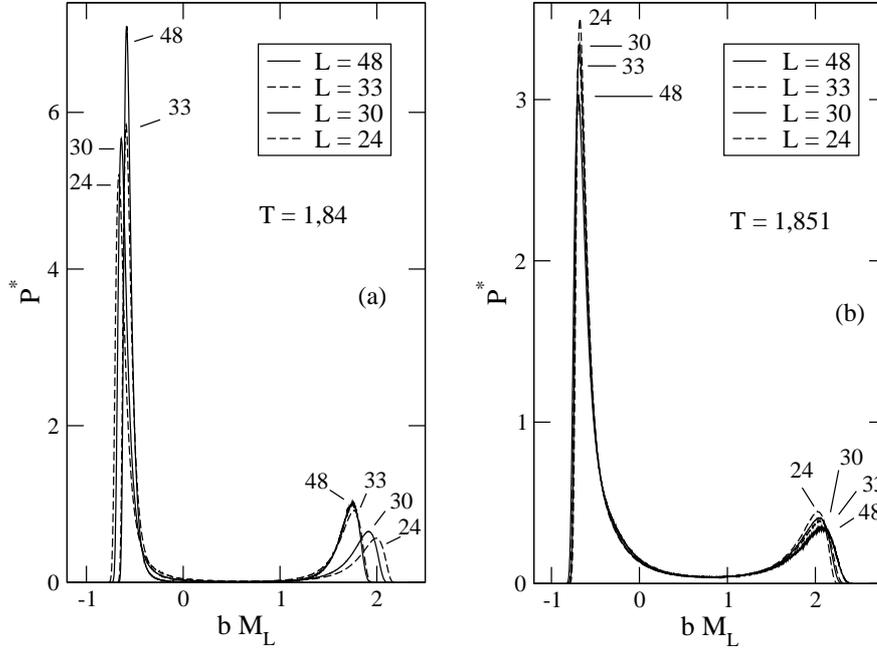
Adicionalmente determinamos a distribuição crítica do Spin-1/2 considerando as simulações separadamente para as redes  $L = 60, 54, 45$  e  $36$ . Aplicamos condições periódicas e iniciamos do estado ferromagnético. Avaliamos a magnetização da rede sobre  $25 \times 10^6$  passos de MC. Usamos também o fator  $b = L^{\beta/\nu}$  para reescalar a distribuição. O gráfico (b) na Figura (5.1) exibe a curva  $P^*(\tilde{M})$  para a rede  $L = 60$ . Temos a mesma forma da distribuição comparando com o resultado dos blocos, entretanto as alturas das curvas não coincidem. Isto tem haver com as condições de contorno serem distintas nas duas medidas. O procedimento dos blocos implica em condições de contorno abertas e as redes em condições periódicas.

## 5.2 Distribuição de Probabilidades da Magnetização para o BW Spin-1

Voltando ao BW Spin-1, nossa análise indica a seguinte condição: temos por ETF um conjunto de temperaturas críticas e campos cristalinos que descrevem uma linha de transições de segunda ordem no diagrama de fases do modelo. Indicamos por correções de tamanho finito que os expoentes críticos associados a estas temperaturas são iguais ao do modelo original. Pois bem, o interesse agora é determinar a classe de universalidade do Spin-1 por meio da distribuição crítica *independentemente* dos resultados obtidos por ETF. Entretanto, veremos como as estimativas das temperaturas críticas na Tabela 4.7 serviram como um primeiro guia para analisarmos as regiões críticas escolhidas para investigar a distribuição.

Explicamos o procedimento adotado apresentando os resultados para o valor do campo  $D/J = -1$ . A Figura (5.2) apresenta a distribuição  $P^*$  em função da magnetização normalizada  $\tilde{M}$  para duas temperaturas distintas. É possível inferir sobre a vizinhança crítica observando os seguintes comportamentos: em uma mesma temperatura  $T < T_c$ , como ilustra o gráfico (a) com  $T = 1,84$ , quanto maior é o tamanho do sistema, maiores se tornam os picos da distribuição  $P^*$  e, ao contrário, em uma temperatura  $T > T_c$ , esses picos tornam-se menores, como mostra o gráfico (b) com  $T = 1,851$ . Da mesma forma, se temos a distribuição para uma dada rede, digamos  $L = 24$  em uma temperatura  $T_{L=24}$  menor que a temperatura crítica, observamos que para uma rede maior, por exemplo  $L = 48$ , conseguimos estimar uma distribuição similar a da primeira rede em uma temperatura distinta  $T_{L=48}$ , tal que  $T_{L=24} < T_{L=48} < T_c$ . Numa faixa de temperaturas maiores que

$T_c$  teremos distribuições similares para as duas redes distintas verificando a condição  $T_{L=24} > T_{L=48} > T_c$ .



**Figura 5.2:** Distribuições das redes  $L = 48, 33, 30, 24$  para o BW Spin-1 com  $D/J = -1$  em duas temperaturas distintas: (a)  $T < T_c$  e (b)  $T > T_c$ .

Como notado por Martins[72], isto sugere um esquema para a determinação de  $T_c$ , do expoente  $\nu$  e da própria distribuição crítica, como ficará claro logo em seguida. No uso da relação de escala (2.15) medimos as distribuições com norma e variância unitária, o que implica em tomar o parâmetro  $b = 1/\sigma$ , em que  $\sigma$  é o desvio padrão da distribuição, ou seja,  $\sigma^2 = \langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2$ . Lembramos que esta escolha de  $b$  é muito adequada, já que não conhecemos os expoentes do BW Spin-1.

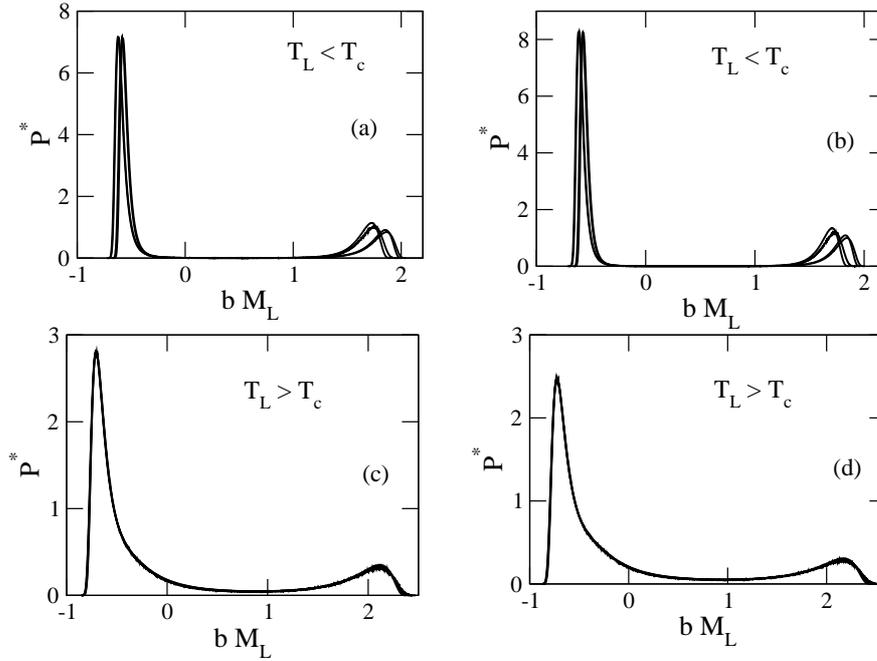
O método consiste em tomarmos sobreposições das distribuições para um conjunto de redes e obtermos um conjunto de temperaturas distintas  $T_L$ , de modo que podemos aplicar uma análise de escala de tamanho finito para estimarmos os dados críticos do sistema infinito. É importante que as medidas sejam feitas na vizinhança da temperatura crítica.

Voltando ao caso  $D/J = -1$ , vimos que a localização da região crítica é indicada pelos comportamentos descritos na Figura (5.2). Em seguida escolhemos a rede  $L = 48$  para ter a distribuição de referência, por exemplo na temperatura  $T_{48} = 1,8399$  e pesquisamos para as redes  $L = 33, 30, 24$  as respectivas temperaturas que fornecem distribuições equivalentes a da rede 48. Repetimos o procedimento para outras distribuições de referência com  $L = 48$ , tanto abaixo como acima de  $T_c$ . Os conjuntos de temperaturas  $T_L$  são dados na Tabela 5.1.

**Tabela 5.1:** Conjuntos de temperaturas os quais assinalam sobreposições das distribuições das redes  $L = 33, 30, 24$  com as distribuições da rede  $L = 48$  com o campo  $D/J = -1$ .

Redes $L$	Temperaturas (unidades de $J/k_B$ )			
48	1,8399(2)	1,8360(2)	1,8515(1)	1,8523(2)
33	1,8333(2)	1,8269(2)	1,8529(2)	1,8542(2)
30	1,8314(1)	1,8243(1)	1,8534(1)	1,8550(1)
24	1,8260(1)	1,8161(1)	1,8552(1)	1,8573(1)

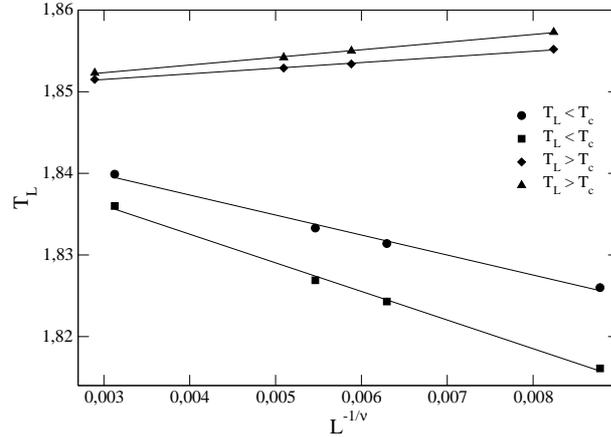
As duas primeiras colunas de temperaturas correspondem a valores abaixo de  $T_c$ , e as duas últimas colunas a valores acima. A Figura (5.3) apresenta as distribuições normalizadas  $P^*$  associadas a estes conjuntos de temperaturas.



**Figura 5.3:** Coincidências das distribuições normalizadas  $P^*$  para as redes e temperaturas mostradas na Tabela 5.1, no modelo BW Spin-1 com  $D/J = -1$ .

Os dois primeiros gráficos no topo da Figura (5.3) mostram uma certa dificuldade que tivemos para tomar as sobreposições na região de temperaturas menores que  $T_c$ , de modo que resolvemos ficar com estas medidas e ver se obtínhamos resultados esperados com a análise de escala. Já os dois últimos gráficos que tratam das situações com  $T_L > T_c$  conferiram ajustes bem satisfatórios.

Consideramos uma análise de ETF para estas temperaturas (colunas da Tabela 5.1), desde que  $|T_L - T_c|$  obedece a forma  $L^{-1/\nu}$ . A Figura (5.4) mostra o gráfico conjunto destas medidas onde as linhas retas são os ajustes lineares melhores que fornecem valores para  $1/\nu$  e  $T_c$ .

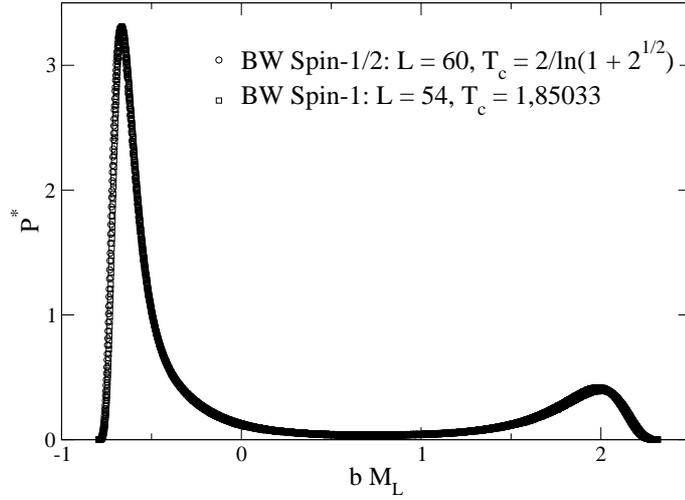


**Figura 5.4:** Temperaturas  $T_L$  que assinalam sobreposições das distribuições não críticas em função de  $L^{-1/\nu}$  para  $D/J = -1$ .

Tomando o valor médio destas estimativas obtemos as medidas finais  $1/\nu = 1,50(1)$  e  $T_c = 1,848(1)$ . O valor encontrado para o expoente crítico  $\nu$  concorda com o valor exato do BW Spin-1/2. Quanto a temperatura crítica assinalada para este valor do campo cristalino, podemos comparar com o valor encontrado por ETF derivada do estudo de Monte Carlo, cujo valor foi  $T_c = 1,8505(4)$  (Tabela 4.7). Vemos que estes valores estão próximos.

Ressaltamos que fizemos as simulações separadamente para cada rede aplicando condições de contorno periódicas, iniciando do estado ferromagnético e usando o Metropolis com a dinâmica de inverter um spin. O método exigiu simulações longas, de modo que usamos  $10^8$  passos de MC para medir as distribuições de probabilidade de  $M_L$  e desprezamos  $2 \times 10^5$  configurações iniciais. Usamos o método do Histograma para ajustar as curvas das distribuições.

A última etapa do método é determinarmos a distribuição crítica fazendo o MC com uma rede grande e na temperatura crítica estimada. Resolvemos fazer a simulação com a rede  $L = 54$  e comparar esta distribuição do BW Spin-1 com a curva universal do BW Spin-1/2, obtida com a rede  $L = 60$  e mostrada anteriormente na Figura (5.1).

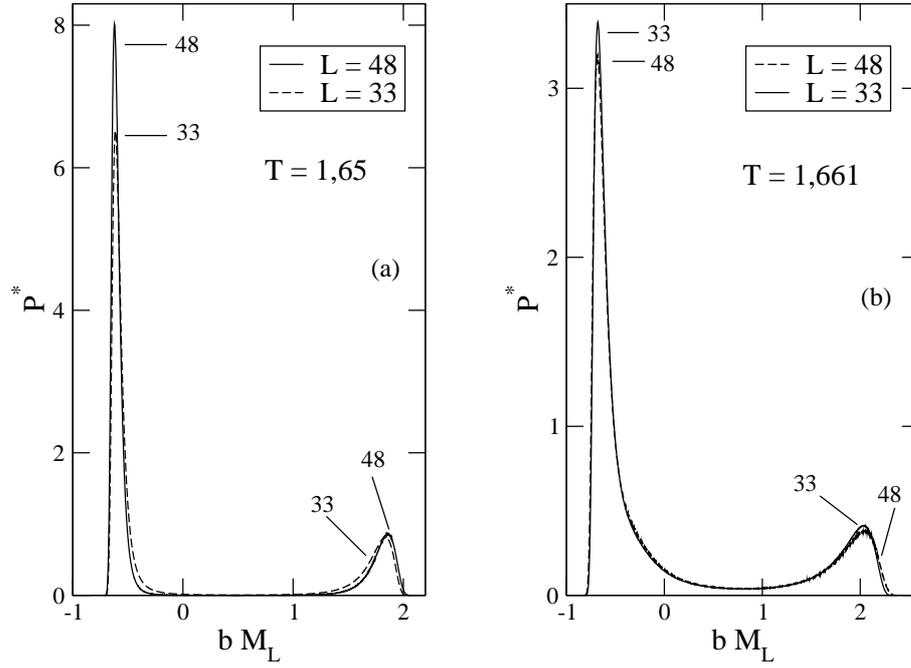


**Figura 5.5:** Distribuições críticas do BW Spin-1/2 e Spin-1, caracterizando a mesma classe de universalidade para as duas versões do modelo. O Baxter-Wu spin-1 nesse caso é para  $D/J = -1$ .

Conforme mostra a Figura (5.5), verificamos que para a temperatura  $T = 1,85033$  a distribuição do Spin-1 ajusta-se satisfatoriamente a do Spin-1/2, o que foi conseguido por meio da técnica do Histograma. Este resultado comprova que o BW Spin-1 tem a mesma classe de universalidade do Spin-1/2.

Fizemos ainda medidas adicionais para outros valores do campo cristalino. A Figura (5.6) apresenta a investigação da região crítica para  $D/J = 0$  por meio da comparação das distribuições das redes  $L = 48$  e  $L = 33$  em um mesmo valor de temperatura. Em  $T = 1,65$  os picos associados a  $L = 48$  estão acima dos da rede  $L = 33$  (gráfico a), e em  $T = 1,661$  ocorre o comportamento inverso (gráfico b), ou seja, os picos de  $L = 48$  são menores que os de  $L = 33$ . Portanto, podemos supor que a transição crítica com o campo cristalino nulo ocorre entre estas duas temperaturas.

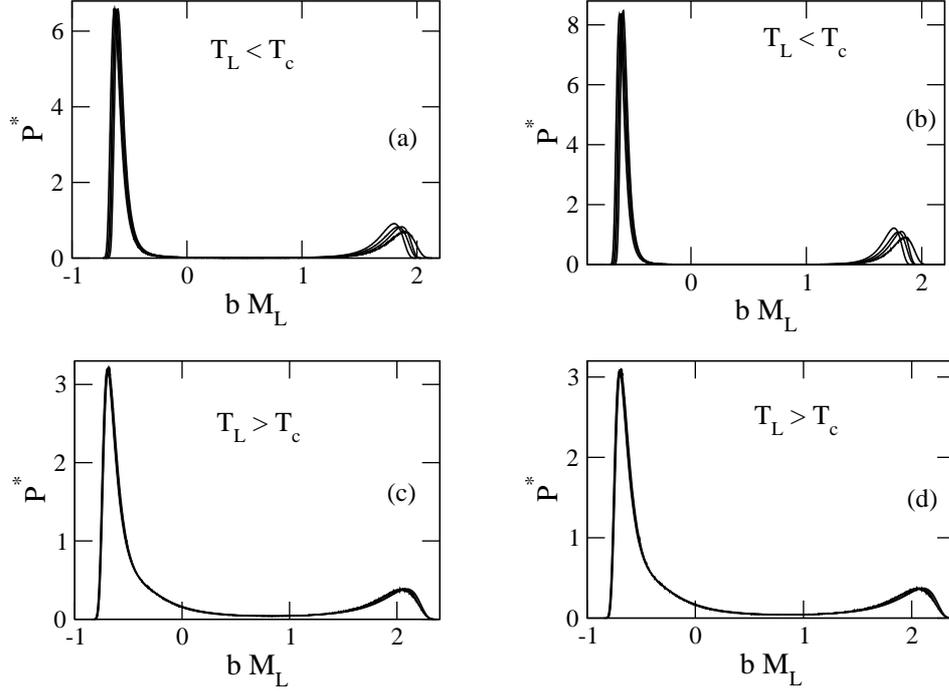
Na Tabela 5.2 constam os conjuntos de temperaturas  $T_L$  resultantes das análises feitas para tomar as sobreposições das distribuições das redes  $L = 33, 30$  e  $24$  em relação a rede maior  $L = 48$ . As duas primeiras colunas referem-se a região abaixo de  $T_c$ , e as duas seguintes a região acima de  $T_c$ . A Figura (5.7) mostra os gráficos das correspondentes distribuições sobrepostas. Para os casos com  $T_L < T_c$  os ajustes não são tão bons nos extremos direitos das curvas das distribuições. A Figura (5.8) mostra os ajustes lineares provenientes da análise de ETF aplicada separadamente sobre cada conjunto de temperaturas  $T_L$  (colunas da Tabela 5.1), onde medimos  $T_L$  contra  $L^{-1/\nu}$  e variamos o expoente  $\nu$  para obter uma linha reta. Deste modo obtemos quatro estimativas para  $T_c$  e para a razão  $1/\nu$ , e após fazer a média ficamos com as medidas finais  $T_c = 1,660(1)$  e  $1/\nu = 1,50(1)$ . A estimativa para  $T_c$  está em pleno acordo com o valor obtido por ETF  $T_c = 1,6613(6)$  (Tabela 4.7) e a medida de  $1/\nu$  confirma mais uma vez que as temperaturas críticas do Spin-1 identificam o mesmo expoente  $\nu$  do modelo com Spin-1/2.



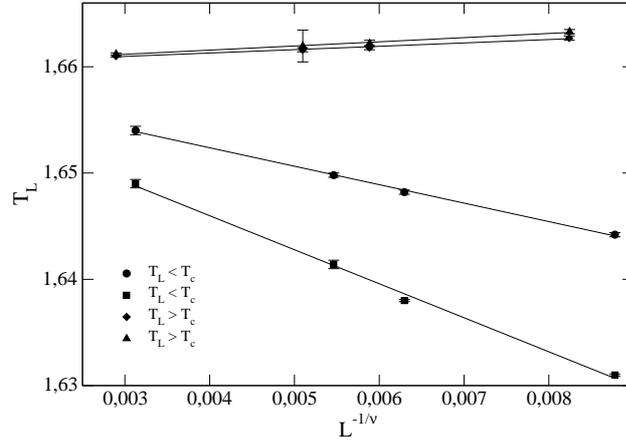
**Figura 5.6:** Distribuições das redes  $L = 48$  e  $L = 33$  para o BW Spin-1 com  $D/J = 0$  em duas temperaturas distintas: (a)  $T < T_c$  e (b)  $T > T_c$ .

**Tabela 5.2:** Conjuntos de temperaturas os quais assinalam sobreposições das distribuições das redes  $L = 33, 30, 24$  com as distribuições da rede  $L = 48$  com o campo  $D/J = 0$ .

<i>Redes L</i>	<i>Temperaturas (unidades de <math>J/k_B</math>)</i>			
48	1,6540(4)	1,6490(4)	1,6610(1)	1,6612(1)
33	1,6498(2)	1,6414(4)	1,6616(2)	1,66195(15)
30	1,6482(2)	1,6380(1)	1,6618(3)	1,6622(3)
24	1,6442(2)	1,6310(1)	1,6627(2)	1,6633(2)



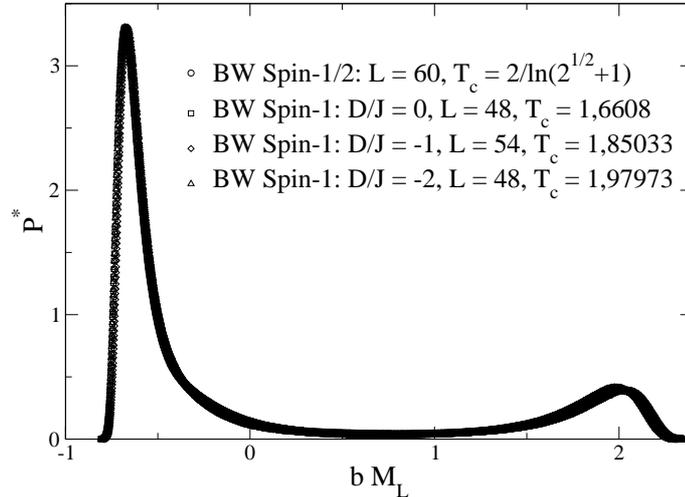
**Figura 5.7:** BW Spin-1 com  $D/J = 0$ : coincidências das distribuições normalizadas para as redes e temperaturas mostradas na Tabela 5.2.



**Figura 5.8:** Temperaturas  $T_L$  que assinalam sobreposições das distribuições não críticas em função de  $L^{-1/\nu}$  para  $D/J = 0$ .

Na Figura (5.9) mostramos as distribuições críticas do Spin-1 com os seguintes valores do campo cristalino  $D/J = 0, -1, -2$ , juntamente com a distribuição crítica do Spin-1/2. As redes utilizadas são indicadas na legenda. As temperaturas  $T_c$  para os casos de  $D/J = 0$  e  $D/J = -2$  foram determinadas fazendo-se cuidadosamente a comparação com a curva crítica do Spin-1/2 por meio do método do Histograma, e estão em acordo com as

respectivas medidas apresentadas anteriormente (veja resultado mostrado na página 53 e a Tabela 4.7). Ressaltamos ainda que medimos as distribuições para o Spin-1 usando o fator de escala  $b = 1/\sigma$ .



**Figura 5.9:** Distribuição crítica do BW Spin-1/2 e do BW Spin-1 para alguns valores do campo cristalino. Para o Spin-1/2 medimos  $25 \times 10^6$  passos de MC e para o Spin-1 medimos  $10^8$ .

### 5.3 Transições de Primeira Ordem e Diagrama de Fases Global

Nesta seção estudamos inicialmente as transições de fase de 1<sup>a</sup> ordem. Temos interesse em saber se existe uma linha de coexistência de fases para valores não nulos da temperatura. Como comentado no primeiro capítulo, o BW Spin-1 exibe uma transição de 1<sup>a</sup> ordem na temperatura nula e campo cristalino  $D/J = 2$ . Vimos por ETF (Tabela 4.7) e pela determinação da distribuição crítica (Figura (5.9)) que temos a presença de uma linha de 2<sup>a</sup> ordem para temperaturas não nulas. Medidas de ETF (Tabela 4.8) indicaram alguns valores associados a esta linha de 1<sup>a</sup> ordem procurada. Podemos então conjecturar se esta linha de 1<sup>a</sup> ordem, iniciando no ponto  $(D/J = 2, T = 0)$ , se prolongaria para temperaturas  $T \neq 0$ , terminando em um ponto multicrítico, o qual daria início à linha de 2<sup>a</sup> ordem.

Usamos o método da Mistura dos Campos de Escala para tentar determinar estas transições de 1<sup>a</sup> ordem. Escolhemos inicialmente valores do campo cristalino possíveis de exibirem a transição descontínua e fizemos simulações de MC aplicando o Metropolis para redes com tamanhos  $24 \leq L \leq 48$ . Iniciamos do estado com temperatura infinita, desprezamos de  $3 - 2 \times 10^5$  medidas iniciais para garantirmos o equilíbrio e armazenamos as configurações da energia sobre  $5 - 3 \times 10^7$  passos de MC. Com um segundo algoritmo fizemos a leitura destas configurações, e armazenamos na forma de histograma a distri-

buição conjunta  $P_L(u, q)$ , sendo, como sabemos,  $u$  a densidade de energia e  $q$  o momento de quadrupolo. Com o método do Histograma e com o ajuste do parâmetro de mistura  $s$  conseguimos medir uma temperatura  $T_L$  que gerasse uma distribuição normalizada  $P_L(\mathcal{D})$  exibindo dois picos simétricos, caracterizando assim uma transição descontínua para a respectiva rede de tamanho  $L$ . Aplicamos uma análise de ETF para cada conjunto de temperaturas, medindo  $L^{-2}$  contra  $T_L$  e encontramos uma estimativa para a temperatura da rede infinita associada à transição.

A Tabela 5.3 apresenta as medidas realizadas para  $D/J = 1, 32$ . Mostramos as temperaturas  $T_0$  em que as simulações foram feitas, as temperaturas  $T_L$  em que obtivemos as distribuições  $P_L(\mathcal{D})$ , e os valores correspondentes assumidos para o parâmetro  $s$ . A Figura (5.10) mostra a distribuição  $P^*(\mathcal{D})$  avaliada para a rede  $L = 42$  (gráfico a), e notamos a disposição de dois picos simétricos. Situações similares são encontradas para as outras redes utilizadas. No segundo gráfico temos o ajuste linear (linha contínua) determinado com os valores  $T_L$  da Tabela 5.3, o qual fornece a temperatura  $T = 1, 2156(1)$ .

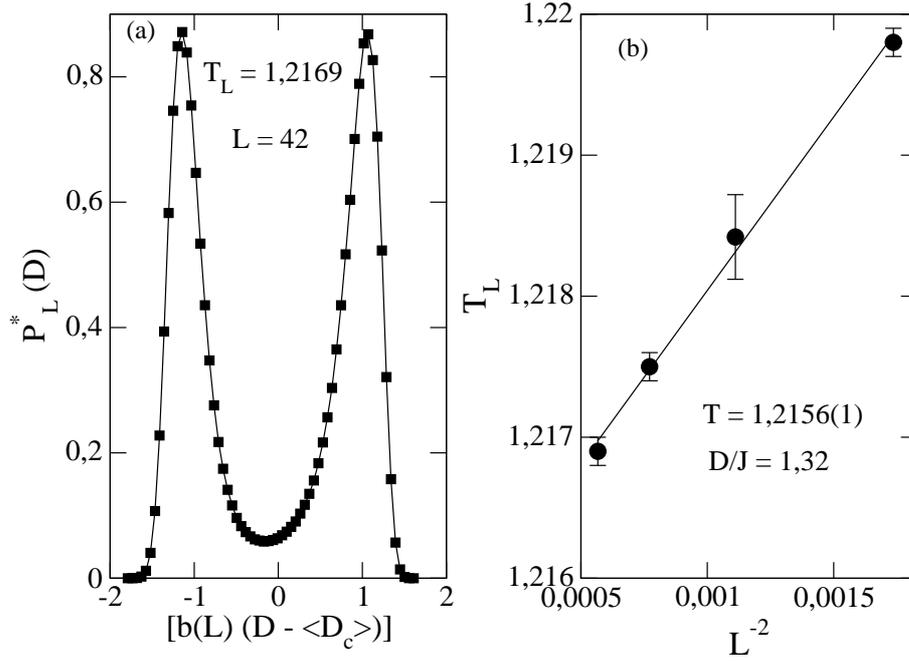
**Tabela 5.3:** Parâmetros para a distribuição  $P^*(\mathcal{D})$  determinados com o campo cristalino  $D/J = 1, 32$ .

Redes $L$	$T_0$	$T_L$	$s$
24	1,222	1,2198(1)	1,4
30	1,218	1,21842(3)	0,6
36	1,217	1,2175(1)	0,4
42	1,217	1,2169(1)	0,4

Da mesma forma, mostramos na Tabela 5.4 as medidas encontradas para  $D/J = 1, 4$ . A Figura (5.11) apresenta as distribuições  $P^*(\mathcal{D})$  para as redes  $L = 48, 36, 24$ , indicando as respectivas temperaturas  $T_L$  (terceira coluna da Tabela 5.4). Observamos que quando  $L$  diminui, menor é a altura dos picos da distribuição. Conseguimos também uma medida satisfatória para  $L = 30$ . A análise de ETF apresentada no último gráfico sugere  $T = 1, 17236(9)$ .

**Tabela 5.4:** Parâmetros para a distribuição  $P^*(\mathcal{D})$  determinados com o campo cristalino  $D/J = 1, 4$ .

Redes $L$	$T_0$	$T_L$	$s$
24	1,18	1,1764(2)	1,45
30	1,179	1,1750(2)	0,6
36	1,176	1,17425(2)	0,4
48	1,1719	1,17331(2)	0,4

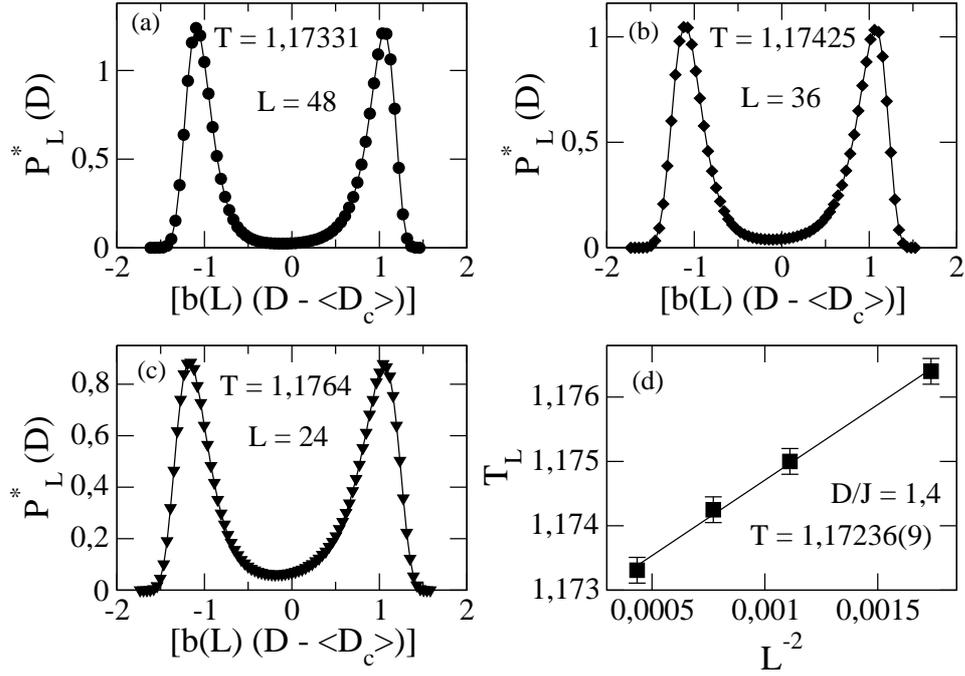


**Figura 5.10:** Gráfico (a): distribuição  $P^*(\mathcal{D})$  (quadrados em negrito) para a rede  $L = 42$  com o campo  $D/J = 1,32$ . A linha contínua acompanhando a distribuição serve de orientação visual. Gráfico (b): análise de ETF indicando a temperatura da transição de 1<sup>a</sup> ordem.

Não foi possível emprendermos o mesmo procedimento para valores maiores do campo cristalino, por exemplo  $D/J = 1,6; 1,7$ , onde é esperado encontrarmos temperaturas cada vez menores. O algoritmo de Metropolis não é tão eficiente para tratar com a coexistência de fases em temperaturas baixas. Entretanto, acreditamos que a qualidade das medidas apresentadas sustenta a existência de transições descontínuas em temperaturas não nulas. Notamos ainda que, devido o tamanho finito dos sistemas, temos a continuação analítica desta linha de 1<sup>a</sup> ordem à medida que o campo cristalino diminui. A Tabela 5.5 mostra as temperaturas encontradas pela EFT para alguns valores do campo. Portanto, com este conjunto total de medidas obtemos uma estimativa da linha de 1<sup>a</sup> ordem.

**Tabela 5.5:** Temperaturas estimadas por ETF para a transição de 1<sup>a</sup> ordem tomando-se valores decrescentes do campo cristalino.

$D/J$	$T$
1,3	1,22582(4)
1,2	1,2743(2)
1	1,3602(1)



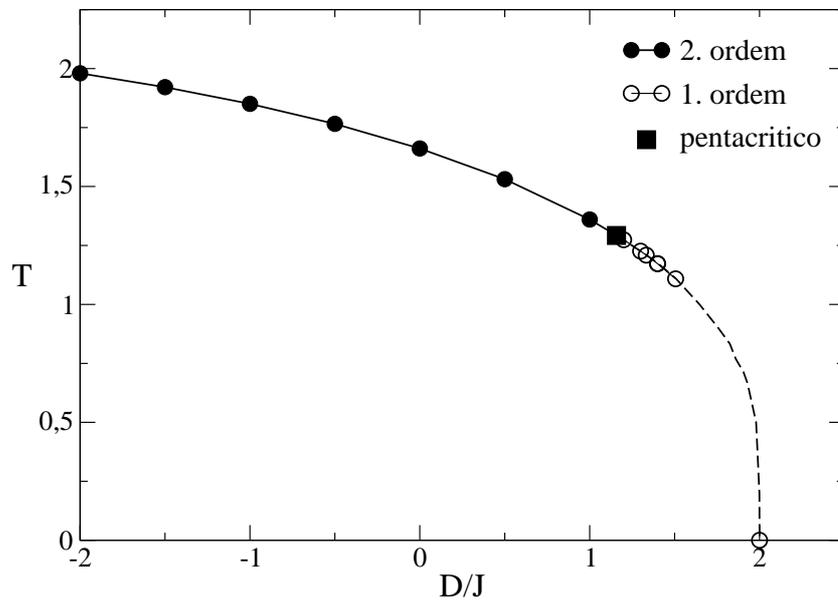
**Figura 5.11:** Distribuições  $P^*(D)$  (símbolos em negrito) para as redes  $L = 48, 36, 24$  com o campo  $D/J = 1,4$ . As linhas contínuas acompanhando as distribuições servem de orientação visual. Gráfico (d): análise de ETF indicando a temperatura de transição de 1<sup>a</sup> ordem.

Estes valores do campo cristalino (Tabela 5.5) também foram analisados segundo as relações de ETF para a transição de 2<sup>a</sup> ordem (Tabela 4.7). Vemos que todas as temperaturas estimadas pelos dois procedimentos estão próximas. Este acordo entre os resultados reforça a conjectura do ponto multicrítico. Pensamos na seguinte estratégia para obter uma estimativa deste ponto: avaliar o Cumulante de Binder ( $U_L$ ) na linha de 1<sup>a</sup> ordem, de modo a tomar um gráfico de  $U_L \times T$ . A intersecção dos cumulantes em um único ponto da linha de transições descontínuas corresponderia ao ponto multicrítico em questão. No entanto não tivemos êxito até o momento.

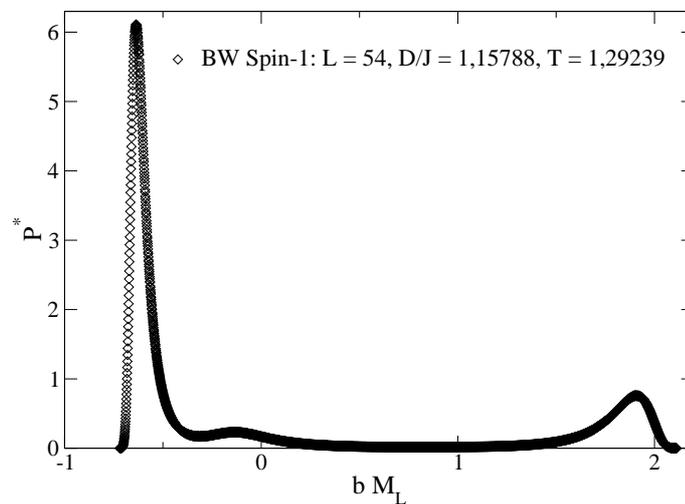
Na Figura (5.12) apresentamos o diagrama de fases global para o BW Spin-1 no plano campo cristalino ( $D/J$ ) contra temperatura ( $T$ ). Determinamos o diagrama reunindo as estimativas para as temperaturas críticas (Tabela 4.7) e as temperaturas das transições descontínuas (Tabela 4.8 e os resultados da Mistura dos Campos). Encontramos apenas uma estimativa aproximada para o ponto multicrítico, dada por ( $D/J = 1,15788, T = 1,29239$ ), obtida do cruzamento das linhas de segunda ordem e primeira ordem. Estes resultados estão indicados na legenda. A continuação da linha de 1<sup>a</sup> ordem (linha tracejada no diagrama) até o ponto ( $D/J = 2, T = 0$ ) é dada pelo resultado de Invariância Conforme[58, 75].

Outra questão interessante seria medir a distribuição crítica universal  $P^*(\tilde{M})$  associada ao ponto multicrítico. Neste caso, determinamos a distribuição usando a estimativa indicada anteriormente para este ponto. Aplicamos o Metropolis com condições de contorno periódicas para a rede  $L = 54$ , com o fator  $b = 1/\sigma$  e medimos as magnetizações

globais da rede ( $M$ ) sobre  $10^8$  passos de MC. A Figura (5.13) apresenta a curva medida.



**Figura 5.12:** Diagrama de fases global para o BW Spin-1 no plano campo cristalino  $\times$  temperatura. O ponto pentacrítico separa a linha de transições de 1ª ordem da linha de 2ª ordem.



**Figura 5.13:** Estimativa da distribuição  $P^*(\tilde{M})$  para o ponto multicrítico do modelo BW Spin-1.

Diferente da distribuição crítica da classe do Spin-1/2 (Figura (5.9)), a distribuição acima exibe um terceiro pico (entre os dois picos mais pronunciados), o qual estaria associado a fase com spins  $s_i = 0$ . As cinco fases que coexistem na linha de 1ª ordem são críticas exatamente no ponto multicrítico. Este ponto é identificado como pentacrítico.

# Capítulo 6

---

## Conclusão

Estudamos o modelo Baxter-Wu Spin-1 com uma anisotropia cristalina usando Grupo de Renormalização Fenomenológico e o método de Escala de Tamanho Finito, o qual foi implementado via simulações canônicas de Monte Carlo extensas. O objetivo principal foi determinar o diagrama de fases global do modelo por meio da caracterização das transições de fases e avaliar a classe de universalidade de comportamentos crítico e multicrítico.

Os métodos de GRCM e GRVS deram uma descrição quantitativa sobre as transições de segunda ordem e da existência do ponto pentacrítico, em concordância com resultados preliminares de Invariância Conforme. Entretanto a localização da linha de primeira ordem, bem como a determinação da classe de universalidade, não foram possíveis de serem obtidos por essas técnicas.

As simulações de Monte Carlo mostram claramente a existência de uma linha de transição de fases de segunda ordem transformando-se numa linha de transição de primeira ordem com a presença de um ponto pentacrítico. A linha de segunda ordem pertence à mesma classe de universalidade do modelo com spin-1/2. Este resultado é o esperado, e está em desacordo com a previsão obtida anteriormente por Invariância Conforme. A distribuição de probabilidades da magnetização foi também obtida para o ponto pentacrítico e mostra um pico adicional centrado no zero devido à fase com magnetização nula.

Salientamos que este assunto não está totalmente esgotado. Ainda resta uma determinação mais precisa do ponto pentacrítico. A utilização do cumulante de Binder não se mostrou satisfatória e necessitamos de uma outra quantidade equivalente, ou mesmo simulações mais extensas, para a sua localização.

Uma técnica possível para melhor estudar o modelo pode ser o histograma largo através do uso do algoritmo de Wang-Landau. Este procedimento parece ser muito útil pois com apenas uma simulação podemos obter as quantidades de interesse em todas as temperaturas e campos, o que certamente facilitaria o estudo do diagrama completo.

Uma outra possibilidade de estudo do modelo refere-se à sua dinâmica de tempos curtos. Este assunto já foi tratado para o modelo de spin-1/2. No presente caso, a análise refere-se não somente ao estudo das transições contínuas, mas também na dinâmica do ponto pentacrítico, ainda por nós desconhecida e certamente muito interessante.

# Referências

---

- [1] J.F.M. Rocha (Org.), *Origens e Evolução das Idéias da Física*, (Edufba, Salvador, p. 161, 2002).
- [2] S.R.A. Salinas, *Introdução à Física Estatística*, (EDUSP, São Paulo, 1997).
- [3] J.W. Gibbs, *Elementary Principles in Statistical Mechanics: 1902*, (Dover Publications, New York, 1960).
- [4] N. Goldenfeld, *Lectures on Phase Transitions and the Renormalization Group*, (Addison-Wesley, Illinois, 3 ed., p. 43, 1993).
- [5] C. Domb, *The Critical Point - A historical introduction to the modern theory of critical phenomena*, (Taylor & Francis, Ramat-Gan, 1995).
- [6] T. Andrews, *Philos. Trans. R. Soc.* **159**, 575 (1869).
- [7] J.H. Van der Waals, *Over de Continuïteit van den Gas - en Vloeïstoofstand*, Tese de Doutorado - Leiden, 1873.
- [8] J.C. Maxweel, *Nature* **10**, (1874); **11**, (1875).
- [9] P. Curie, *Ann. Chim. Phys.* **5**, 289 (1895).
- [10] P. Weiss, *J. Phys.* **6**, 661 (1907); P. Weiss, H. Kamerlingh Onnes, *J. Phys.* **9**, 555 (1910).
- [11] M. Smoluchowski, *Ann. Phys.* **25**, 205 (1908).
- [12] A. Einstein, *Ann. Phys.* **33**, 1276 (1910).
- [13] L.S. Ornstein, F. Zernick, *Proc. Akad. Sci.* **17**, 793 (1914).
- [14] W.L. Bragg, E.J. Williams, *Proc. R. Soc. A* **145**, 699 (1934).
- [15] L.D. Landau, *Phys. Z. Sow.* **11**, 26, 545 (1937).
- [16] E. Ising, *Z. Phys.* **31**, 253 (1925).
- [17] L. Onsager, *Phys. Rev.* **65**, 117 (1944).
- [18] R.E. Peierls, *Proc. Cambridge Philos. Soc.* **32**, 477 (1936).
- [19] H.A. Kramers, G.H. Wannier, *Phys. Rev.* **60**, 252-63 (1941).

- [20] L. Onsager, *Proc. Florence Conference on Statistical Mechanics, Il Nuovo Cimento* **6**, 261 (1949).
- [21] C.N. Yang, G.H. Wannier, *Phys. Rev.* **85**, 808 (1952).
- [22] E.A. Guggenheim, *J. Chem. Phys.* **13**, 253 (1945).
- [23] W.M. Fairbank, M.J. Buckingham, C.F. Kellers, *Proc. 5th Int. Conf. on Low Temperature Physics*, (Press, University of Wisconsin, 1957).
- [24] P. Heller, G.B. Benedek, *Phys. Rev. Lett.* **8**, 428 (1962).
- [25] C. Domb, *Adv. Phys.* **9**, 149-245 (1960); C. Domb, M.F. Sykes, *Phys. Rev.* **128**, 168 (1962).
- [26] J.W. Essam, M.E. Fisher, *J. Chem. Phys.* **38**, 147 (1963).
- [27] G.S. Rushbrooke, *J. Chem. Phys.* **39**, 842 (1963).
- [28] P.C. Hemmer, J.L. Lebowitz, *DG 5b*, Ch. 2 (1976).
- [29] B. Widom, *J. Chem. Phys.* **43**, 3898 (1965).
- [30] C. Domb, D.L. Hunter, *Proc. Phys. Soc.* **86**, 1147 (1965).
- [31] A.Z. Patashinskii, V.L. Pokrovskii, *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **50**, 439 (1966).
- [32] R.B. Griffiths, *Phys. Rev.* **158**, 176 (1967).
- [33] J.T. Ho, J.D. Litster, *Phys. Rev. Lett.* **22**, 603 (1969).
- [34] H.E. Stanley, *Phase Transitions and Critical Phenomena*. (Oxford University Press, New York, p. 175, 1971).
- [35] L.P. Kadanoff, *Physics* **2**, 263 (1966).
- [36] K.G. Wilson, *Phys. Rev. B* **4**, 3174-84 (1971); K.G. Wilson, J. Kogut, *Phys. Rep.* **12C**, 77 (1974).
- [37] M.S. Green (ed.), *Critical Phenomena, Proc. 1970 Enrico Fermi Internat. Sch. Phys.*, (Academic, New York, 1970).
- [38] M.N. Barber, *Physica A* **170**, 221-46 (1991).
- [39] J.A. Plascak, W. Figueiredo, B.C.S. Grandi, *Braz. J. Phys.* **29**, 579-96 (1999).
- [40] K.G. Wilson, M.E. Fisher, *Phys. Rev. Lett.* **28**, 240 (1972).
- [41] J.C. Le Guillou, J. Zinn-Justin, *Phys. Rev. Lett.* **39**, 95-98 (1977).
- [42] Th. Niemeijer, J.M.J. van Leeuwen, *Phase Transitions and Critical Phenomena Vol 6*. M.S. Green e C. Domb (eds.), (Academic Press, London, 425-505, 1976).
- [43] M.P. Nightingale, *Physica* **83A**, 561 (1976).

- [44] J.O. Indekeu, A. Maritan, A.L. Stella, *J. Phys. A* **15**, L291 (1982); *Phys. Rev. B* **35**, 305 (1987).
- [45] N. Metropolis, A. Rosenbluth, M. Rosenbluth, A. H. Teller, E. Teller, *J. Chem. Phys.* **21**, 1087 (1953).
- [46] B.J. Alder, T.E. Wainwright, *J. Chem. Phys.* **27**, 1208 (1957).
- [47] F.M.S.S. Fernandes, *Química* **90**, Bol. Soc. Port. Quím., 39 (2003).
- [48] M.E.J. Newman, G.T. Barkema, *Monte Carlo Methods in Statistical Physics*, (Clarendon Press, Oxford, 1999).
- [49] W.P. Wolf, *Braz. J. Phys.* **30**, 794-810 (2000).
- [50] A.M. Ferrenberg, D.P. Landau, *Phys. Rev. B.* **44**, 5081-91 (1991).
- [51] D.P. Landau, K. Binder, *A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics*, (University Press, Cambridge, 2000).
- [52] A.M. Ferrenberg, *Computer Simulation Studies in Condensed Matter Physics III*. D.P. Landau, K.K. Mon e H.-B. Schttler (eds.), (Springer-Verlag, Heidelberg, 1991); A.M. Ferrenberg, R.H. Swendsen, *Phys. Rev. Lett.* **61**, 2635 (1988).
- [53] F. Wang, D.P. Landau, *Phys. Rev. E* **64**, 056101 (2001).
- [54] R.J. Baxter, *Exactly Solved Models in Statistical Mechanics*, (Academic Press, Londres, 1982).
- [55] R.J. Baxter, F.Y. Wu, *Aust. J. Phys.* **27**, 357-67 (1974); 369-81 (1974); R.J. Baxter, F.Y. Wu, *Phys. Rev. Lett.* **31**, 1294 (1973).
- [56] F.Y. Wu, *Rev. Mod. Phys.* **54**, 235-68 (1982).
- [57] D.W. Wood, H.P. Griffiths, *ibid* **7**, 1417 (1974); D. Merlini, *Lett. Nuovo Cim.* **8**, 623 (1973); H.P. Griffiths, D.W. Wood, *J. Phys. C: Solid State Phys.* **6**, 2533 (1973); D.W. Wood, H.P. Griffiths, *J. Phys. C: Solid State Phys.* **5**, L253 (1972).
- [58] J.C. Xavier, *O Modelo Baxter-Wu*. 1999. 8 f. Tese (Doutorado em Física) - Departamento de Física, Universidade Federal de São Carlos, São Carlos, 1999.
- [59] N. Jan, *Can. J. Phys.* **59**, 708-11 (1981); D. Imbro, P.C. Hemmer, *Phys. Lett.* **57A**, 297-99 (1976); M.N. Barber, *J. Phys. A: Math. Gen.* **9**, L171-74 (1976); M.P.M. Den Nijs, A.M.M. Pruisken, J.M.J. Van Leeuwen, *Physica* **84A**, 539-56 (1976).
- [60] H. Fried, *J. Phys. A: Math. Gen.* **25**, 2545-55 (1992); J. Adler, D. Stauffer, *Physica A* **181**, 396-405 (1992); M.A. Novotny, D.P. Landau, *Phys. Rev. B* **32**, No. 5, 3112-16; No. 9, 5874-79 (1985); M.A. Novotny, D.P. Landau, R.H. Swendsen *Phys. Rev. B* **26**, No. 1, 330-36 (1982); M.A. Novotny, D.P. Landau, *Phys. Rev. B* **24**, No. 3, 1468-80 (1981).
- [61] M.F. Sykes, M.G. Watts. *ibid* **8**, 1469 (1975); R.J. Baxter, M.F. Sykes, M.G. Watts, *ibid* **8**, 245 (1975); M.G. Watts, *J. Phys. A: Math. Gen.* **7**, L85 (1974).

- [62] F.C. Alcaraz, J.C. Xavier, *J. Phys. A: Math. Gen.* **30**, L203 (1997); **32**, 2041-60 (1999).
- [63] E. Arashiro, J.R. Drugowich de Felício, *Phys. Rev. E* **67**, 046123-1 (2003); M. Santos, W. Figueiredo, *Phys. Rev. E* **63**, 042101 (2001).
- [64] S.S. Martinos, A. Malakis, I. Hadjiagapiou, *Physica A* **331**, 182-88 (2004).
- [65] N. Schreiber, J. Adler, *J. Phys. A: Math. Gen.* **38**, 7253-67 (2005).
- [66] M. Blume, *Phys. Rev.* **141**, 517 (1966); H.W. Capel, *Physica* **32**, 966 (1966).
- [67] J.A. Plascak, D.P. Landau *Phys. Rev. E* **67**, 015103-1 (2003);
- [68] W. Kinzel, E. Domany, A. Aharony, *J. Phys. A: Math. Gen.* **14**, 417-22 (1981).
- [69] B. Nienhuis, A.N. Berker, E.K. Riedel, M. Schick, *Phys. Rev. Lett.* **43**, 737-40 (1979).
- [70] K. Binder, *Phase Transitions and Critical Phenomena*, C. Domb, J. L. Lebowitz (eds.), (Academic, Londres, V. 8, 1983).
- [71] A.D. Bruce, *J. Phys. C* **14**, 3667 (1981); K. Binder, *Z. Phys. B* **43**, 119-40 (1981).
- [72] P.H.L. Martins, J.A. Plascak, *Braz. J. Phys.* **34**, 433-37 (2004).
- [73] N.B. Wilding e A. D. Bruce, *J. Phys: Condens. Matter* **4**, 3087 (1992).
- [74] M.L.M. Costa, J.A. Plascak, *Braz. J. Phys.* **34**, 419-22 (2004).
- [75] M.L.M. Costa, J.C. Xavier, J.A. Plascak, *Phys. Rev. B* **69**, 104103-1 (2004).
- [76] M.E. Fisher, A. Nihat Berker, *Phys. Rev. B* **26**, 2507-13 (1982).