

**Estudo do modelo XY vetorial de Blume-Emery-Griffiths:
aplicações a sistemas magnéticos e a filmes de misturas de ^3He - ^4He**

João Batista dos Santos Filho

**Estudo do modelo XY vetorial de Blume-Emery-Griffiths:
aplicações a sistemas magnéticos e a filmes de misturas de ^3He - ^4He**

João Batista dos Santos Filho

Orientador: Prof. João A. Plascak

Tese de doutorado apresentado à
UNIVERSIDADE FEDERAL DE MINAS GERAIS.

Belo Horizonte, Setembro 2011

Dedicatória

A minha esposa Tatiana e minha filha Larissa,
Aos meus pais João Batista & Josefa do Carmo,
Aos meus irmãos.

Agradecimentos

Ao professor Plascak pela confiança demonstrada, amizade e valiosa orientação.

Aos professores Douglas, Nelson e Lucas Mol pelas valiosas sugestões durante a realização deste trabalho.

Aos professores Ricardo Wagner, Ronald Dickman, Sebastião, Ricardo Schor pelos ensinamentos e aprofundamento de conhecimentos científicos para o trabalho e para a vida.

Aos professores Roberto Paniago, Simone Alexandre e André Ferlauto pelas valiosas sugestões durante o exame de qualificação.

Às secretarias Marluce e Ieda pela colaboração em diferentes momentos do doutorado.

Aos meus colegas Luellerson, Carlos, Angélica, Jonas, Antônio, Alexandre, Faisal, pela amizade pelos momentos de estudo e bate-papos que ajudaram a moldar esse trabalho.

À Mariceu pelo seu carinho e disponibilidade constante.

Aos meus irmãos Marcio, Flavia, Gilmar e Alexandra e a imensa lista de tios e primos cunhados e amigos onde pude ter grande apoio para lutar mesmo nas grandes adversidades.

Aos meus pais João e Josefa que não mediram esforços para que eu pudesse chegar até aqui.

À minha querida Tatiana por estar do meu lado em todos os momentos com seu amor, incentivos, paciência e sugestões que me fizeram seguir mais confiante a cada dia. E pela atenciosa revisão desse trabalho.

À todas as pessoas que me apoiaram e contribuíram para realização deste trabalho.

À Deus por estar sempre presente em todos os momentos de minha vida, não permitindo que eu fraquejasse frente aos desafios da vida, e que é o maior responsável por eu ter chegado até aqui.

Sumário

Lista de Figuras	v
Lista de Tabelas	xii
Lista de Siglas	xiii
Lista de Símbolos	xiv
Resumo	xvi
Abstract	xvii
1 Introdução	1
2 Considerações Gerais	6
2.1 Transição de fase	7
2.2 Modelo XY	8
2.3 Impurezas ou defeitos nos modelos magnéticos	12
2.4 O hélio e o modelo Vetorial Blume-Emery-Griffiths	13
2.5 Simulação Monte Carlo	16
2.5.1 Gás de Rede	16
2.5.2 Metropolis	17
2.5.3 Wolff	18
2.5.4 Superrelaxação	18
2.6 Método do histograma	19
2.6.1 Método do histograma Simples	19

2.6.2	Método do histograma multidimensional	21
2.7	Teoria de escala de tamanho finito	22
3	Modelo XY tridimensional como diluição por sítios	27
3.1	Introdução	28
3.2	Resultados	30
3.2.1	Expoentes Críticos	30
3.2.2	Diagrama de fase	35
3.2.3	Comparação com resultados experimentais	37
3.3	Conclusão	43
4	Filmes monocamadas de misturas de ^3He-^4He	45
4.1	Introdução	46
4.2	Resultados	49
4.2.1	Rede quadrada e $K = 1$	49
4.2.2	Rede quadrada e $K = 0$	58
4.2.3	Rede triangular e $K = 1$	67
4.3	Conclusão	77
5	Filmes multicamadas de misturas de ^3He-^4He	79
5.1	Introdução	80
5.2	Resultados	81
5.3	Conclusão	90
6	Considerações finais e perspectivas	92
	Referências Bibliográficas	94

Lista de Figuras

2.1	Vórtices (centro marcado com um círculo) e antivórtices (centro marcado com um X) no modelo XY (ilustração gerada pelo programa STP XYModel [57].)	10
2.2	Calor específico do modelo XY bidimensional numa rede triangular, a linha tracejada marca a temperatura de transição BKT [23].	11
2.3	Diagrama de transição de fase experimental de misturas de ^3He - ^4He retirado da referência [64], onde q é a concentração de ^3He . Os círculos cheios são os pontos de separação de fase obtidos de dados da constante dielétrica. Os círculos abertos são temperatura de transição T_λ , os quadrados são resultados da referência [63] obtidos com base na atenuação do terceiro som.	15
3.1	Susceptibilidade magnética χ_ε em diferentes amostras, para $p = 0,95$ e $p = 0,85$ e $L = 20$, obtida na temperatura próxima da temperatura de transição. A linha sólida é a média das n amostras de acordo com a Eq. (3.3).	31
3.2	Distribuição de frequência da susceptibilidade magnética χ_ε em $p = 0,85$ e $L = 20$. Onde o espectro da distribuição foi discretizado com um passo de $\delta_\chi = 0,4$. A linha sólida é um ajuste por uma gaussiana.	31
3.3	Cumulante de Binder para o modelo XY diluído com $p = 0,97$.	32
3.4	Escala de tamanho finito das quantidades termodinâmicas X_1 , X_2 , e X_3 com o correspondente ajuste (linha tracejada) sem as correções de escala. As barras de erro são menores que o tamanho dos símbolos.	33
3.5	Escala de tamanho finito das quantidades termodinâmicas X_1 , X_2 , e X_3 com o correspondente ajuste. As barras de erro são menores que o tamanho dos símbolos.	34
3.6	Temperatura $T_c(L)$ obtida do máximo da susceptibilidade como função de tamanho linear da rede L . A linha sólida mostra o ajuste dos dados de acordo com a relação de escala dada na Eq. (3.11). Os mesmos valores estão apresentados na Tabela 3.1. As barras de erros são menores que o tamanho dos símbolos.	35

- 3.7 Diagrama de fase do modelo tridimensional XY com diluição por sítios do tipo temperada no plano temperatura reduzida $T_c(p)/T_c(1)$ versus concentração de sítios magnéticos p . Os círculos cheios são resultados da simulação Monte Carlo, e a linha pontilhada é uma guia para os olhos. O triângulo marca o local do ponto de percolação p_c [97]. A linha cheia é resultado de expansões em série (ES) para o modelo XY de spin 1/2 retirado do trabalho de Reeve e Betts [43]. O detalhe da figura apresenta os valores da inclinação inicial da temperatura com a diluição ι 36
- 3.8 Diagrama de fase no plano temperatura reduzida $T_c(p)/T_c(1)$ versus concentração de sítios magnéticos p para o modelo tridimensional XY com diluição por sítios. Os círculos vazios são os resultados experimentais de Burriel e colaboradores [100], os círculos cheios são resultados da simulação Monte Carlo e o triângulo marca o ponto de percolação p_c [97]. 37
- 3.9 Diagrama de fase do modelo XY tridimensional com diluição por sítios do tipo temperada, no plano temperatura reduzida $T_c(p)/T_c(1)$ vs. p para baixa concentração, comparado com resultados experimentais de DeFotis e colaboradores [42]. A linha pontilhada no caso dá a correspondente inclinação na região indicada. 38
- 3.10 Ilustração da quebra das interações de troca J_1 e do surgimento de interações de supertroca J_2 devido a presença de impurezas representadas por esferas menores (caso bidimensional). 39
- 3.11 Diagrama do modelo XY tridimensional diluído com uma interação adicional de supertroca J_2 no plano temperatura reduzida $T_c(p)/T_c(1)$ vs. p comparado com os resultados experimentais de Defotis e colaboradores [42]. 40
- 3.12 Curva da intensidade da interação de supertroca J_2 versus p . Os pontos são os valores de J_2 que produziram o melhor ajuste em cada ponto $T_c(p)$ do diagrama de fase experimental. A linha tracejada é um ajuste linear dos valores de J_2 , a linha cheia é a relação $J_2(p) = 0,21A_0(p)$ 40
- 3.13 Diagrama no plano temperatura reduzida $T_c(p)/T_c(1)$ vs. p do modelo XY tridimensional diluído com interação de supertroca $J_2(p) = 0,773p - 0,572$ comparado com resultados experimentais de Defotis e colaboradores [42]. 41
- 3.14 Probabilidades $A_n(p)$ como função de p obtidas através de Simulação Monte Carlo para $L = 20$ e $L = 100$ 42

- 3.15 Diagrama no plano temperatura reduzida $T_c(p)/T_c(1)$ vs. p do modelo XY tridimensional diluído com interação de supertoca $J_2^0 = 0,21$ e $J_2^n = 0$ para $n > 0$ comparado com resultados experimentais de Defotis e colaboradores [42] 43
- 4.1 Curva da concentração de ^3He q como função da temperatura para $K = 1$, $d = \Delta/J = -4$, $d = 0$ e $d = 2$ e tamanhos de rede variando de $L = 16$ a $L = 512$ 50
- 4.2 Curva da concentração de ^3He q como função do campo d para $K = 1$, e rede de tamanho $L = 16$. Os círculos cheios são resultados obtido da simulação com o incremento o campo d e os círculos abertos são resultados obtidos com o decremento o campo d 51
- 4.3 Curva do calor específico como função da temperatura para $K = 1$, $d = -4$, $d = 0$ e $d = 2$ e tamanhos de rede variando de $L = 16$ a $L = 512$ 52
- 4.4 Curva do módulo da helicidade como função da temperatura para $K = 1$, $d = -4$ e redes de tamanho variando de $L = 16$ a $L = 512$. O cruzamento do módulo da helicidade com a reta $2T/\pi$ define a temperatura de transição. 53
- 4.5 Curva das Temperatura de transição BKT (T_{BKT}) como função do tamanho da rede L obtida do módulo da helicidade para $K = 1$ e $d = -4$ 53
- 4.6 Curva de χ como função da temperatura para $K = 1$, $d = -4$ e redes de tamanho variando de $L = 16$ a $L = 512$. Os pontos são resultados da simulação Monte Carlo, a linha cheia é uma guia para os olhos e a linha tracejada é uma extrapolação usando a Eq. (4.9). 54
- 4.7 Curva de $\chi/L^{2-\eta}$ como função da temperatura, onde $\eta = 1/4$, $K = 1$, $d = -4$ e redes de tamanho variando de $L = 16$ a $L = 512$. Os pontos são resultado da simulação Monte Carlo, as linhas são guias para os olhos. O detalhe mostra o efeito de escala de tamanho finito. 55
- 4.8 Diagrama de fase no plano temperatura vs. campo cristalino reduzido para o modelo com $K = 1$ numa rede quadrada. Os círculos cheios indicam a transição BKT e os abertos indicam a transição de primeira ordem. O triângulo cheio e o quadrado representam o ponto crítico simples e o ponto BKT terminal, respectivamente. 56

4.9	Diagrama de coexistência no plano T/T_{BKT}^0 versus concentração de ^3He . Os círculos cheios indicam resultado da simulação Monte Carlo (as linhas cheias são apenas guia para os olhos). A linha pontilhada mostra o resultado obtido por Cardy e Scalapino [24] para o modelo rotor planar (RP).	57
4.10	Curva da concentração de ^3He q como função da temperatura para redes de tamanho variando de $L = 16$ a $L = 512$	58
4.11	Curva da concentração de ^3He q como função da temperatura para $d = -4$, $d = 0$ e $d = 0,81$ e redes de tamanho variando de $L = 16$ a $L = 512$	59
4.12	Diagrama de fase no plano temperatura vs. campo cristalino reduzido para o modelo com $K = 0$ numa rede quadrada. Os círculos cheios indicam a transição BKT e os abertos indicam a transição de primeira ordem. O triângulo indica o ponto tricrítico efetivo (PTE).	59
4.13	Diagrama de fase no plano T/T_{BKT}^0 versus campo cristalino, para $K = 0$ numa rede quadrada. Os círculos cheios são resultados da simulação para o modelo XV-VBEG, a linha tracejada é o resultado para o modelo VBEG apresentado por Dillon e colaboradores [119]. As estrelas são resultados do modelo VBEG apresentado por Garcia e colaboradores [125]. O triângulo e quadrado marcam o ponto tricrítico efetivo (PTE) do modelo XY-VBEG e do VBEG respectivamente.	60
4.14	Diagrama de coexistência no plano T versus concentração de ^3He . Os círculos cheios indicam resultado da simulação Monte Carlo e as linhas são apenas guia para os olhos.	61
4.15	Curva da distribuição de probabilidade da concentração de ^3He $P(q)$ para rede de tamanho $L = 64$, temperatura $t = 0,405$ e uma série de campos d próximo ao ponto de transição de primeira ordem. As linhas são apenas guias para os olhos.	62
4.16	Curva da distribuição de probabilidade da concentração de ^3He $P(q)$ para temperatura $T = 0,405$, e diferentes tamanhos de rede. As linhas são apenas guias para os olhos.	63
4.17	Curva da distribuição de probabilidade da concentração de ^3He $P(q)$ para rede de diferentes tamanhos. As linhas são apenas guias para os olhos.	64
4.18	Curva do campo $d_c(L)$ como função do L^{-2} , onde os pontos são resultado das simulação e a linha pontilhada é um ajuste linear.	64

4.19	Curva de $\chi/L^{7/4}$ como função da temperatura para diferentes tamanhos de rede.	65
4.20	Ajuste do ponto de transição BKT.	65
4.21	Detalhe da região do ponto tricrítico efetivo do diagrama de fase no plano temperatura vs. campo cristalino reduzido para o modelo com $K = 0$ numa rede quadrada.	66
4.22	Detalhe da região do ponto tricrítico efetivo no plano T vs. d do modelo VBEG com $K = 0$ numa rede triangular retirado do trabalho de Berker e Nelson [23].	67
4.23	Magnetização no plano como função da temperatura para diferentes tamanhos de rede e campo $d = -2$, onde os pontos são o resultados da simulação, a linha tracejada é um ajuste de uma lei de potência e a linha cheia é o resultado exato da Eq. (4.4).	68
4.24	Curva da temperatura crítica $T(L) \times L$, onde os pontos são o resultado do ajuste na magnetização e a linha tracejada é o resultado do ajuste utilizando a Eq. (4.15) em dois intervalos diferentes.	69
4.25	Magnetização no plano como função da temperatura para diferentes valores de campos cristalino, onde os pontos são os resultados da simulação, a linha tracejada é um ajuste de uma lei de potência.	69
4.26	Logaritmo da susceptibilidade como função da temperatura para tamanhos de redes variando $L = 32$ a $L = 512$ e diferentes valores de campo cristalino reduzido d . Os pontos são resultados da simulação e as linhas cheias são guias para os olhos.	70
4.27	Ajuste do logaritmo da susceptibilidade com função da temperatura de acordo com a Eq. (4.9) para diferentes valores do potencial químico reduzido d . A linha cheia é o melhor ajuste BKT.	71
4.28	Curva da susceptibilidade e da concentração de ^3He como função da temperatura para redes de tamanho variando de $L = 16$ a $L = 512$	72
4.29	Curvas de $\chi/L^{2-\eta} \times T$ para diferentes valores de rede, e $d = 3,55$ incrementando e decrementando a temperatura. Os pontos são resultado da simulação e as linhas são guias para os olhos.	72
4.30	Curva de histerese da concentração de ^3He como função do campo para diferentes tamanhos de rede. Os pontos são resultado da simulação e a linha é guia para os olhos.	73

4.31	Curva da distribuição de probabilidade da concentração de ^3He $P(q)$ para rede de tamanho $L = 20$, em diferentes valores de temperatura e campo cristalino sobre a linha de coexistência.	74
4.32	Distribuição de probabilidades da concentração de ^3He para as redes $L = 20$, $L = 30$ e $L = 40$	75
4.33	Diagrama de fase no plano temperatura vs. campo cristalino reduzido para o modelo com $K = 1$. Os círculos cheios indicam a transição BKT e os abertos indicam a transição de primeira ordem. O triângulo cheio e o quadrado representam o ponto crítico simples e o ponto BKT terminal, respectivamente. A inserção mostra em detalhe a região próxima aos pontos críticos, onde há uma aparente continuação analítica da transição BKT.	76
4.34	Diagrama de coexistência no plano da temperatura versus concentração para o modelo com $K = 1$. Os círculos cheios indicam a transição e os círculos abertos indicam o limite de coexistência do superfluido e ^3He fluido normal, bem como a transição ^4He e ^3He líquido normal (as linhas são apenas guia para os olhos). O triângulo cheio e o quadrado cheio representam, respectivamente, o ponto crítico simples e o ponto BKT terminal para o modelo XY VBEG. A linha pontilhada mostra o resultado obtido por Berker e Nelson para o modelo rotor planar (RP).	77
5.1	Ilustração do filme multicamada simulado.	80
5.2	Curva do calor específico como função da temperatura do modelo XY-VBEG com $K = 1$ e $d = -4$ para diferentes tamanhos de rede e de espessuras h	81
5.3	Curva do módulo da helicidade como função da temperatura do modelo XY-VBEG com $K = 1$ e $d = -4$ para diferentes tamanhos de rede e de espessuras h . O cruzamento do módulo da helicidade com a reta $2T/h\pi$ define a temperatura de transição.	82
5.4	Curva de $\chi/L^{2-\eta}$ como função da temperatura, onde $\eta = 1/4$, $K = 1$, $d = -4$ para diferentes tamanhos de rede e de espessuras h	83
5.5	Temperatura BKT do modelo VBEG com $K = 1$ como função da espessura h dos filmes. A linha pontilhada é um ajuste usando a Eq. (5.1). A linha cheia marca a temperatura de transição de um sistema tridimensional.	84

5.6	Temperatura BKT do modelo VBEG com $K = 1$ como função da espessura h dos filmes para diferentes valores da campo cristalino. A linha pontilhada é um ajuste usando a Eq. (5.1).	84
5.7	Diagrama de fase no plano temperatura vs. campo cristalino reduzido para o modelo VBEG com $K = 1$ para filmes com diferentes espessuras, comparado com o modelo na rede tridimensional apresentado por Freire e colaboradores [35]. Os círculos cheios indicam uma transição BKT, os abertos indicam a transição de primeira ordem e as estrelas indicam transição de segunda ordem. .	85
5.8	Localização do ponto BKT terminal (PT) e do ponto crítico isolado (PC) do modelo XY-VBEG com $K = 1$ para diferentes espessuras. O ponto tricrítico do modelo tridimensional está marcado com um círculo cheio e foi retirado da Ref. [35]	86
5.9	Razões $T_{BKT}^{PT}(h)/T_{BKT}^0(h)$ e $T_{BKT}^{PC}(h)/T_{BKT}^0(h)$ do modelo XY-VBEG com $K = 1$ para diferentes espessuras. A razão T_c^{PTC}/T_c^0 do modelo tridimensional retirada da Ref. [35] está marcado com uma linha tracejada.	87
5.10	Concentração média de ^3He no ponto BKT terminal como função da espessura. Os pontos são resultados das simulações e a linha pontilhada é uma guia para os olhos.	88
5.11	Distribuição de probabilidade da concentração de ^3He $P(q)$ em cada camada de um filme com $h = 11$ e $L = 40$	89
5.12	Concentração de ^3He em cada camada como função do campo cristalino. Os pontos são resultados da simulação e as linhas são guias para os olhos.	89
5.13	Distribuição de probabilidade em diferentes camadas num ponto sobre a linha de transição de primeira ordem. Os pontos são resultado da simulação a linha é um ajuste gaussiano.	90

Lista de Tabelas

- 3.1 Expoentes críticos do modelo XY com diluição por sítios para diferentes concentrações. Também é dado o cumulante de Binder e a temperatura crítica obtida do máximo da susceptibilidade e do cumulante de Binder. 34
- 5.1 Temperatura de transição BKT obtida com o módulo da helicidade (T_{BKT}^Y) e com a lei de escala da susceptibilidade (T_{BKT}^X) para $k = 1$ e $d = -4$ em diferentes espessuras. 83

Lista de Siglas

BKT	Berezinskii-Kosterlitz-Thouless
BEG	Blume-Emery-Griffiths
XY-VBEG	Modelo vetorial Blume-Emery-Griffiths versão XY
MCS	Passos de Monte Carlo
ETF	Escala de Tamanho Finito
ES	Expansões em série
RP	Rotor planar
PC	Ponto crítico isolado
PT	Ponto BKT terminal
PTE	Ponto tricrítico efetivo

Lista de Símbolos

T	Temperatura
T_c	Temperatura crítica
m	Magnetização por sítio
χ	Susceptibilidade magnética
c	Calor específico
ξ	Comprimento de correlação
t	Temperatura reduzida $t = (T - T_c) / T_c$
β	Expoente da magnetização
γ	Expoente da susceptibilidade
α	Expoente do calor específico
ν	Expoente do comprimento de correlação
J	Constante de interação de troca
S_i	Variável de spin do sítio i
M_{xy}	Magnetização no plano
T_{BKT}	Temperatura de transição Berenzinskii-Kosterlitz-Thouless
η	Expoente relacionado com função de correlação na transição BKT
Υ	Módulo da helicidade
\mathcal{H}	Hamiltoniano
ε	Amostra aleatória
p_c	Concentração crítica ou concentração de percolação
K	Constante de interação de troca biquadrática
Δ	Constante de anisotropia cristalina
z	Expoente dinâmico crítico
k_B	Constante de Boltzmann

L	Tamanho linear da rede
U_4	Cumulante de Binder de quarta ordem do parâmetro de ordem
U_4^*	Valor do cumulante no ponto crítico
ω	Expoente de correção de escala
N	Número de total de sítios na rede
ε_i	variável aleatória relacionada com sítio i
p	Concentração de sítios magnéticos ou concentração de ^4He
q	Concentração de impurezas magnéticas ou concentração de ^3He
$\{\varepsilon\}$	Conjunto de amostras aleatórias
$\#\{\varepsilon\}$	Número de amostras aleatórias
X_1	$= \langle m_{xy} \rangle$
X_2	$= \langle m_{xy}^2 \rangle$
X_3	$= \frac{\partial}{\partial T} \langle \text{Log}(m_{xy}^2) \rangle$
ι	Inclinação inicial com a diluição $\left. \frac{d}{dp} \left(\frac{T_c(p)}{T_c(1)} \right) \right _{p=1}$
$A_n(p)$	é a probabilidade de encontrar uma impureza com n impurezas entre os primeiros vizinhos
E	Energia total do sistema
d_c	Campo cristalino do ponto de transição de primeira ordem
$P(q)$	Picos da curva de distribuição de probabilidade da concentração de ^3He
$T_m(L)$	temperatura de Curie efetiva do sistema finito
d	Campo cristalino reduzido
χ^2/dof	Erro da regressão não-linear
T_{PT}	Temperatura do ponto BKT terminal
d_{PT}	Campo cristalino reduzido do ponto BKT terminal
T_{PC}	Temperatura no ponto crítico isolado
d_{PC}	Campo cristalino reduzido no ponto crítico isolado
h	Tamanho linear da espessura do filme

Resumo

Neste trabalho, estudou-se, através de simulações Monte Carlo, o modelo XY clássico com diluição temperada por sítio e uma versão XY do modelo vetorial de Blume-Emery-Griffiths (XY-VBEG). Este foi proposto por Berker e Nelson para descrever o comportamento de filmes de misturas de ^3He - ^4He . Foram empregadas extensivas simulações Monte Carlo utilizando um algoritmo híbrido que combina os algoritmos de gás de rede, Metrópole, Wolff e super-relaxação, tendo com objetivo reduzir o decaimento crítico lento e as correlações entre as configurações sucessivas. Também se empregou o método do histograma para obter as correspondentes temperaturas de transição. O modelo XY com diluição por sítios é estudado em redes cúbicas. Os expoentes críticos correspondentes estão na mesma classe de universalidade do modelo puro, concordando com o critério Harris. Foram obtidos bons ajustes no diagrama de fase experimental da temperatura crítica como função da diluição para dois cristais diferentes. Por outro lado, foi estudado o modelo XY-VBEG em rede quadrada, triangular e em filmes finos onde se analisou suas propriedades termodinâmicas como função da espessura do filme. Os filmes finos do modelo XY-VBEG apresentam transição BKT, transição de primeira ordem, ponto tricrítico, crítico terminal, BKT terminal e ponto crítico isolado, dependendo dos valores dos parâmetros do Hamiltoniano. Também foi estudada a coalescência dos pontos BKT terminal e pontos críticos isolados a um ponto tricrítico, em função da espessura do filme. A maioria dos resultados XY-VBEG são analisados como uma aplicação para misturas de ^3He - ^4He .

Abstract

The classical XY model, and an XY vectorial generalization of the Blume-Emery-Griffiths model (XY-VBEG), the latter one proposed by Berker and Nelson to describe the behavior of films of ^3He - ^4He mixtures, are studied by Monte Carlo simulations. The models are treated in two- and three-dimensions, where in the former lattice a Berezinski-Kosterlitz-Thouless (BKT) transition is observed. We also study the XY-VBEG model on thin films structure and analyze its properties as a function of the film thickness. We employ extensive Monte Carlo simulations consisting of hybrid algorithms combining lattice-gas, Metropolis, Wolff and super-relaxation procedures in order to overcome the critical slowing down and correlations among different configurations of the systems. We also employed single histograms methods to get the corresponding transition temperatures. The XY model is treated on a cubic lattice with quenched dilution. The corresponding critical exponents are in the same universality class as the pure model, in agreement with the Harris criterion. Some good fittings with experimental results for the critical temperature as a function of the dilution is obtained for two different crystals. On the other hand, thin films of the XY-VBEG model present a BKT transition, first-order transition as well tricritical, critical end, BKT end, and isolated critical points, depending on the values of the Hamiltonian parameters. The coalescence of the BKT end and the isolated critical points to a tricritical point, as a function of the film thickness, is also studied. Most of the XY-VBEG results are analyzed as an application to ^3He - ^4He mixtures.

1 Introdução

Há várias décadas, o estudo das transições de fases e fenômenos críticos desperta o interesse da comunidade científica em geral. Esse estudo permite compreender o comportamento de uma variedade de sistemas físicos, como a transição crítica líquido-gás, o hélio superfluido, supercondutores, sistemas ferromagnético-paramagnéticos, fluidos turbulentos, plasmas, polímeros, e até mesmo redes sociais, biológicas, entre outras. Perto da criticalidade, esses sistemas apresentam um comportamento tipo lei de potência de suas grandezas físicas relevantes, as quais caracterizam a sua universalidade. A classe de universalidade, por outro lado, independe da natureza das interações e de seus elementos constituintes, caracterizando-se apenas pelo alcance da interação, pela dimensão espacial do sistema e simetria do parâmetro de ordem. Para uma revisão detalhada dos fenômenos críticos, utilizando o emprego do esquema do grupo de renormalização, veja, por exemplo, entre outras, revisões hoje clássicas como de Fisher [1, 2] e Pelissetto [3], bem como as referências nelas citadas.

A título de exemplo, podemos considerar a classe de universalidade do chamado modelo XY tridimensional (o qual será discutido com mais detalhes a frente) que é caracterizado por interações de curto alcance, um parâmetro de ordem com duas componentes e simetria rotacional. O representante mais interessante dessa classe de universalidade, do ponto de vista experimental, é a transição do ^4He superfluido. Essa transição superfluida oferece um meio excepcional para testar, experimentalmente, com muito boa precisão, as previsões de grupo de renormalização com relação aos expoentes críticos. Isso devido, principalmente, à pureza das amostras e da possibilidade de se realizar experimentos em ambiente de microgravidade [4, 5]. Com a exploração das condições favoráveis dos laboratórios em centros de pesquisa, podemos citar como ilustração as experiências na superfície da Terra que resultaram em estimativas precisas do chamado expoente do comprimento de correlação $\nu = 0,6717(4)$ [6] e $\nu = 0,6705(6)$ [7] (esses expoentes serão definidos no próximo capítulo). Por outro lado, experiências em microgravidade possibilitaram obter o expoente do calor específico do ^4He a temperaturas reduzidas ainda menores, da ordem de 5×10^{-10} [4, 5], resultando num expoente para o calor específico $\alpha = -0,0127(3)$, e correspondente expoente $\nu = 0,6709(1)$. A temperatura reduzida acima

é definida como $|T - T_c|/T_c$, sendo T_c a temperatura crítica do sistema. Pode-se notar, nesse caso, uma precisão experimental invejável nessas grandezas críticas e a clara negatividade do expoente do calor específico. Para uma revisão recente e perspectivas de futuros experimentos na presença de microgravidade nas estações-espaciais, veja a referência [8]. Os resultados experimentais para os expoentes críticos acima estão de acordo com a previsão teórica mais precisa $\nu = 0,6717(1)$, obtido a partir de um combinado de Monte Carlo e estudo de séries de alta temperatura de modelos de spins em rede [9]. Para um resumo dos resultados teóricos obtidos com diferentes métodos (por exemplo, métodos de teoria de campo), veja [3].

Vale ressaltar que ao lado de ${}^4\text{He}$, existem muitos outros sistemas que se assemelham ao modelo XY. Cabe mencionar sistemas ferromagnéticos ou antiferromagnéticos com anisotropia plano de fácil [10], supercondutores a alta temperatura, supercondutores granulares [11], entre outros. Por outro lado, o modelo XY clássico é de grande interesse também por ser o modelo mais simples da mecânica estatística com graus de liberdade contínuo.

A discussão acima se refere a um sistema no limite termodinâmico. No entanto, o comportamento na transição é modificado pelo tamanho finito do sistema. Essa questão vem sendo abordada tanto experimental [12, 13, 14, 15] quanto teoricamente [16]. Em sistemas com extensão finita em todas as direções não pode haver qualquer singularidade nas grandezas termodinâmicas e, portanto, não há transição de fase. Por outro lado, se apenas alguma das direções permanecem finitas a situação é diferente. Por exemplo, no caso de uma geometria de filme fino, ou seja, com uma direção finita e duas infinitas, espera-se que o sistema se comporte efetivamente como bidimensional na vizinhança da transição. Um exemplo disso são os filmes de ${}^4\text{He}$, onde resultados teóricos e experimentais demonstram que o mesmo se apresenta na mesma classe de universalidade do modelo XY bidimensional, isto é, apresenta uma transição de fase do tipo Berezinsky-Kosterlitz-Thouless (BKT). Para uma visão geral ver [16, 17].

Além do tamanho finito do sistema, a desordem também pode alterar o comportamento crítico de um sistema na transição de fase [18, 19, 20]. Uma das formas de desordem mais estudadas são as diluições por sítio, que pode se distinguir em recozida (no inglês *annealed*) ou temperada (*quenched*) [21], a depender da distribuição das impurezas no sistema. Os sistemas com diluição temperada são fisicamente bastante diferentes do sistema com diluição recozida. Na diluição temperada, por exemplo, a concentração de íons magnéticos é um simples parâmetro e não uma variável termodinâmica. Já nos sistemas recozidos a concentração de íons magnéticos é uma densidade termodinâmica com um termo correspondente na energia livre do sistema. Do ponto de vista temperado, a impureza modifica a rede, enquanto na recozida ele está ocupando um sítio da rede. Pode-se ainda visualizar a desordem temperada como sendo aquela onde o

seu tempo de relaxação seja muito maior que o tempo de relaxação das grandezas térmicas, de modo que os graus de liberdade da desordem pode ser considerados "congelados". No caso recozido, esses graus de liberdade devem ser tratados concomitantemente com os térmicos.

Um exemplo de diluição recozida são misturas de ^3He - ^4He . Esse sistema apresenta um diagrama de fases bastante rico, uma vez que os átomos de ^3He comportam-se como impurezas que reduzem a temperatura crítica do sistema e induzem a separação de fase no mesmo [22]. Um modelo muito empregado no estudo de misturas de ^3He - ^4He , e que será tratado nesta pesquisa, é a versão XY do modelo Vetorial de Blume-Emery-Griffiths (XY-VBEG), que é uma extensão do modelo do rotor-planar originalmente proposto por Berker e Nelson [23] e, independentemente, por Cardy e Scalapino [24]. Esse é um modelo magnético capaz de reproduzir a topologia básica do diagrama de fase de misturas de ^3He - ^4He .

Misturas de ^3He - ^4He em geometrias confinadas, como em filmes finos, foram, e continuam sendo, objeto de muitos estudos experimentais [25, 26, 27, 28] e teóricos nos últimos anos [29, 30, 31, 32, 33]. Recentemente, Dilon e colaboradores apresentaram um estudo usando simulação Monte Carlo para o modelo vetorial Blume-Capel em numa rede quadrada. Esse é um caso particular do modelo de VBEG. Nesse trabalho, eles relataram a existência de um ponto tricrítico no diagrama de fase. Contudo, Berker e Nelson, usando renormalização Migdal Kadanoff, obtiveram para o mesmo modelo, numa rede triangular, um ponto BKT terminal (equivalente ao ponto crítico terminal, mas para um linha de transição BTK) e um ponto crítico isolado, muito próximos um do outro, ao qual eles chamaram de ponto tricrítico efetivo. O fato de eles terem estudado os sistemas em redes diferentes não justifica a diferença no resultado, pois Cardy e Scalapino apresentaram um resultado similar ao de Berker e Nelson usando rede quadrada. O ponto tricrítico relatado por Dilon e colaboradores, por outro lado, apresenta pouca precisão, por isso há possibilidade de existir um ponto crítico isolado e um ponto BKT terminal dentro do intervalo de precisão. O estudo desse ponto tricrítico efetivo usando simulação Monte Carlo foi uns dos pontos de estudo do presente trabalho. Foram simulados filmes em redes triangular e quadrada, visando estudar o diagrama de fase e as correspondentes quantidades universais do modelo XY-VBEG.

Além de filmes ultrafinos, neste trabalho foram investigados filmes multicamadas do modelo XY-VBEG. Filmes multicamadas do modelo Rotor Planar foram estudados por Schultka e Manousakis [34]. Seus estudos mostraram que a densidade superfluida varia ao longo das camadas tornando-se mais intensa nas camadas mais internas. Esse efeito ocorre devido à condição de contorno livre nas superfícies do filme. De forma semelhante, é esperado que a concentração de partículas magnéticas apresente variações entre as camadas.

O estudo em filmes multicamadas foi realizado também com o intuito de analisar a transição do sistema bidimensional para o sistema tridimensional. Sabe-se que o modelo XY-VBEG em três dimensões pode apresentar, no diagrama de transição de fase, um ponto tricrítico ou um ponto crítico terminal e um ponto crítico isolado, a depender dos parâmetros do Hamiltoniano [35]. No entanto, parâmetros que no sistema tridimensional resultam num ponto tricrítico, no sistema bidimensional resultam em um ponto BKT terminal e um ponto crítico isolado. Dessa forma, o estudo com filmes ajudará a compreender como o ponto BKT terminal e crítico isolado, no sistema bidimensional, tendem a coalescer num ponto tricrítico no sistema tridimensional.

Como mencionado acima, o comportamento de sistemas magnéticos com diluição temperada são também de grande interesse, tanto teórico como experimental. Um exemplo típico é obtido pela mistura de materiais ferromagnéticos ou antiferromagnéticos com impurezas não-magnéticas. Para lembrar, na diluição temperada, assume-se que o tempo de relaxação associado com a difusão das impurezas é muito maior que todas as outras escalas de tempo envolvidas no sistema. Em outras palavras, considera-se a posição das impurezas fixas, ao contrário do que ocorre com a diluição recozida, onde as impurezas estão livres para se mover na rede.

Recentemente, trabalhos utilizando técnicas de aproximações analíticas [36] e simulações Monte Carlo [37, 38, 39, 40] foram realizados no estudo dos efeitos de impurezas não magnéticas temperadas nas propriedades do modelo XY bidimensional. Os resultados obtidos com relação a transição Berezinski–Kosterlitz–Thouless concordam com o previsto na literatura [41]. Para o modelo XY tridimensional com diluição por sítios, contudo, simulação Monte Carlo e aproximações analíticas são menos ubíquas. Mais recentemente, DeFotis e colaboradores [42] estudaram experimentalmente o isolante tridimensional $\text{Fe}[\text{DSC}]_2\text{Cl}$, um ferromagneto molecular de ferro (III) pentacoordenado. Esse pode ser o único sistema a exibir comportamento XY ferromagnético. Eles estudaram a dependência da temperatura de ordenamento magnético com a diluição e encontraram um valor pequeno para a inclinação inicial da temperatura crítica com a diluição, em desacordo com as expectativas teóricas obtidas por métodos de aproximações analíticas [43, 44].

Nesse trabalho, então, desenvolveu-se um estudo das propriedades críticas do modelo XY tridimensional com diluição por sítios do tipo temperada, que corresponde ao mais próximo da situação experimental reportada na Referência [42]. No estudo do modelo XY com diluição temperada teve-se dois propósitos. Primeiro, foi estudar a temperatura de transição para baixa concentração de impurezas e comparar a inclinação inicial da temperatura com a diluição com os recentes resultados experimentais. A segunda, foi estudar a classe de universalidade do modelo diluído, uma vez que o expoente do calor específico do sistema puro é muito pequeno (mas

negativo). Por exemplo, no modelo de Ising bidimensional, onde $\alpha = 0$, o critério de Harris é inconclusivo. Neste caso, o cenário atual é da *universalidade forte*, uma vez que simulações Monte Carlo indicam os mesmos expoentes para o sistema diluído [45, 46, 47, 48]. Por outro lado, Reeve e Betts [43] estudaram o modelo XY tridimensional com diluição por sítios usando técnicas analíticas e relataram uma dependência do expoente da susceptibilidade com a diluição, resultado esse que eles afirmaram não ser conclusivo. Dessa forma, é importante obter diretamente o expoente do calor específico do sistema diluído a fim de checar a irrelevância desta perturbação no modelo XY.

O trabalho será apresentado da seguinte forma: no segundo capítulo, apresenta-se uma revisão dos conceitos, técnicas simulacionais e técnicas de análise de dados necessárias para a compreensão do trabalho; os resultados referentes ao modelo XY com diluição temperada são apresentados no terceiro capítulo; no quarto capítulo, são apresentados os resultados referentes ao Modelo XY-VBEG em filmes ultrafinos; no quinto capítulo são apresentados os resultados do modelo XY-VBEG em filmes multicamadas e, finalmente, no capítulo sexto, são apresentadas as conclusões e expectativas futuras.

2 Considerações Gerais

Neste capítulo são apresentados uma breve discussão sobre os modelos utilizados, os aspectos fundamentais das transições de fases e fenômenos críticos envolvidos nos mesmos. Serão apresentados os fundamentos teóricos, bem como, as técnicas simulacionais e técnicas de análise de dados que serviram de base para o desenvolvimento deste trabalho.

2.1 Transição de fase

Na transição de fase há uma alteração nas propriedades do material, que em geral se manifesta por uma série de eventos associados. Algumas transições são caracterizadas pelo calor latente e pela descontinuidade das variáveis de estados extensivas que caracterizam cada fase, mas há transições em que não há calor latente ou descontinuidade dessas variáveis de estado.

As características das transições de fase podem diferir muito, por isso um critério de classificação, baseado nos potenciais termodinâmicos, foi proposto por Ehrenfest e estendido posteriormente por Fisher (veja, por exemplo, Stanley [49]). Neste sistema, as transições são classificadas de acordo com as propriedades das derivadas da correspondente energia livre. Assim, transições acompanhadas de descontinuidade em quantidades que são derivadas de primeira ordem dos potenciais termodinâmicos são classificadas como transição de primeira ordem. São consideradas transições de fase de segunda ordem quando os potenciais termodinâmicos e suas primeiras derivadas são contínuas, mas suas segundas derivadas são nulas ou tendem a infinito. Transição de segunda ordem ou ordem superior não apresenta calor latente e as fases são indistinguíveis no ponto crítico, sendo também chamadas de transições de fases contínuas.

A transição de segunda ordem é acompanhada por uma mudança ou quebra de simetria do sistema, que está associada a um parâmetro de ordem. O conceito de parâmetro de ordem foi introduzido por Landau em 1935 [49, 50]. Esse parâmetro, em geral, é uma quantidade termodinâmica de caráter extensivo, sendo zero na fase mais simétrica (desordenada) e diferente de zero na fase menos simétrica (ordenada). No modelo XY, por exemplo, o parâmetro de ordem é a magnetização no plano como descrito na próxima seção.

No ponto crítico, várias grandezas termodinâmicas apresentam comportamento peculiar, como uma divergência apresentada no calor específico e na susceptibilidade magnética. O estudo do comportamento de sistemas quando a temperatura T tende à temperatura crítica T_c , com a determinação de seu comportamento na vizinhança da criticalidade, é um dos objetos primordiais de investigação no estudo de fenômenos críticos. Observações experimentais, soluções analíticas de alguns modelos e o emprego da técnica do grupo de renormalização mostram que, quando $T \rightarrow T_c$, esse comportamento pode ser descrito por leis de potência simples, caracterizadas pelos chamados expoentes críticos. Por exemplo, para um sistema magnético, que é o objeto de nosso estudo, o parâmetro de ordem m , a susceptibilidade magnética χ , o calor

específico c e o comprimento de correlação ξ comportam-se, respectivamente, como

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

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

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

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

$$(2.5)$$

onde t é a temperatura reduzida, definida por $t = (T - T_c)/T_c$, m_0 , χ_0 , c_0 , ξ_0 são constantes, e β , γ , α , ν são os correspondes expoentes críticos.

Um fato muito interessante e de fundamental importância é que sistemas distintos podem apresentar os mesmos valores para os expoentes críticos, definindo então as chamadas classes de universalidade. Por exemplo, o modelo XY de spin-1/2 pertence à mesma classe de universalidade do modelo rotor planar e do modelo XY clássico, visto que a classe de universalidade independe do spin, dependendo apenas da dimensão espacial do sistema, das simetrias do parâmetro de ordem, e do alcance das ligações. Sistemas desordenados, por outro lado, podem mudar de classe de universalidades com a desordem. Esse problema em especial será apresentado em mais detalhes na próxima seção.

Sistemas pertencentes à mesma classe de universalidade apresentam, além dos mesmos expoentes críticos, funções universais, isto é, funções, para diferentes sistemas, que podem ser superpostas por um simples reescalamiento de variáveis. Esse fato foi relatado pela primeira vez por Guggenheim, que observou que as curvas de coexistência para diferentes fluidos recaem na mesma função universal quando a temperatura e a densidade são escaladas por seus respectivos valores críticos T_c e P_c , sendo P_c a pressão crítica [49].

2.2 Modelo XY

O modelo XY pode ser visto como um modelo de Heisenberg com uma anisotropia de plano fácil, sendo seu hamiltoniano de interação dado pela equação

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \left(S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y \right), \quad (2.6)$$

onde S_i^Λ , com $\Lambda = x, y, z$, são as componentes do operador de spin, os índices i e j representam os sítios ou vértices da rede, J é a constante de interação de troca que possui dimensão de energia, e o somatório é executado sobre todos os pares de vizinhos mais próximos da rede. Para o

caso particular de spin-1/2, as componentes S_i são dadas pelas matrizes de Pauli e obtém-se, nesse caso, um dos modelos quânticos de muitos corpos mais simples. Como a magnetização no plano XY, que é o parâmetro de ordem desse modelo, não comuta com o hamiltoniano, esse apresenta propriedades quânticas completas e uma dependência temporal intrínseca, o que não acontece no modelo de Ising.

O modelo XY de spin-1/2 foi introduzido por Matsubara e Matsuda [51] como um modelo de rede para o Hélio líquido [^4He], considerando um potencial molecular do tipo “caroço duro”. Matsubara e Matsuda mostraram também que mesmo usando aproximação de campo molecular, o modelo XY é mais eficiente, em muitos aspectos, que o emprego do gás ideal de Bose na previsão das propriedades da transição de fase superfluido-líquido normal do ^4He .

O modelo XY também é um modelo razoável para descrever uma classe de materiais magnéticos [41, 52, 53], geralmente compostos isolantes, ferromagnéticos ou antiferromagnéticos, de íons Terras Raras de elevado momento angular total (neste contexto chamados simplesmente de “spin”). Exemplos de íons e seus correspondentes spins incluem Gd^{3+} (7/2), Dy^{3+} (15/2), Er^{3+} (15/2).

Quando o sistema é composto por spins com elevados números quânticos (maiores que 5/2, por exemplo) pode-se fazer uma aproximação clássica supondo que o spin tenda a infinito na Eq. (2.6), podendo-se então desprezar o princípio da incerteza, ou seja, supõe-se conhecer as três componentes de spin simultaneamente. Considerando spins com apenas duas componentes, obtém-se o Hamiltoniano do modelo chamado rotor planar, pois os estados nos quais os spins estão numa direção muito próximos ao plano XY são altamente favorecidos.

O operador natural do parâmetro de ordem do modelo XY é a magnetização no plano M_{xy}

$$M_{xy} = M^x \mathbf{i} + M^y \mathbf{j}, \quad (2.7)$$

onde

$$M^x = \sum_i S_i^x, \quad M^y = \sum_i S_i^y. \quad (2.8)$$

Numa rede tridimensional, o modelo XY, assim como o modelo de Ising e de Heisenberg, apresenta uma transição de fase crítica numa temperatura finita. Em duas dimensões espaciais, no entanto, o teorema de Mermin-Wagner [54] mostra que simetrias contínuas não podem ser quebradas espontaneamente em nenhuma temperatura finita. Dessa forma, o modelo XY em redes bidimensionais infinitas tem seu parâmetro de ordem nulo para qualquer temperatura finita, ou seja, não apresenta ordem de longo alcance. Contudo, apesar do modelo XY não apresentar ordem de longo alcance, Kosterlitz e Thouless [55], e independentemente Berenzinskii

[56], analisando o comportamento da função de correlação para altas e para baixas temperaturas perceberam que a uma determinada temperatura haveria um transição de fase. Uma das interpretações para essa transição está na existência de excitações topológicas estáveis formada por pares de vórtices antivórtices que na temperatura de transição sofrem uma desvinculação dos pares. Os pares podem ser observados na Figura 2.1 gerada pelo programa STP XYModel [57]. Essa transição, conhecida como Berenzinskii-Kosterlitz-Thouless (BKT), é uma transição de ordem infinita entre um estado de ordem topológica para um estado de desordem

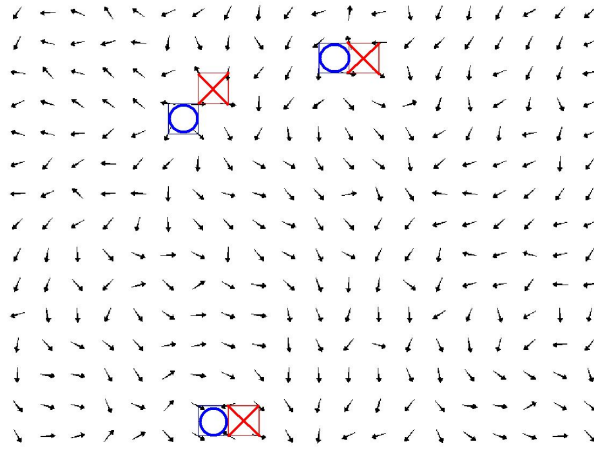


Figura 2.1: Vórtices (centro marcado com um círculo) e antivórtices (centro marcado com um X) no modelo XY (ilustração gerada pelo programa STP XYModel [57].)

A transição BKT apresenta propriedades muito distintas das transições de segunda ou primeira ordem. Na temperatura de transição BKT (T_{BKT}), o comprimento de correlação e a susceptibilidade no plano divergem exponencialmente com T_{BKT} com uma lei dada pela equação

$$\xi \sim a_\xi e^{b_\xi(T-T_{BKT})^{-\frac{1}{2}}}, \quad (2.9)$$

$$\chi \sim a_\chi e^{b_\chi(T-T_{BKT})^{-\frac{1}{2}}}, \quad (2.10)$$

e permanece infinita para $T < T_{BKT}$. Nas equações acima a_ξ , b_ξ , a_χ , b_χ são constantes. Dessa forma, tem-se uma linha contínua de pontos de transição para temperaturas abaixo da temperatura BKT.

A função de correlação das flutuações das componentes de spin no plano decai exponencialmente acima de T_{BKT} e a baixo de T_{BKT} decai com uma lei de potência expressas, respectivamente, por

$$\langle \mathbf{s}_i^x \mathbf{s}_{i+r}^x + \mathbf{s}_i^y \mathbf{s}_{i+r}^y \rangle \sim e^{-\frac{r}{\xi}}, \quad (2.11)$$

$$\langle \mathbf{s}_i^x \mathbf{s}_{i+r}^x + \mathbf{s}_i^y \mathbf{s}_{i+r}^y \rangle \sim \frac{1}{r^\eta}. \quad (2.12)$$

O expoente η é definido na Eq. (2.12). Ele é uma função da temperatura e varia de 0 ($T = 0$) a $1/4$ ($T = T_{BKT}$). Uma outra propriedade da transição BKT é o comportamento do calor específico como função da temperatura. Em contraste com a transição de fase de segunda ordem, essa função não apresenta divergência na temperatura de transição, mas apenas um máximo que está localizado levemente acima dessa temperatura, como mostrado na Figura 2.2.

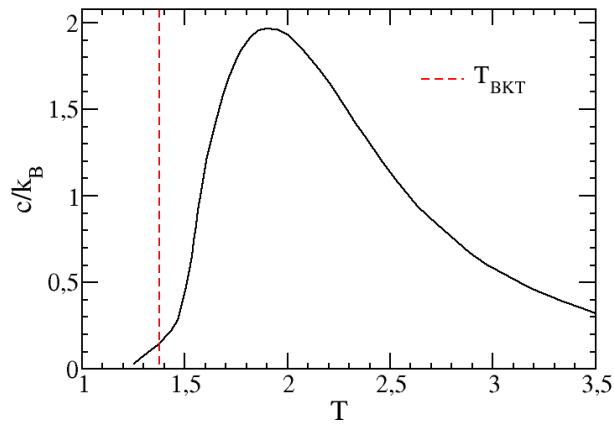


Figura 2.2: Calor específico do modelo XY bidimensional numa rede triangular, a linha tracejada marca a temperatura de transição BKT [23].

Uma quantidade termodinâmica muito empregada no estudo do modelo XY é o módulo da helicidade Υ . Esta quantidade é utilizada principalmente para obter a temperatura de transição BKT do sistema, visto que na temperatura de transição o módulo da helicidade apresenta um salto de $2T/\pi$ a 0. O módulo da helicidade foi introduzido por Fisher, Barber, and Jasnow [58] afim de definir o comprimento de coerência de um superfluido de ^4He . O módulo da helicidade descreve a resistência do sistema a um giro das componentes planares de spin numa determinada direção. Dentro do formalismo do modelo XY essa é a quantidade física que corresponde à densidade superfluida. O módulo de helicidade, também conhecido como *stiffness*, é expresso como

$$\Upsilon = \left. \frac{\partial^2 F}{\partial \delta^2} \right|_{\delta=0}, \quad (2.13)$$

onde $F = -k_B T \ln Z$ é a energia livre do sistema e δ é um pequeno giro em uma direção. Desenvolvendo a Eq. (2.13), chega-se a

$$\Upsilon = \left\langle \left. \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial \delta^2} \right|_{\delta=0} \right\rangle - \frac{1}{k_B T} \left\langle \left. \left(\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \delta} \right)^2 \right|_{\delta=0} \right\rangle - \frac{1}{k_B T} \left\langle \left. \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \delta} \right|_{\delta=0} \right\rangle^2, \quad (2.14)$$

onde \mathcal{H} é o hamiltoniano do sistema.

2.3 Impurezas ou defeitos nos modelos magnéticos

Durante muitos anos, os estudos realizados para tratar os materiais encontrados na natureza utilizavam-se de modelos homogêneos, com estrutura perfeita e íntegra simetria translacional. Entretanto, materiais reais inevitavelmente apresentam defeitos, impurezas ou estados de não-equilíbrio. Quando defeitos e impurezas nos materiais podem ser precisamente controlados, o efeito da mesma na criticalidade é uma importante área de estudo e constituem-se um ativo e moderno campo da física teórica e experimental.

Os sistemas desordenados são divididos em duas grandes categorias, dependendo de como os centros atômicos se distribuem. Quando os centros atômicos se localizam em pontos de uma rede com estrutura periódica variando aleatoriamente apenas os valores de spin, trata-se de um caso de desordem do tipo substitucional ou composicional [19]. Exemplos desta categoria de desordem são as ligas, os cristais mistos e os vidros metálicos. A outra situação é aquela onde os centros atômicos são distribuídos sem qualquer arranjo espacial específico. Quando isto ocorre, a desordem é denominada estrutural ou posicional, sendo muito mais difícil de tratar do que a desordem substitucional, e não será aqui considerada. Incluem-se nessa classe de desordem os sólidos amorfos e os metais líquidos.

Dependendo da existência ou não de correlação entre as impurezas, os sistemas desordenados podem ser classificados como recozidos (*annealed*) ou temperados (*quenched*). O modelo é definido como recozido quando a distribuição das impurezas sobre os sítios da rede está em equilíbrio térmico. Nesse caso, geralmente a distribuição de ocupação dos sítios é tal que minimiza a energia livre e, portanto, as correlações entre os constituintes não permitem uma distribuição completamente aleatória. Um exemplo é o problema de mistura de ^3He - ^4He o que é equivalente ao modelo XY com diluição *annealed*. O interesse nesse tipo de diluição é estimulado pela probabilidade da existência de ponto tricrítico ou crítico terminal, abaixo do qual um tipo de separação de fase ocorre.

No modelo temperado, por outro lado, os átomos magnéticos situam-se aleatoriamente nos sítios de uma dada rede cristalina onde, estatisticamente, a probabilidade de ocupação de um dado sítio por um íon independe da ocupação dos demais sítios. Um exemplo ocorre em sólidos, onde a escala de tempo da mobilidade das impurezas é muito maior que as escalas de tempo envolvidas no problema da dinâmica dos spins.

A determinação das quantidades termodinâmicas desses modelos requer a avaliação da

média da energia livre do sistema. No sistema recozido a média é determinada simultaneamente sobre todas as possíveis configurações de spin e de impurezas. Os sistemas que contêm impurezas temperadas não são estritamente sistemas em equilíbrio e não podem ser tratados da mesma maneira [59, 60]. No sistema temperado a função de partição depende da distribuição das impurezas. Contudo, no limite termodinâmico, pode-se imaginar o sistema subdividido em muitos subsistemas que são grandes microscopicamente. Cada subsistema apresenta diferentes distribuições de impurezas ε , que se pode conceber como parte de um ensemble que apresenta uma distribuição de probabilidade $P(\varepsilon)$. Como a energia livre total do sistema é a soma da energia livre de cada subsistema, tem-se que a energia livre por sítio pode ser dada como a média neste ensemble

$$\bar{F} = Tr_{\varepsilon} P(\varepsilon) F(\varepsilon). \quad (2.15)$$

A presença de impureza não magnética em um sistema magnético, tanto na forma temperada quanto na recozida, tende a diminuir a temperatura de transição do mesmo. Acima de certas concentrações de impurezas o sistema torna-se desordenado mesmo a temperatura nula, essa concentração p_c é denominada concentração crítica ou concentração de percolação. Uma importante questão estudada nos sistemas desordenados é quanto à sua classe de universalidade. Alguns sistemas passam para uma nova classe de universalidade com a inserção de impurezas, na linguagem do grupo de renormalização, é dito que as impurezas são relevantes no ponto crítico do sistema. Um critério proposto por Harris estabelece uma relação entre o expoente crítico do calor específico α do sistema puro e a relevância de impurezas na classe de universalidade do sistema. Segundo esse critério [61], quando $\alpha > 0$ as impurezas são relevantes e o sistema apresenta uma nova classe de universalidade, caso contrário os expoentes são os mesmos. O critério de Harris tem sido confirmado experimental e teoricamente em vários modelos por diferentes técnicas.

2.4 O hélio e o modelo Vetorial Blume-Emery-Griffiths

O hélio é o segundo elemento mais abundante no universo depois do hidrogênio, sendo raro na Terra porque seus átomos são tão leves que a velocidade térmica na alta atmosfera é superior à velocidade de escape e uma grande proporção deles foge da atmosfera. Na natureza, há dois isótopos distintos do hélio, o ^3He e o ^4He . O mais abundante ^4He , possui um núcleo formado por dois prótons e dois nêutrons, e o menos abundante ^3He possui um núcleo com dois prótons e apenas um nêutron.

Quando se resfria o ^4He a temperaturas abaixo de 2,172 K, este sofre uma transição para

uma fase superfluida. O termo superfluido foi cunhado por Pyotr Kapitza em 1938, devido ao comportamento hidrodinâmico singular do ^4He a baixas temperaturas. A superfluidez do ^4He foi explicada posteriormente pelo físico teórico Lev Landau como uma manifestação de um processo conhecido como condensação de Bose-Einstein. O ponto de transição de fase do hélio líquido normal para superfluido ficou conhecido como ponto λ , isto devido ao formato da curva do calor específico como função da temperatura, que na transição lembra a letra grega.

No caso do isótopo ^3He , a superfluidez só foi comprovada no início da década de 70 com uma temperatura de transição do líquido normal para superfluido muito mais baixa do que a do ^4He ($\sim 2,7$ mK). A descoberta valeu o Prêmio Nobel a Douglas Osheroff, David Lee e Robert Richardson. Apesar de isótopos, os efeitos quânticos se manifestam de forma distintas nos líquidos ^3He e ^4He , uma vez que os átomos de ^3He são férmions, enquanto ^4He são bósons. Por isso a superfluidez do líquido ^3He só pôde ser explicada pelo trabalho de Anthony Leggett em 1972 [62].

Uma vez que a temperatura de transição do ^3He é cerca de mil vez menor que a do ^4He , em sistema de misturas de ^3He - ^4He , átomos de ^3He comportam-se como impurezas, que reduzem a temperatura da transição superfluida e induzem a separação de fases no sistema. No diagrama de transição de fase a linha de transição *lambda* de segunda ordem termina em uma linha de coexistência de fases, ou de primeira ordem, que separa uma fase pobre em ^3He para uma fase rica em ^3He . Esse comportamento, apresentado na Figura 2.3, foi obtido experimentalmente por Roberts e Sydorik em 1960 [63] e Graf e colaboradores em 1967 [64].

Em 1971, Blume, Emery e Griffiths [65] propuseram um modelo de spins discretos capaz de reproduzir a topologia básica do diagrama de fases de misturas de ^3He - ^4He . Nesse modelo, conhecido como modelo de BEG, cada sítio i da rede possui uma variável de spin S que pode tomar valores $-1, 0, +1$. Como o ^3He é um férmion ele será representado pela variável de spin $S = 0$. Dessa forma, o ^3He se comporta como uma impureza, reduzindo o valor da temperatura crítica do sistema.

O parâmetro de ordem deste modelo é a média das variáveis de spin $\langle S \rangle$. Este é um parâmetro de ordem semelhante ao do modelo de Ising. Como S^2 pode ser zero ou um, $\langle S^2 \rangle$ é interpretado como a densidade de átomos de ^4He e $1 - \langle S^2 \rangle$ com a densidade de átomos de ^3He . O Hamiltoniano do modelo BEG é dado pela equação

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j - K \sum_{\langle ij \rangle} S_i^2 S_j^2 + \Delta \sum_i S_i^2, \quad (2.16)$$

onde J é a interação de exchange bilinear, K é a interação biquadrática, Δ o termo de anisotropia cristalina e $S_i = -1, 0, +1$. Embora o modelo de BEG acima, resolvido pela aproximação de

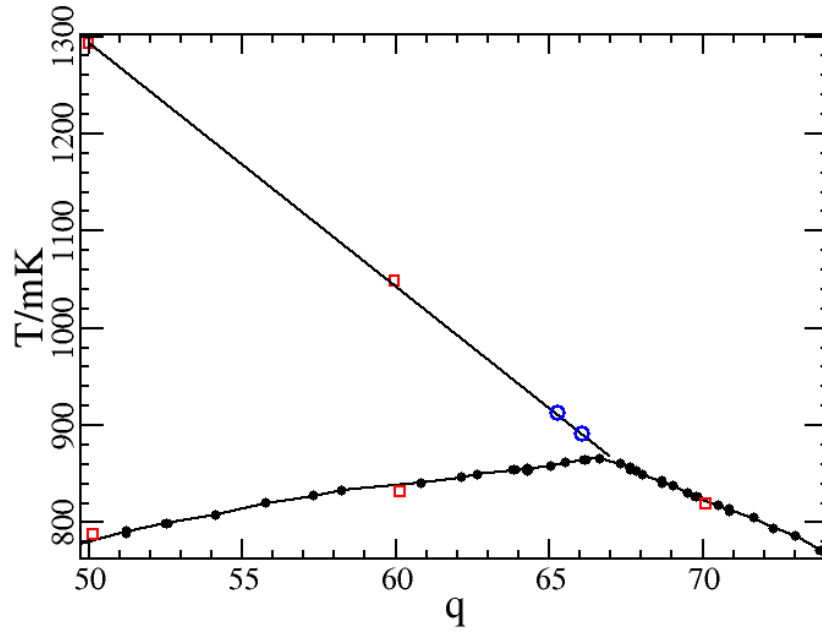


Figura 2.3: Diagrama de transição de fase experimental de misturas de ^3He - ^4He retirado da referência [64], onde q é a concentração de ^3He . Os círculos cheios são os pontos de separação de fase obtidos de dados da constante dielétrica. Os círculos abertos são temperatura de transição T_λ , os quadrados são resultados da referência [63] obtidos com base na atenuação do terceiro som.

campo médio, tenha reproduzido qualitativamente o diagrama de fases experimental para uma faixa de valores dos parâmetros do hamiltoniano, ele apresenta certas características não físicas, como não considerar a simetria rotacional do parâmetro de ordem do hélio superfluido (a função de onda associada a superfluidez).

Devido ao problema de simetria do modelo BEG, Berker e Nelson [23] e, independentemente, Cardy e Scalapino [24], propuseram um modelo baseado no rotor planar para descrever o comportamento de filmes de misturas de ^3He - ^4He , conhecido como o modelo vetorial de Blume-Emery-Griffiths (Rotor-VBEG). Um modelo mais geral, que pode ser dado por

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y) - K \sum_{\langle ij \rangle} \mathbf{S}_i^2 \mathbf{S}_j^2 + \Delta \sum_i \mathbf{S}_i^2, \quad (2.17)$$

onde \mathbf{S}_i são vetores clássicos, cujo módulo pode assumir valores $|\mathbf{S}_i| = 0$, se houver um átomo de ^3He ou $|\mathbf{S}_i| = 1$, se houver um átomo de ^4He . O diagrama de fases do modelo Rotor-VBEG foi investigado em duas dimensões usando grupo de renormalização de Migdal-Kadanoff e não se encontrou um ponto tricrítico para nenhum valor dos parâmetros do modelo.

O modelo XY-VBEG difere do Rotor-VBEG por apresentar spins tridimensionais que podem flutuar também fora do plano XY. Apesar de o Hamiltoniano ter a mesma forma do Rotor-

VBEG, o espaço de fase associado a ambos difere, e dessa forma é esperado diferenças em suas propriedades termodinâmicas. Ambos não visam uma modelagem quantitativa fiel do diagrama de fase experimental do ^3He - ^4He . Em vez disso, busca-se capturar as características físicas e topológicas essenciais do problema, ou seja, a separação de fases em conjunto com a formação de uma fase superfluida. Entre outras coisas, isto significa que o modelo descrito acima não captura, por exemplo, a miscibilidade finita de ^3He em ^4He de cerca de 6% a temperaturas muito baixas, onde o ^3He em solução se comporta como um líquido de Fermi e, portanto, exigiria um tratamento totalmente quântico [66]. Esse último aspecto, no entanto, não tem implicações físicas importantes para o comportamento do sistema próximo ao ponto de transição, que é o foco principal do presente trabalho.

2.5 Simulação Monte Carlo

Simulações de Monte Carlo são amplamente empregadas no estudo quantitativo de transições de fases. Em sistemas magnéticos, bem como em outros sistemas com interações de curto alcance, é empregada a técnica de amostragem por importância, onde somente as configurações mais importantes são geradas na simulação. O algoritmo deve ser ergódico e satisfazer a regra do balanço detalhado para que o equilíbrio seja atingido com a distribuição conhecida de Boltzmann. Um algoritmo muito utilizado que satisfaz essas duas exigências é o chamado algoritmo de Metropolis. Entretanto, essa técnica sofre de alguns problemas, como a relaxação crítica, onde o sistema demora um tempo muito grande para atingir o equilíbrio à medida que as redes se tornam maiores. Algoritmos híbridos foram então propostos para se evitar essa inconveniência e reduzir o tempo de simulação. Portanto, para estudar as propriedades estáticas do modelo apresentado empregaremos um algoritmo híbrido que consta de quatro algoritmos de Monte Carlo. Estes algoritmos são: o algoritmo de gás de rede, o de Metropolis, o de Wolff e o de superrelaxação, que serão discutidos brevemente abaixo. Para uma revisão detalhada das técnicas de simulação, veja, por exemplo a referências [67] e [68].

2.5.1 Gás de Rede

O algoritmo de gás de rede possibilita a análise da separação de fases. Esse algoritmo é um procedimento simples utilizado para produzir um gás de rede que seja uma mistura de partículas de ^3He - ^4He , inserindo partículas magnéticas (spin clássico unitário, representando o ^4He) ou não-magnéticas (de spin nulo, representando o ^3He). Esse algoritmo é implementado selecionando-se aleatoriamente um sítio na rede e tentando-se inserir uma partícula

magnética em um sítio onde uma partícula não-magnética esteja localizada e vice-versa. Qualquer partícula magnética inserida por esse procedimento apresenta spin de orientação aleatória, definida pela prescrição de Marsaglia [68, 69] que seleciona um ponto sobre a superfície da esfera unitária com distribuição de probabilidade uniforme. Essa prescrição consiste em gerar um número aleatório no intervalo $(-1, 1)$ que representará a componente z do spin. O plano perpendicular ao eixo z que intercepta o ponto sorteado, seccionará a esfera unitária definindo uma circunferência de raio $r = (1 - z^2)^{1/2}$. Sorteia-se então um número entre $(-r, r)$, que definirá a posição do ponto na circunferência. Estabelecida a direção do spin calcula-se a variação de energia ΔE e a probabilidade de aceitação da nova configuração é definida pelo chamado banho térmico local [70] dada pela Eq. (2.18) abaixo,

$$P(\Delta E) = \frac{1}{\exp\left(\frac{\Delta E}{k_B T}\right)} \quad (2.18)$$

2.5.2 Metropolis

No método de Metropolis (o primeiro e mais frequentemente utilizado em simulações Monte Carlo) geram-se configurações sucessivas partindo de um estado inicial qualquer. Para isso, usa-se uma probabilidade de transição que depende da diferença de energias entre o estado atual e o próximo estado. Essa probabilidade pode ser dada também pelo banho térmico da Eq. (2.18). A sucessão de estados produzidos segue um caminho ordenado de tempo, sendo que neste caso o tempo é chamado de tempo de Monte Carlo e não é um tempo determinístico, ele é medido em Passos de Monte Carlo (MCS). Durante os primeiros passos de Monte Carlo o sistema está relaxando para o equilíbrio e a energia interna e o parâmetro de ordem mudam, mas com escalas de tempo diferentes. Depois de certo número de passos de Monte Carlo o sistema atinge o equilíbrio e as propriedades então só apresentam flutuações termodinâmicas em torno de sua média. O número de passos para se atingir o equilíbrio dependerá de muitos fatores, como do modelo, temperatura, tamanho de rede, condições de contorno, etc. O número de passos de Monte Carlo necessário para o sistema relaxar, também conhecido como tempo de termalização, deve ser muito maior que o tempo de correlação do sistema. Esse último, por sua vez, diverge na transição de fases de acordo com $\tau \propto L^z$, onde z é o expoente dinâmico crítico e L o tamanho do sistema. Quanto menor o valor de z menor será a influência do tamanho do sistema no tempo de simulação. Esse problema é conhecido como efeito “dinâmica crítica lenta” [68]. O algoritmo de Metropolis apresenta um expoente $z \approx 1$ para sistemas em três dimensões.

2.5.3 Wolff

Usando as idéias da teoria de percolação [71] Swendsen-Wang apresentaram em 1987 [72] um novo algoritmo aplicado ao modelo de Potts, que diferentemente do Metropolis atualiza os spins em clusters. O algoritmo de aglomerados (*cluster*) de Swendsen-Wang foi o primeiro algoritmo a reduzir significativamente o problema do decaimento crítico lento. Posteriormente, Ulli Wolff [73] aprimorou este algoritmo e conseguiu um expoente $z \sim 0$.

Wolff também generalizou a operação de *spin-flip*, definindo essa operação como uma reflexão num hiperplano ortogonal a uma direção n

$$R(n)\sigma_x = \sigma_x - 2(\sigma_x \cdot n) \cdot n. \quad (2.19)$$

Essa generalização facilitou sua aplicação a sistema de spins contínuos. O algoritmo de cluster de Wolff baseia-se então em identificar aglomerados de spins com relação a uma direção aleatória v partindo de um sitio escolhido aleatoriamente na rede (semente do cluster) e reorientá-los todos em torno do plano ortogonal a essa direção, como um único bloco, de uma só vez, com probabilidade 1. Para manter a condição de balanço detalhado a probabilidade de um sitio σ_x ser adicionado ao cluster através de uma ligação com o spin σ_y é dada pela equação

$$P(\sigma_x, \sigma_y) = 1 - \exp(\min\{0, \beta \sigma_x [1 - R(v)] \sigma_y\}). \quad (2.20)$$

Como no algoritmo de Wolff uma grande fração de spins é reorientada de uma só vez, isso reduz de maneira muito eficiente a correlação entre configurações sucessivas durante as simulações Monte Carlo.

No modelo XY, no entanto, para manter a condição de balanço detalhado o vetor v deve estar no plano XY. Essa condição torna o algoritmo de Wolff não-ergódico para o modelo XY, pois este não pode levar o sistema a percorrer todas as configurações do espaço de fase, visto que o algoritmo mantém inalterada a componente z do sistema. Assim, nesse trabalho, o algoritmo de Wolff será combinado com outros algoritmos utilizando-se o método Monte Carlo híbrido [74], a fim de reduzir de maneira eficiente as correlações entre as configurações sucessivas e recuperar a ergodicidade.

2.5.4 Superrelaxação

Um outro método eficiente para reduzir a correlação entre configurações sucessivas é a superrelaxação [75, 76]. O mecanismo envolvido neste método consiste em encontrar o campo

efetivo a que um determinado sítio k está submetido. Como a energia do sítio k é dada por um produto escalar entre o spin e seu campo efetivo, uma rotação do spin em torno do campo efetivo altera a configuração da rede, mas conserva a energia do sistema. Assim, a implementação do método de super-relaxação é bem simples. Basta percorrer os sítios da rede, determinar o campo efetivo para o spin considerado e trocar o sinal da componente desse spin perpendicular ao campo efetivo (o que equivale a uma rotação de π). Para o modelo vetorial de Blume-Emery-Griffiths, versão XY, como no termo de interação de troca somente entram as componentes planares dos vetores de spin, a rotação efetuada deve manter inalterada a componente z (fora do plano) dos spins, de modo a conservar a energia da configuração. Isso é conseguido rodando-se somente a componente planar do spin considerado em torno da componente planar do campo efetivo.

2.6 Método do histograma

2.6.1 Método do histograma Simples

O método do histograma é uma das técnicas de análise de dados mais utilizada em conjunto com a simulação computacional. Esta técnica permite extrapolar os resultados da simulação computacional realizada em uma determinada temperatura T_0 a uma faixa de temperatura em torno de T_0 . Isto permite obter, com eficiência, propriedades estatísticas com grande precisão e economia de tempo computacional, visto que o tempo gasto pelo método é muito inferior ao de se realizar a simulação em diferentes temperaturas. O método do histograma é baseado na idéia inicialmente proposta por Salsburg e colaboradores [77]. A versão mais comum, e utilizada neste trabalho, foi proposta por Ferrenberg e Swendsen [78].

Em linhas gerais, o método parte de uma simulação Monte Carlo de um sistema qualquer (o modelo XY, por exemplo), realizada a uma dada temperatura fixa. Essa simulação gera configurações de acordo com a distribuição canônica de probabilidades

$$P_{\beta_0}(x) = \frac{1}{Z_{\beta_0}} \exp[-\beta_0 \mathcal{H}(x)], \quad (2.21)$$

$$Z_{\beta_0} = \sum_{\{x\}} \exp[-\beta_0 \mathcal{H}(x)], \quad (2.22)$$

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

A distribuição de probabilidades $P_{\beta_0}(x)$ contém toda a informação termodinâmica sobre o

sistema. Entretanto, é mais conveniente trabalhar com uma distribuição equivalente, $P_{\beta_0}(E)$, para o espectro de energias do sistema

$$P_{\beta_0}(E) = \frac{1}{\mathcal{Z}_{\beta_0}} W(E) \exp[-\beta_0 E], \quad (2.23)$$

onde $W(E)$ é o número de estados com energia E . Para um sistema com um espectro contínuo de energias $W(E)$ torna-se uma densidade de estados de energia entre E e $E + \delta E$. A média térmica de qualquer função de E pode ser obtida com

$$\langle f(E) \rangle_{\beta_0} = \frac{1}{\mathcal{Z}_{\beta_0}} \sum_E f(E) W(E) \exp[-\beta_0 E]. \quad (2.24)$$

O método parte do princípio que a simulação Monte Carlo gera configurações de acordo com a distribuição de probabilidades de equilíbrio, logo um histograma $H(E)$ da energia gerado durante a simulação vai fornecer uma estimativa para a distribuição $P_{\beta_0}(x)$ dado pela Eq. (2.23), que será mais precisa quanto maior for o número de passos de Monte Carlo realizados (MCS). Dessa forma, pode-se escrever

$$\frac{H(E)}{\text{MCS}} = \frac{1}{\mathcal{Z}_{\beta_0}} W(E) \exp[-\beta_0 E]. \quad (2.25)$$

Assim, pode-se obter a densidade de probabilidade da energia invertendo a equação para $W(E)$

$$W(E) = \frac{\mathcal{Z}_{\beta_0}}{\text{MCS}} H(E) \exp[\beta_0 E] \quad (2.26)$$

e, para uma temperatura arbitrária T , tem-se

$$P_{\beta}(E) = \frac{1}{\mathcal{Z}_{\beta}} W(E) \exp[-\beta E]. \quad (2.27)$$

Normalizando a equação acima encontra-se

$$P_{\beta}(E) = \frac{W(E) \exp[-\beta E]}{\sum_E W(E) \exp[-\beta E]}. \quad (2.28)$$

Assim, a média de uma quantidade termodinâmica qualquer é dada por

$$\langle f(E) \rangle_{\beta} = \frac{\sum_E f(E) W(E) \exp[-\beta E]}{\sum_E W(E) \exp[-\beta E]}. \quad (2.29)$$

Em suma, o método do histograma dá uma estimativa da distribuição de probabilidades para uma temperatura T a partir da distribuição de probabilidades obtida para uma temperatura T_0 . Contudo, pelo fato de o número de passos de Monte Carlo ser finito na simulação utilizada

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

No caso dos modelos estudados neste trabalho, o espectro de energias é contínuo e, para a construção do histograma, é necessário discretizar a distribuição de probabilidades, escolhendo um passo de discretização adequado. Entretanto, uma alternativa que elimina a necessidade da discretização no cálculo das médias termodinâmicas (Eq. (2.29)) é a leitura, linha por linha, de uma tabela de energias e magnetizações (ou outras grandezas $f(E)$ desejadas), armazenada durante a simulação na temperatura T_0 . Esse processo é equivalente a computar-se o somatório da Eq. (2.29) e poupa-nos dos problemas introduzidos pela discretização.

2.6.2 Método do histograma multidimensional

O método do histograma multidimensional é uma extensão do método do histograma simples. Esse método é importante no estudo de sistemas no qual é necessário extrapolar o comportamento de grandezas termodinâmicas não apenas na temperatura, mas também em outros parâmetros do hamiltoniano. Por exemplo, considere o modelo vetorial de Blume-Emery-Griffiths expresso pelo hamiltoniano da Eq. (2.17). Esse hamiltoniano apresenta três parâmetros J , K e Δ , podendo ser reescrito como

$$-\beta\mathcal{H} = K_1\mathcal{H}_1 + K_2\mathcal{H}_2 + K_3\mathcal{H}_3, \quad (2.30)$$

onde $\mathcal{H}_1 = \sum_{\langle i,j \rangle} [S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y]$, $\mathcal{H}_2 = \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^z S_j^z$, $\mathcal{H}_3 = \sum_i S_i^z$, $K_1 = \beta J$, $K_2 = \beta K$ e $K_3 = \beta \Delta$.

Portanto, a partir de uma simulação realizada à temperatura T_0 e nos parâmetros K_{10} , K_{20}

e K_{30} , obtêm-se a seguinte distribuição de probabilidades

$$P_{k_{10},k_{20},k_{30}}(\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2, \mathcal{H}_3) = \frac{1}{\mathcal{Z}(k_{10},k_{20},k_{30})} W(\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2, \mathcal{H}_3) \exp[K_{10}\mathcal{H}_1 + K_{20}\mathcal{H}_2 + K_{30}\mathcal{H}_3]. \quad (2.31)$$

Análogo ao histograma simples, para uma temperatura extrapolada T e parâmetros extrapolados K_1 , K_2 e K_3 , a distribuição de probabilidades é dada por

$$P_{k_1,k_2,k_3}(\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2, \mathcal{H}_3) = \frac{1}{\mathcal{Z}(k_1,k_2,k_3)} W(\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2, \mathcal{H}_3) \exp[K_1\mathcal{H}_1 + K_2\mathcal{H}_2 + K_3\mathcal{H}_3]. \quad (2.32)$$

Partindo do histograma tridimensional $H(H_1, H_2, H_3)$ obtido da simulação Monte Carlo tem-se

$$P_{k_{10},k_{20},k_{30}}(\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2, \mathcal{H}_3) = \frac{H(\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2, \mathcal{H}_3)}{M}. \quad (2.33)$$

Os cálculos seguem análogo aos feitos para o histograma simples, ou seja, substituindo a Eq. (2.33) e na Eq. (2.31), obtêm-se uma estimativa para $W(\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2, \mathcal{H}_3)$. Inserindo essa estimativa na Eq. (2.32) e normalizando a distribuição de probabilidades, obtêm-se

$$P_{k_1,k_2,k_3}(\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2, \mathcal{H}_3) = \frac{H(\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2, \mathcal{H}_3) \exp[\Delta K_1\mathcal{H}_1 + \Delta K_2\mathcal{H}_2 + \Delta K_3\mathcal{H}_3]}{\sum_{\mathcal{H}_1} \sum_{\mathcal{H}_2} \sum_{\mathcal{H}_3} H(\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2, \mathcal{H}_3) \exp[\Delta K_1\mathcal{H}_1 + \Delta K_2\mathcal{H}_2 + \Delta K_3\mathcal{H}_3]}. \quad (2.34)$$

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

$$\langle f(\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2, \mathcal{H}_3) \rangle = \frac{\sum_{H_1} \sum_{H_2} \sum_{H_3} f(\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2, \mathcal{H}_3) H(\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2, \mathcal{H}_3) \exp[\Delta K_1\mathcal{H}_1 + \Delta K_2\mathcal{H}_2 + \Delta K_3\mathcal{H}_3]}{\sum_{\mathcal{H}_1} \sum_{\mathcal{H}_2} \sum_{\mathcal{H}_3} H(\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2, \mathcal{H}_3) \exp[\Delta K_1\mathcal{H}_1 + \Delta K_2\mathcal{H}_2 + \Delta K_3\mathcal{H}_3]}. \quad (2.35)$$

2.7 Teoria de escala de tamanho finito

A teoria de transições de fase e fenômenos críticos apresentada na Seção 2.1 parte da hipótese de o sistema encontrar-se no limite termodinâmico, onde o número N de partículas e o volume V do sistema vão a infinito, com uma densidade N/V constante. Essa condição, entretanto, não é satisfeita para os sistemas estudados em experimentos, e muito menos em

simulações computacionais. O efeito de tamanho finito nas propriedades críticas do sistema tem sido objeto de estudo teórico por muitos anos (veja [16]). Mais recentemente, devido ao progresso na preparação de filmes finos, essa questão começou a ser investigada experimentalmente. Veja, por exemplo, as referências [14, 15].

As técnicas de Escala de Tamanho Finito (ETF) são particularmente importantes no trabalho numérico, sendo hoje um dos procedimentos mais eficazes para a determinação de quantidades críticas. Aqui, é apresentado, de forma resumida, as principais idéias por trás da ETF e as diversas relações que são utilizadas em estudos numéricos para determinar as quantidades críticas.

O ponto de partida da ETF é estudar o comportamento crítico do sistema no limite termodinâmico a partir da dependência da parte singular da energia livre com o tamanho finito do mesmo. Para tal, supõe-se a homogeneidade do sistema e usa-se o tamanho linear L e a temperatura reduzida t como variáveis, encontrando a seguinte relação de escala de tamanho finito nas vizinhanças do ponto crítico estacionário T_c

$$F(L, T) = L^{-(2-\alpha)/\nu} \mathcal{F}(tL^{1/\nu}), \quad (2.36)$$

onde $t = (T - T_c)/T_c$. Partindo da energia livre obtêm-se para a transição de segunda ordem propriedades termodinâmicas que seguem as leis de escalas

$$m = L^{-\beta/\nu} \mathcal{M}^0(tL^{1/\nu}), \text{ magnetização,} \quad (2.37a)$$

$$\chi = L^{-\gamma/\nu} \mathcal{X}^0(tL^{1/\nu}), \text{ susceptibilidade,} \quad (2.37b)$$

$$C = L^{-\alpha/\nu} \mathcal{C}^0(tL^{1/\nu}), \text{ calor específico,} \quad (2.37c)$$

em que $\mathcal{M}^0(x)$, $\mathcal{X}^0(x)$ e $\mathcal{C}^0(x)$ são funções escalares e α , β , γ , ν são os expoentes críticos do calor específico, da magnetização, da susceptibilidade e comprimento de correlação, respectivamente. Exatamente na transição todas as propriedades termodinâmicas exibem um comportamento seguindo uma lei de potência, uma vez que as funções escalares se reduzem a constantes, e portanto

$$M \propto L^{-\beta/\nu}, \quad (2.38a)$$

$$\chi \propto L^{-\gamma/\nu}, \quad (2.38b)$$

$$C \propto L^{-\alpha/\nu}. \quad (2.38c)$$

Além destas quantidades, que são basicamente momentos de primeira ou segunda ordem da distribuição de probabilidade do parâmetro de ordem ou da energia, informações adicionais

importantes podem ser obtidas examinando momentos de ordens mais altas da correspondente distribuição de probabilidade. Isto pode ser feito efetivamente considerando o cumulante reduzido de quarta ordem [79]. Para um modelo de Ising a campo nulo, para o qual todos os momentos de ordem ímpar desaparecem por simetria, U_4 o cumulante de quarta ordem é dado por

$$U_4 = 1 - \frac{\langle M^4 \rangle}{3 \langle M^2 \rangle^2}. \quad (2.39)$$

Quando o tamanho do sistema tende a infinito, $L \rightarrow \infty$, implica $U_4 \rightarrow 0$ quando $T > T_c$, e $U_4 \rightarrow 2/3$ quando $T < T_c$. Para redes de tamanho suficientemente grandes, as curvas de $U_4(T)$ se cruzam num ponto fixo U_4^* e o local do cruzamento é o ponto crítico. Consequentemente, fazendo os gráficos para diferentes tamanhos de redes, partindo do ponto de cruzamento das curvas, pode-se fazer uma identificação preliminar da classe de universalidade do valor de U_4^* e se obter uma estimativa para T_c . Se os tamanhos usados forem muito pequenos, haverá limitações estatísticas, impedindo que todas as curvas se interceptem num ponto comum, devendo haver neste caso uma variação sistemática que crescerá com tamanho da rede para uma interseção comum. Outra técnica que pode ser usada para determinar a temperatura de transição com boa precisão consiste em localizar os pontos de máximos em quantidades termodinâmicas divergentes como: o calor específico e a susceptibilidade magnética. O local do cume define uma temperatura de transição $T_c(L)$ de rede finita, a qual varia com o tamanho do sistema de acordo com

$$T_c(L) = T_c + bL^{-1/\nu}, \quad (2.40)$$

em que b é um constante, e o expoente é o mesmo para qualquer formulação de $T_c(L)$, mas com diferentes coeficientes b , visto que cada quantidade termodinâmica tem sua própria função de escala. Os cumes de funções termodinâmicas diferentes acontecem a temperaturas distintas para sistemas finitos, alguns com valores de q positivo e outros com valores de q negativo. Usando a Eq. (2.40) pode-se determinar o local da transição de uma rede infinita, para isso é necessário ter uma estimativa precisa de ν e valores precisos de $T_c(L)$. No caso de ν não ser conhecido, o ajuste não-linear usando a Eq. (2.40) possui 3 parâmetros ajustáveis, consequentemente uma resposta segura só é obtida se dados com boa precisão estatística forem usados e se forem avaliadas várias quantidades termodinâmicas simultaneamente. É notoriamente difícil determinar ν de uma simulação *MC* devido à falta de quantidades que provêm uma medida direta. Por isso é útil examinar o cumulante de quarta ordem da magnetização [79]. Na região de escala de tamanho finito, a derivada de U_4 em relação à temperatura, por exemplo, varia com L segundo a equação

$$U_4' = L^{1/\nu} \frac{U^0(\epsilon L^{1/\nu})}{T_c}, \quad (2.41)$$

que permite estimar o expoente crítico ν de forma direta, diminuindo com isso sua incerteza. No entanto, a equação acima não é a única que permite a determinação de ν diretamente. Outras quantidades serão apresentadas nos próximos capítulos quando do estudo do modelo XY.

Utilizando as relações apresentadas nesta seção pode-se obter os expoentes críticos ν , β , γ e α , bem como a temperatura crítica do sistema T_c , partindo de uma simulação Monte Carlo em sistemas com valor de L suficientemente grandes. Contudo, para sistemas pequenos pode ser ainda necessário acrescentar termos de correções de escala. As relações assumem então as seguintes formas

$$M = M_0 L^{-\beta/\nu} (1 + b_M L^{-\omega}) , \quad (2.42a)$$

$$\chi = \chi_0 L^{-\gamma/\nu} (1 + b_\chi L^{-\omega}) , \quad (2.42b)$$

$$C = C_0 L^{-\alpha/\nu} (1 + b_C L^{-\omega}) , \quad (2.42c)$$

$$T_c(L) = T_c + b L^{-1/\nu} (1 + b_T L^{-\omega}) , \quad (2.42d)$$

onde b_M , b_χ , b_C e b_T são constantes não universais e ω o expoente de correção de escala.

Por outro lado, como visto na seção 2.1, um ponto marcante da teoria BKT é que ela prevê uma singularidade essencial, um crescimento exponencial do comprimento de correlação e de outras grandezas termodinâmicas perto da transição, em contraste com o comportamento de lei de potência em uma transição de segunda ordem, como discutido acima. No entanto, esse comportamento, durante muito tempo, não pôde ser confirmado através de simulação Monte Carlo. Isso se deve a grande dependência da transição BKT com o tamanho do sistema. Só a partir da década de 1990, simulações de Monte Carlo permitiram um esclarecimento do comportamento BKT [80, 81, 82, 83, 84]. Na última década, varios trabalhos foram publicados buscando compreender os efeitos do tamanho finito no modelo XY [33, 85, 86]. Um exemplo típico é a obra de Hasenbusch [87], onde o modelo XY foi estudado em redes de tamanho até $L = 2024$.

Embora o modelo XY em duas dimensões não apresente quebra espontânea de simetria a função de correlação entre os spins do plano decai lentamente a baixa temperatura como foi apresentado na Seção 2.1. Este lento decaimento com a distância provoca o aparecimento de magnetização espontânea em um sistema finito [88, 89, 90]. A análise de ondas de spin, em um sistema com N spin e a baixa temperatura, dá uma magnetização M_{xy} [91]

$$M_{xy} = \left(\frac{1}{2N}\right)^{T/8\pi} . \quad (2.43)$$

Esta magnetização apresenta uma “transição” em uma temperatura efetiva $T_c(L)$ com um aparente expoente crítico universal $\beta = 0.23$, que também é observado experimentalmente em

diferentes materiais magnéticos que se assemelham ao modelo XY [92, 93, 94].

Esta temperatura efetiva segue uma lei de escala para transição BKT dada pela relação [37, 84, 90]

$$T(L) \approx T_{BKT} + \frac{\pi^2}{4c(\ln L)^2}. \quad (2.44)$$

3 Modelo XY tridimensional como diluição por sítios

Neste capítulo são apresentados os resultados das simulações Monte Carlo realizadas para o modelo XY com diluição por sítios do tipo temperada numa rede cúbica. O diagrama de transição de fase da temperatura crítica versus concentração de sítios magnéticos foi obtida utilizando-se algoritmo de Monte Carlo Híbrido e Técnica do histograma. Esse diagrama revela uma fase desordenada separada de uma fase ordenada por uma linha de transição de segunda ordem. Os resultados da simulação foram comparados com resultados analíticos, bem como recentes resultados experimentais.

3.1 Introdução

Na Seção 2.2 foi introduzido o modelo XY ferromagnético puro. Nesta seção será inserido uma diluição por sítio do tipo temperada (*quenched*) no hamiltoniano, que passa a ser descrito por

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \varepsilon_i \varepsilon_j [S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y], \quad (3.1)$$

onde S_i é um vetor de spin clássico tridimensional com $S_i^2 = (S_i^x)^2 + (S_i^y)^2 + (S_i^z)^2 = 1$, o somatório é executado sobre todos os pares de primeiros vizinhos em uma rede cúbica simples, e ε_i é uma variável aleatória descorrelacionada do tipo temperada, que representa a existência de duas classes de partículas no sistema, as partículas magnéticas ($\varepsilon_i = 1$) e as não magnéticas ($\varepsilon_i = 0$).

As variáveis ε_i obedecem a seguinte distribuição de probabilidade

$$P(\varepsilon_i) = p\delta(\varepsilon_i - 1) + q\delta(\varepsilon_i), \quad (3.2)$$

onde p é a concentração de sítios magnéticos e $q = 1 - p$ é a concentração de impurezas, tal que $p = 1$ corresponde ao sistema puro.

No Capítulo 2 discutiu-se, em linhas gerais, os métodos empregados em simulações Monte Carlo e as correspondes análises de dados. Descreve-se com mais detalhes nesta seção o procedimento utilizado neste modelo específico.

O primeiro passo da simulação é gerar uma amostra aleatória $\varepsilon = \{\varepsilon_1, \varepsilon_2, \varepsilon_3, \dots, \varepsilon_N\}$. Para isso é utilizado um algoritmo de Monte Carlo que sorteia $p \times L^3$ sítios da rede e os preenche com ' $\varepsilon_i = 1$ ', preenchendo o restante dos sítios com ' $\varepsilon_i = 0$ '. Assim, para cada configuração de concentração p , temperatura T e tamanho de rede L são geradas diferentes amostras aleatórias $\{\varepsilon\}$ antes de cada simulação.

A simulação propriamente dita foi realizada utilizando um algoritmo de Monte Carlo Híbrido consistindo de três passos do algoritmo Metropolis (M), cinco passos de uma versão não ergódica do algoritmo de Wolff (W) [67, 73], e dois passos do algoritmo de Superrelaxação a energia configuracional constante (O) [75, 76]. Os passos individuais são misturados automaticamente no programa e então uma sequência é gerada, como por exemplo (MWWMOWMWWO). Este é considerado então um passo de Monte Carlo Híbrido (MCS). Esta configuração de passos que compõe o algoritmo de Monte Carlo Híbrido foi escolhida com base nos resultados de Krech e Landau [95]. Com essa configuração eles obtiveram boa redução das correlações entre as

sucessivas configurações de spin. Próximo da temperatura de transição também foi utilizado a técnica do histograma simples para obter as correspondentes médias de algumas quantidades termodinâmicas de interesse.

Para toda observável Q , foi calculado primeiramente a média térmica de uma amostra $\langle Q_\varepsilon \rangle$ obtida da simulação e da técnica do histograma. Com o resultado das diferentes amostras é calculada então a média configuracional

$$[\langle Q_\varepsilon \rangle]_{\text{av}} = \frac{1}{\#\{\varepsilon\}} \sum_{\{\varepsilon\}} \langle Q_\varepsilon \rangle, \quad (3.3)$$

onde $\#\{\varepsilon\}$ é o número total de amostras considerado.

A média configuracional foi tomada usando amostras ε independentes e para todas as amostras são realizadas 1×10^3 MCS por spin para termalização e para o cálculo da média foi realizado 5×10^4 MCS. O tamanho da rede varia de $L = 10, 20, 30, 40, 50$. Estes valores foram escolhidos para que $p \times L^3$ fosse um número inteiro.

As quantidades termodinâmicas calculadas inicialmente foram a susceptibilidade no plano e o cumulante de Binder

$$M_{xy} = M^x + M^y, \quad (3.4)$$

$$M^x = \sum_i^N S_i^x, \quad M^y = \sum_i^N S_i^y, \quad (3.5)$$

$$\chi_{xy} = L^2 \frac{\langle M_{xy}^2 \rangle - \langle M_{xy} \rangle^2}{T}, \quad (3.6)$$

$$U_4^x = 1 - \frac{\langle M_x^4 \rangle}{3 \langle M_x^2 \rangle^2}, \quad (3.7)$$

onde a temperatura T é dada em unidades de J/k_B , sendo k_B a constante de Boltzmann, e para o cumulante de Binder é utilizado somente a componente x , por esta ter se mostrado mais apropriada para esse modelo [96].

O expoente crítico foi estimado utilizando a teoria de escala de tamanho finito apresentada no Capítulo 2. Foram usadas a média do módulo do parâmetro de ordem $\langle \sqrt{M_x^2 + M_y^2} \rangle$, a média do quadrado do parâmetro de ordem $\langle M_x^2 + M_y^2 \rangle$, e a derivada do logaritmo deste último com relação a temperatura. Em $T = T_c$ é encontrado as relações já discutidas na Seção 2.7,

$$X_1 = L^{-3} \langle M_x^2 + M_y^2 \rangle = X_{10} L^{\gamma/\nu} (1 + X_{11} L^{-\omega}) \quad (3.8)$$

$$X_2 = L^{-3} \langle \sqrt{M_x^2 + M_y^2} \rangle = X_{20} L^{-\beta/\nu} (1 + X_{21} L^{-\omega}) \quad (3.9)$$

$$X_3 = \frac{\partial}{\partial T} \ln \langle m_x^2 + m_y^2 \rangle = X_{30} L^{1/\nu} (1 + X_{31} L^{-\omega}), \quad (3.10)$$

onde β , γ , e ν são os já conhecidos expoentes críticos, X_{ij} é uma constante não universal e ω é o expoente de correção de escala.

3.2 Resultados

3.2.1 Expoentes Críticos

Sabe-se que a simulação computacional de sistemas desordenados, próximo da temperatura de transição, apresenta grandes variações nos valores das quantidades termodinâmicas para diferentes amostras realizadas. Essas flutuações foram aqui analisadas para se definir o melhor número dessas amostras de modo a garantir uma maior precisão no estudo dos expoentes críticos do sistema. Como exemplo, na Figura 3.1 está apresentado os valores da susceptibilidade para cada uma das amostras no ponto de concentração $p = 0,95$ e temperatura $T = 1,473$, e também no ponto de concentração $p = 0,85$ e temperatura $T = 1,294$. Esses pontos estão próximos do ponto de transição de segunda ordem e a simulação foi realizada em uma rede de tamanho linear $L = 20$. Nessa figura os pontos marcam o valor da susceptibilidade da n -ésima amostra, sendo a linha cheia a média das n amostras. Pode-se observar que a distribuição dos pontos em torno da média é quase simétrica e torna-se mais disperso à medida que diminui a concentração de átomos magnéticos. Na Figura 3.2 está apresentada distribuição de frequência da susceptibilidade em $p = 0,85$ e $T = 1,294$. No caso, como espectro de distribuição susceptibilidade é contínuo, para a construção desse histograma, foi necessário discretizar a distribuição de probabilidades, escolhendo um passo de discretização $\delta\chi = 0,4$. Pode se observar que esse histograma se aproxima de uma Gaussiana e que a média e a mediana estão muito próximas. Assumindo a aproximação gaussiana para a distribuição, pode-se calcular o intervalo de confiança [16]. Com esta análise percebe-se que a média é estável acima de 100 realizações de desordem e que o intervalo de confiança diminui lentamente com o número de amostra. Com 100 amostras o intervalo de confiança fica abaixo de 0,6% do valor da susceptibilidade para $p = 0,85$. Uma vez que o custo computacional para reduzir esse erro é muito alto, especialmente para redes maiores, foi utilizado neste trabalho 100 amostras para todas as configurações.

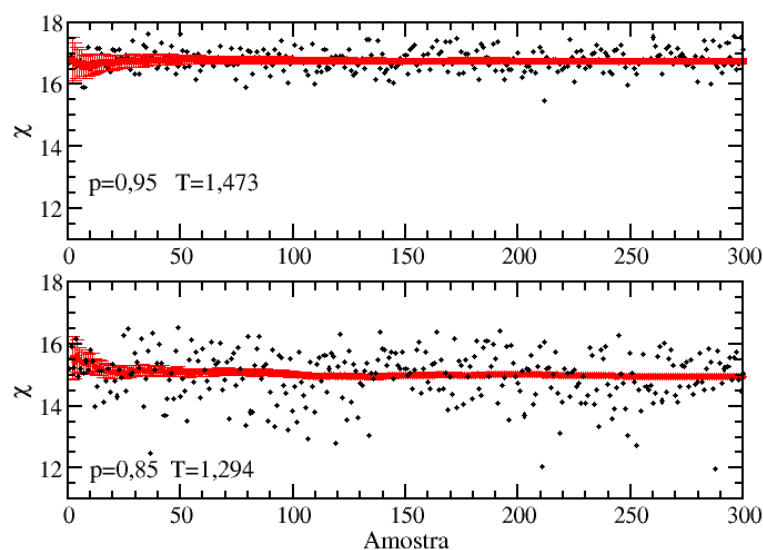


Figura 3.1: Susceptibilidade magnética χ_ε em diferentes amostras, para $p = 0,95$ e $p = 0,85$ e $L = 20$, obtida na temperatura próxima da temperatura de transição. A linha sólida é a média das n amostras de acordo com a Eq. (3.3).

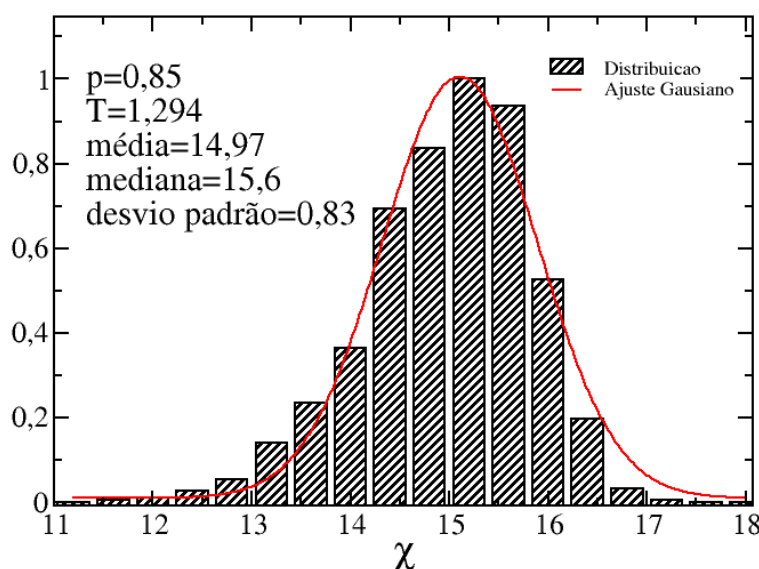
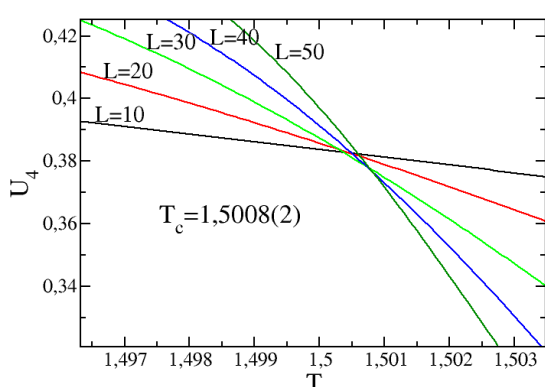


Figura 3.2: Distribuição de frequência da susceptibilidade magnética χ_ε em $p = 0,85$ e $L = 20$. Onde o espectro da distribuição foi discretizado com um passo de $\delta_\chi = 0,4$. A linha sólida é um ajuste por uma gaussiana.

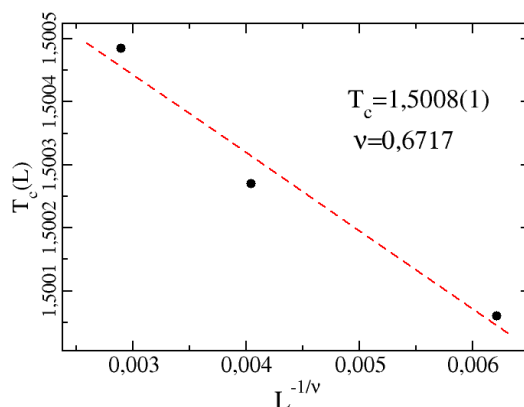
A fim de estudar o comportamento do expoente crítico com diluição dentro de uma boa precisão, restringiu-se o estudo a concentrações maiores que 0,85, pelo fato do intervalo de confiança decrescer com o aumento da concentração de sítios magnéticos, como pode ser visto na Figura 3.1. Apesar da restrição no intervalo de concentração é possível, a partir desse, obter

conclusões gerais para o modelo. Como exemplo típico, nas Figuras 3.3 e 3.4 apresenta-se, respectivamente, o cumulante de Binder (Eq. (3.7)) e as quantidades termodinâmicas dadas pelas Equações (3.8)-(3.10) para a concentração $p = 0,97$.

Tomando o cruzamento das duas maiores redes no cumulante, encontra-se $T_c^{U_4} = 1,5008(2)$ (Figura 3.3(a)). Pode-se, no entanto, a partir da escala de temperatura da Figura 3.3(a) perceber que ainda há uma dependência do tamanho da rede no U_4 . Contudo, usando uma estimativa para o expoente $\nu = 0,6717$ e ajustando os dados para uma dependência de escala de tamanho finito (sem correção de escala) dos cruzamentos das redes $L = 30, 40, 50$ com $L = 20$ foi encontrado $T_c^{U_4} = 1,5008(1)$ (Figura 3.3(b)). Isso mostra que essa nova estimativa de T_c acaba por não ser tão diferente da anterior. Logo, para obter a temperatura crítica sem a necessidade de qualquer expoente usou-se apenas a temperatura crítica do cruzamento de U_4 para as duas redes maiores.



(a) Cumulante de Binder como função da temperatura para diferentes tamanhos de rede.



(b) Temperatura do cruzamento das curvas de cumulante para as redes $L = 30, 40$ e 50 com a rede $L = 20$. A linha tracejada indica o ajuste linear

Figura 3.3: Cumulante de Binder para o modelo XY diluído com $p = 0,97$.

A Figura 3.4 mostra um exemplo do comportamento das quantidades X_1 , X_2 , e X_3 com o tamanho da rede na temperatura $T = 1,5008$. Dessas, foram estimados os expoentes críticos, inicialmente negligenciando o termo de correção de escala de tamanho finito, i.e. $X_{11} = X_{21} = X_{31} = 0$ nas Equações (3.8)-(3.10). Os resultados são mostrados na Figura 3.4 e os expoentes estão apresentados na Tabela 3.1. Pode-se observar que os pontos se ajustam bem a uma linha reta, o que implica que correções de escala não são importantes para os tamanhos de redes utilizados. Usando o mesmo procedimento foram obtidos os expoentes críticos para outras concentrações. Os respectivos resultados estão apresentados também na Tabela 3.1. Nessa

tabela também estão inclusos os resultados obtidos para $p = 1$, que foram comparados com os da referência [9]. Pode-se observar que há um completo acordo com os expoentes do modelo puro. Isto é consistente como o critério de Harris, apesar do expoente do calor específico ser bastante pequeno, mas de fato negativo. O Cumulante de Binder, mostrado na Tabela 3.1, também concorda com esse critério, pois os valores estão bem próximos.

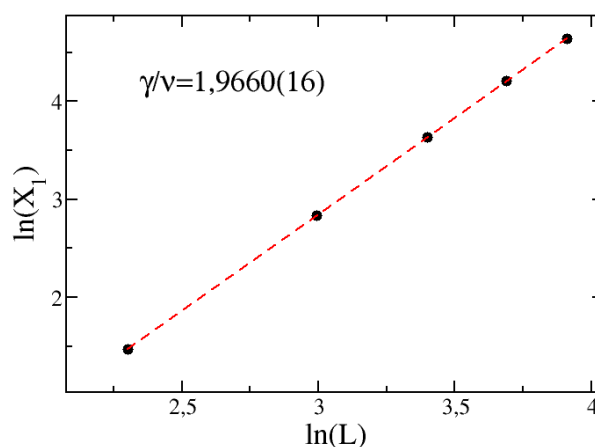
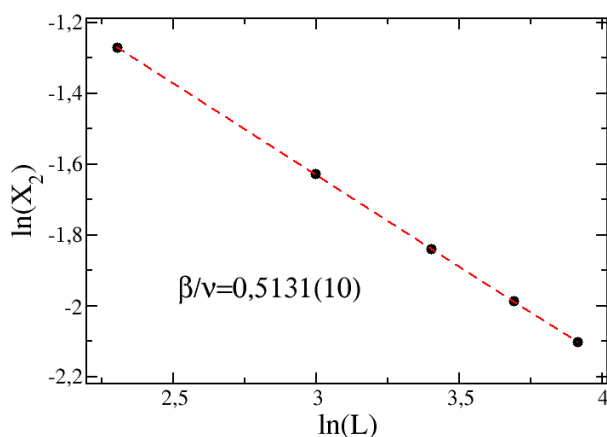
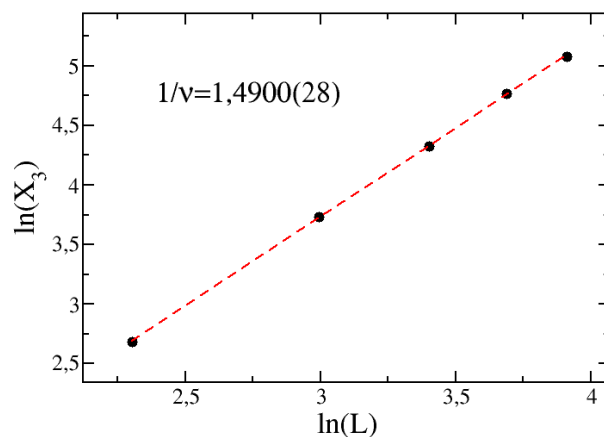
(a) Escala de tamanho finito de X_1 (b) Escala de tamanho finito de X_2 (c) Escala de tamanho finito de X_3

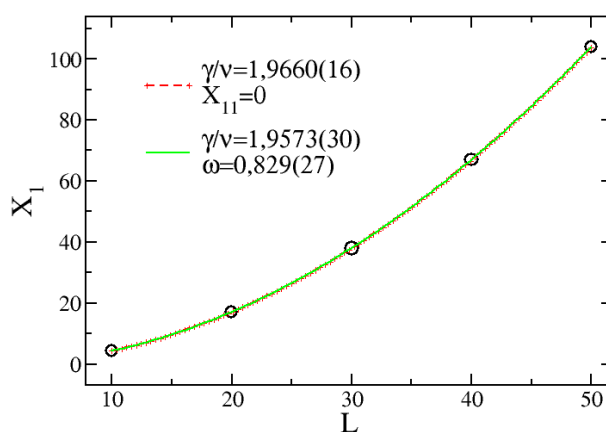
Figura 3.4: Escala de tamanho finito das quantidades termodinâmicas X_1 , X_2 , e X_3 com o correspondente ajuste (linha tracejada) sem as correções de escala. As barras de erro são menores que o tamanho dos símbolos.

Foram analisadas também as correções de escalas das Equações (3.8) - (3.10). O resultado está apresentado nas Figuras 3.5. Observa-se nestas que a diferença entre os expoentes obtidos com e sem correção de escala é pequena. Isso ocorre devido aos termos de correção serem muito pequenos, o que dificulta também a determinação de ω com uma boa precisão. Em todo caso foi obtida uma estimativa de $\omega \sim 0,80(10)$, que é comparável ao $\omega = 0,785(20)$ da Ref.

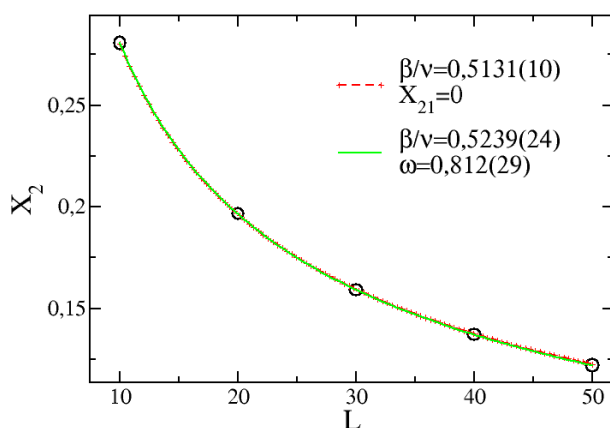
Tabela 3.1: Expoentes críticos do modelo XY com diluição por sítios para diferentes concentrações. Também é dado o cumulante de Binder e a temperatura crítica obtida do máximo da susceptibilidade e do cumulante de Binder.

	$p = 1$ [9]	$p = 1$	$p = 0,97$	$p = 0,95$
α	-0,0151(3)	-0,0037(104)	-0,0134(38)	-0,0055(106)
β	0,3486(1)	0,3423(22)	0,3443(13)	0,3460(36)
γ	1,3178(2)	1,3164(75)	1,3194(35)	1,314(10)
ν	0,6717(1)	0,6679(35)	0,6711(13)	0,6685(35)
$T_c^{U_4}$		1,55177(9)	1,5008(1)	1,46631(31)
$T_c^{X_1}$		1,55184(7)	1,50060(23)	1,46615(29)
U_4	0,3789(15) [95]	0,3808(10)	0,3764(15)	0,3798(64)

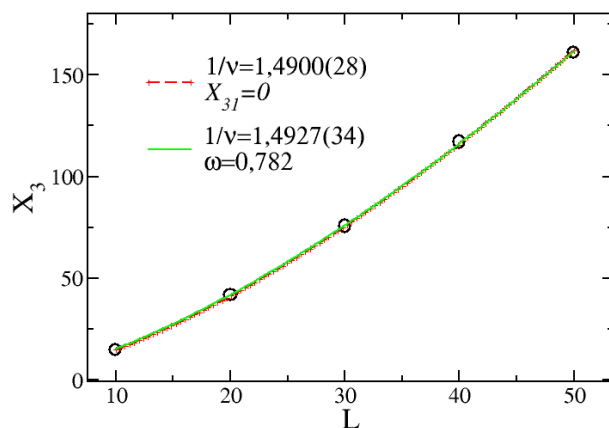
[9].



(a) Escala de tamanho finito de X_1



(b) Escala de tamanho finito de X_2



(c) Escala de tamanho finito de X_3

Figura 3.5: Escala de tamanho finito das quantidades termodinâmicas X_1 , X_2 , e X_3 com o correspondente ajuste. As barras de erro são menores que o tamanho dos símbolos.

Uma vez que foram calculados os expoentes críticos, pode ser obtida uma estimativa adicional, mais precisa, da temperatura crítica através do máximo da susceptibilidade. A localização dos picos define uma temperatura crítica (efetiva) dependente do tamanho da rede $T_c(L)$ que escala de acordo com a equação

$$T_c(L) = T_c + \lambda L^{-1/\nu}, \quad (3.11)$$

onde o expoente crítico universal ν foi obtido da Eq. (3.10) e a constante λ é não universal. A Figura 3.6 mostra o ajuste dos pontos de acordo com a relação de escala dada acima Eq. (3.11). O correspondente valor da temperatura crítica extrapolado é dado também na Tabela 3.1. Nota-se que a temperatura crítica do máximo da susceptibilidade e do cumulante de Binder são bastante semelhantes. Assim, em alguns casos a temperatura crítica só foi determinada pelo cruzamento do cumulante.

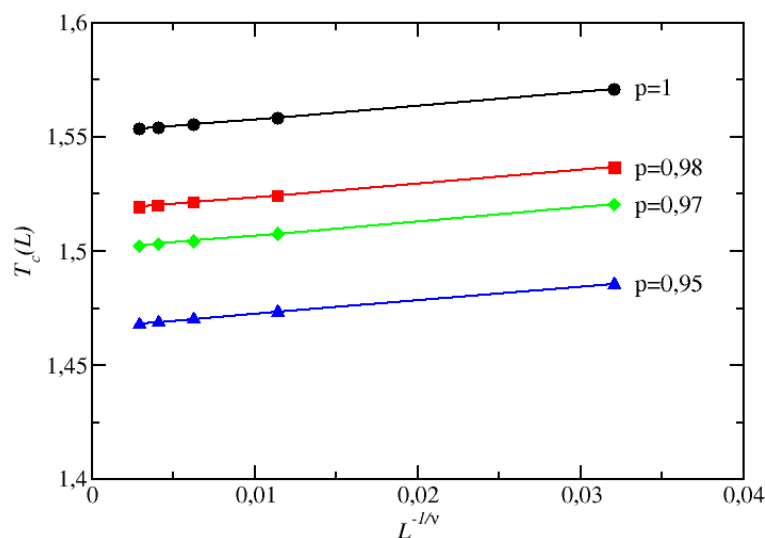


Figura 3.6: Temperatura $T_c(L)$ obtida do máximo da susceptibilidade como função de tamanho linear da rede L . A linha sólida mostra o ajuste dos dados de acordo com a relação de escala dada na Eq. (3.11). Os mesmos valores estão apresentados na Tabela 3.1. As barras de erros são menores que o tamanho dos símbolos.

3.2.2 Diagrama de fase

O diagrama de transição de fase apresentado na Figura 3.7 foi obtido localizando a temperatura crítica através do cruzamento das curvas do cumulante de Binder para diferentes concentrações p . Essa temperatura foi obtida usando os mesmos parâmetros da seção anterior, ou seja, 100 amostras, redes de tamanho linear $L = 10, 20, 30, 40$ e 50 . Pode-se observar que o erro em T_c cresce com a diluição. Esse fato está relacionado à necessidade de um alto

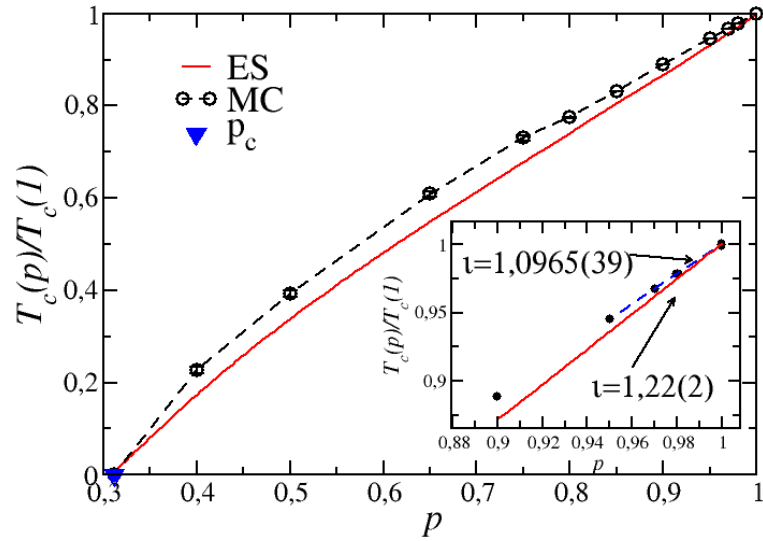


Figura 3.7: Diagrama de fase do modelo tridimensional XY com diluição por sítios do tipo temperada no plano temperatura reduzida $T_c(p)/T_c(1)$ versus concentração de sítios magnéticos p . Os círculos cheios são resultados da simulação Monte Carlo, e a linha pontilhada é uma guia para os olhos. O triângulo marca o local do ponto de percolação p_c [97]. A linha cheia é resultado de expansões em série (ES) para o modelo XY de spin 1/2 retirado do trabalho de Reeve e Betts [43]. O detalhe da figura apresenta os valores da inclinação inicial da temperatura com a diluição ν .

número de amostras para sistemas altamente diluídos, pois muitas configurações não fazem um agrupamento de spins percolado. Apesar do erro na temperatura em $p < 0,85$ ser grande para o estudo dos expoentes críticos, os mesmos são muito pequenos quando comparados com a escala do diagrama de fase, o que permite uma boa análise desse. Na Figura 3.7 está apresentado também o diagrama de fase relatado por Reeve e Betts [43] para o modelo XY ferromagnético com diluição temperada e spin $S = 1/2$ e o ponto de percolação do modelo [97]. Reeve e Betts estudaram o modelo em rede cúbica simples com expansões em série (ES). Observa-se no gráfico uma pequena diferença nas curvas dos dois diagramas, que deve estar relacionada a diferenças nas técnicas utilizadas na obtenção dos diagramas ou devido a diferentes valores de spin [98].

Um importante parâmetro estudado nos sistemas diluídos é a redução inicial da temperatura $T_c(p)$ com a diluição, que é definido por $\nu = \left. \frac{d}{dp} \left(\frac{T_c(p)}{T_c(1)} \right) \right|_{p=1}$. Esse é um parâmetro bastante utilizado para comparar resultados teóricos e experimentais. O valor de ν encontrado neste trabalho foi $\nu = 1,0965(39)$ que é menor que $\nu = 1,22(2)$ obtido por Reeve e Betts [43] e que $\nu = 1,202$ obtido por Tucker e colaboradores [44] obtido usando Aproximação de Campo Efetivo para o mesmo modelo. A diferença nos valores de ν também deve estar relacionada as técnicas de aproximação analítica utilizadas ou devido a diferença nos valores de Spin, uma

vez que Garg e colaboradores [98] estudaram o modelo XY com diluição por ligação e $S = \infty$ através de simulação Monte Carlo e obtiveram $\nu = 1,13$, valor mais próximo ao $\nu = 1,0965(39)$ encontrado neste trabalho. A diferença no ν encontrado nesse trabalho para o do trabalho de Garg era esperada, visto que o valor de ν para sistemas com diluição por sítios é menor que o valor de ν para sistemas com diluição por ligação [99].

3.2.3 Comparação com resultados experimentais

XY antiferromagnético

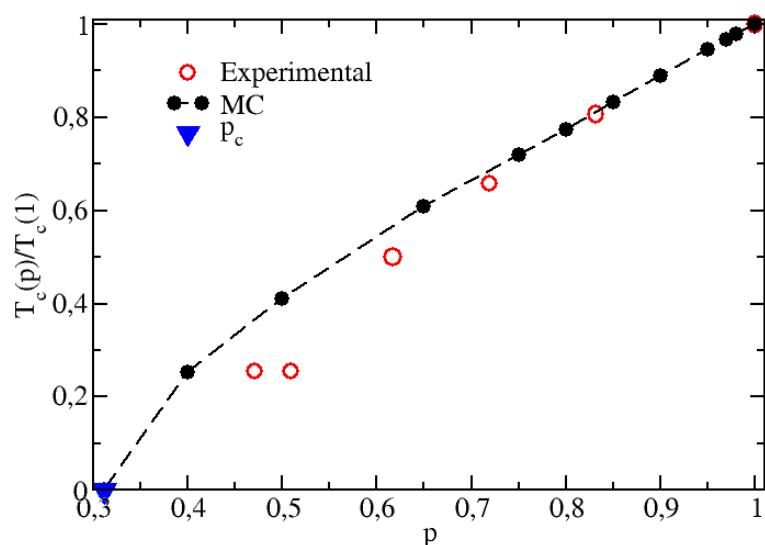


Figura 3.8: Diagrama de fase no plano temperatura reduzida $T_c(p)/T_c(1)$ versus concentração de sítios magnéticos p para o modelo tridimensional XY com diluição por sítios. Os círculos vazios são os resultados experimentais de Burriel e colaboradores [100], os círculos cheios são resultados da simulação Monte Carlo e o triângulo marca o ponto de percolação p_c [97].

No diagrama da Figura 3.8 estão os resultados experimentais relatados por Burriel e colaboradores [100] do material $[\text{Co}(\text{C}_5\text{H}_5\text{NO})_6](\text{NO})_3$ dopado com $[\text{Zn}(\text{C}_5\text{H}_5\text{NO})_6](\text{NO})_3$. Esse material é um exemplo bem estabelecido de um antiferromagneto XY de spin 1/2 em rede cúbica simples [101]. Pode-se observar que na região inicial do diagrama os resultados obtidos com nossa simulação concordam muito bem com os resultados experimentais, apesar de nosso modelo ser clássico. A diferença entre os resultados da simulação e os experimentais torna-se relevante na região do sistema mais próxima da concentração de percolação, com temperaturas menores, e onde os efeitos quânticos podem se tornar mais intensos.

Burriel e colaboradores não relataram o valor de ι em seu trabalho, por isso o valor de ι foi calculado a partir do gráfico 3.8 usando os pontos $T_c(0,83)/T_c(1) = 0,80(1)$ e $T_c(1)/T_c(1) = 1$, resultando em $\iota = 1,17(3)$, que está próximo do valor $\iota = 1,0965(39)$ obtido com a simulação Monte Carlo neste trabalho. O valor de ι assim estimado do trabalho experimental de Burriel e colaboradores não é muito rigoroso porque no ponto $p = 0,83$ o sistema já está bem diluído. Nota-se que calculando o valor de ι usando os pontos $p = 1$ e $p = 0,8$ nos resultados da simulação Monte Carlo encontra-se $\iota = 1,13(2)$ que é ainda mais próximo do resultado experimental. Note que, nesse caso, não houve ajustes de nenhum parâmetro teórico (o modelo antiferromagnético clássico equivale ao ferromagnético).

Modelo XY ferromagnético com interação de supertroca

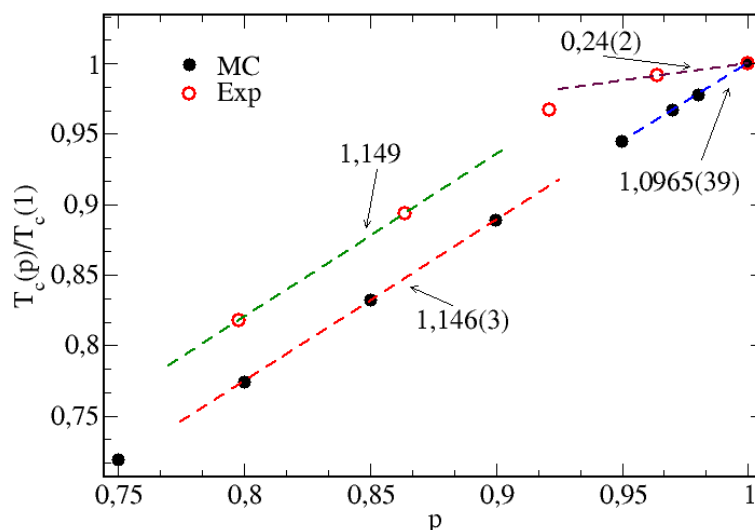


Figura 3.9: Diagrama de fase do modelo XY tridimensional com diluição por sítios do tipo temperada, no plano temperatura reduzida $T_c(p)/T_c(1)$ vs. p para baixa concentração, comparado com resultados experimentais de DeFotis e colaboradores [42]. A linha pontilhada no caso dá a correspondente inclinação na região indicada.

Recentemente, DeFotis e colaboradores [42] publicaram um estudo experimental do ferromagneto policristalino $\text{Fe}[\text{Se}_2\text{CN}(\text{C}_2\text{H}_5)_2]_2\text{Cl}$ que exibe um comportamento típico do modelo XY tridimensional [102]. Eles diluíram o $\text{Fe}[\text{Se}_2\text{CN}(\text{C}_2\text{H}_5)_2]_2\text{Cl}$ com o diamagneto $\text{Zn}[\text{S}_2\text{CN}(\text{C}_2\text{H}_5)_2]_2$ e encontraram $\iota = 0,24(2)$, que é bastante diferente dos resultados teóricos. Contudo, para alta diluição não magnética há uma boa concordância na inclinação correspondente, como pode ser observado na Figura 3.9, onde os dados experimentais estão comparados com os resultados do modelo estudado nesse trabalho. Defotis e colaboradores sugerem que uma possível causa da baixa inclinação inicial com a diluição poderia estar relacionado a um acoplamento extra de interação de supertroca (embora eles alegam que outras causas poderiam

ser mais prováveis). Tal interação de supertroca é similar ao que acontece nas ligas Fe-Al, onde ela explica, de certa forma, a inclinação menos brusca em baixas concentrações de Al [103, 104].

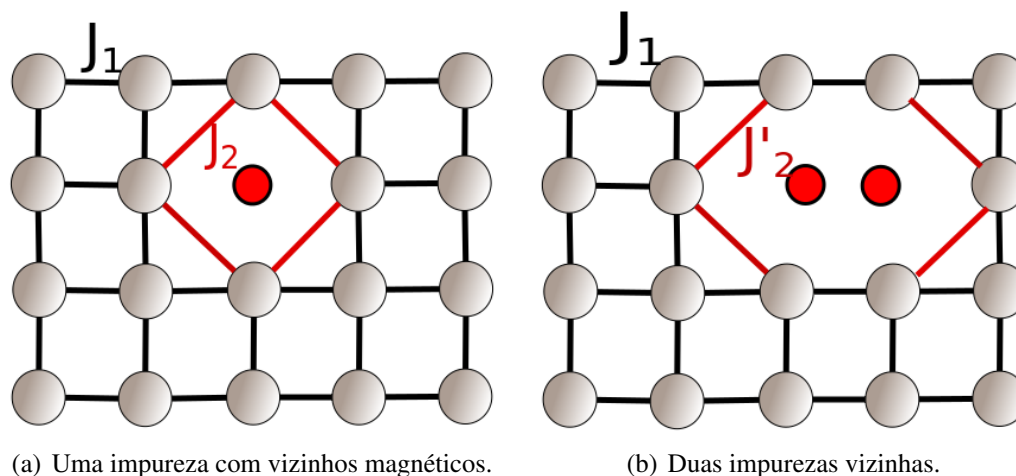


Figura 3.10: Ilustração da quebra das interações de troca J_1 e do surgimento de interações de supertroca J_2 devido a presença de impurezas representadas por esferas menores (caso bidimensional).

Seguindo uma indicação dos trabalhos realizados nas ligas Fe-Al [105], foi realizada uma simulação do modelo XY tridimensional considerando que a impureza estabelece uma interação de supertroca entre os segundos vizinhos magnéticos, como está ilustrado nas Figuras 3.10. Para a rede cúbica cada impureza quebra seis interações entre os primeiros vizinhos e cria doze interações entre segundos vizinhos. Nesse caso, há um grau de liberdade a mais em relação ao sistema da seção anterior, a saber, o valor da interação J_2 . Devido a maior complexidade do modelo, nessas novas simulações, um passo de Monte Carlo Híbrido (MCS) é composto apenas por um passo do algoritmo Metropolis e um passo do algoritmo de Superrelaxação. Os resultados dessa simulação estão resumidos no diagrama de fase da Figura 3.11. Nela os valores de J_2 foram escolhidos de modo a ajustarem a declividade inicial dos dados experimentais. Pode-se observar nesse diagrama, entretanto, que nenhum valor de J_2 constante fornece um ajuste satisfatório para as concentrações menores. Isto nos leva a supor uma existência de uma relação adicional entre a intensidade da interação de supertroca J_2 e a concentração de partículas magnéticas p .

A fim de encontrar uma relação para $J_2(p)$, foi realizada uma simulação Monte Carlo fixando o valor de $J_1 = 1$ e variando o valor de J_2 de modo a obter valores de J_2 que gere o melhor ajuste em cada ponto $T_c(p)$ do diagrama de fase experimental. Os valores de $J_2(p) \times p$ estão apresentados na Figura 3.12. Nela pode-se observar que J_2 diminui com a diluição do sistema.

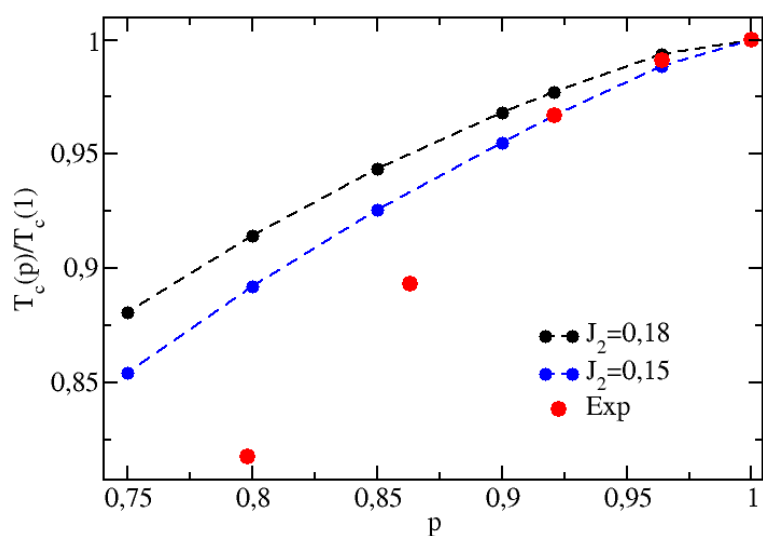


Figura 3.11: Diagrama do modelo XY tridimensional diluído com uma interação adicional de supertroca J_2 no plano temperatura reduzida $T_c(p)/T_c(1)$ vs. p comparado com os resultados experimentais de Defotis e colaboradores [42].

Utilizando um ajuste linear nestes pontos foi obtido $J_2(p) = 0,77(8)p - 0,57(7)$. Substituindo esse ajuste $0,773p - 0,572$ no valor de J_2 na simulação Monte Carlo foi possível obter um ajuste satisfatório para o diagrama de fase experimental. Esse resultado está apresentado na Figura 3.13.

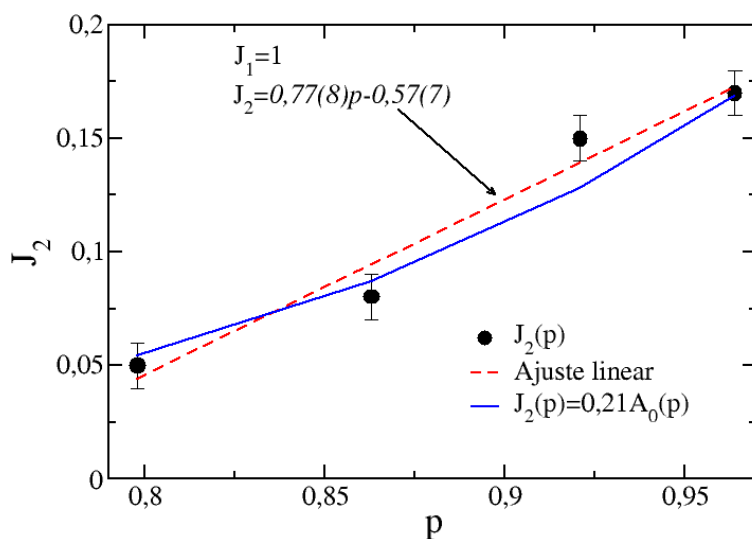


Figura 3.12: Curva da intensidade da interação de supertroca J_2 versus p . Os pontos são os valores de J_2 que produziram o melhor ajuste em cada ponto $T_c(p)$ do diagrama de fase experimental. A linha tracejada é um ajuste linear dos valores de J_2 , a linha cheia é a relação $J_2(p) = 0,21A_0(p)$.

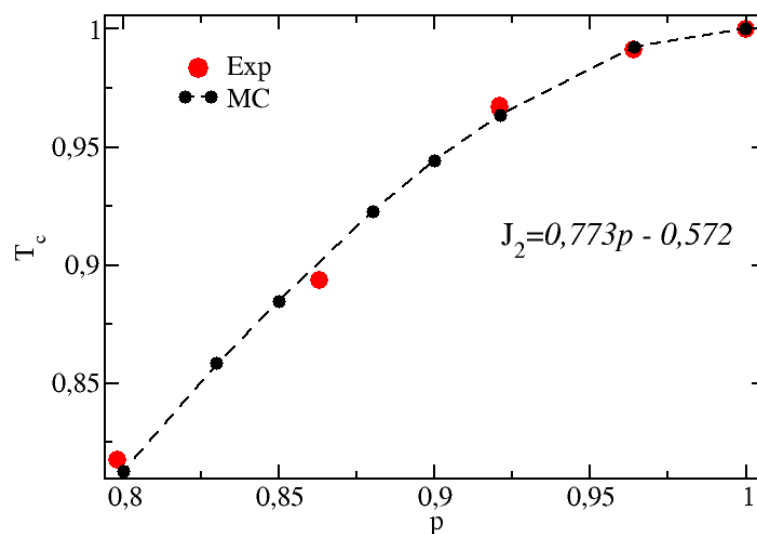


Figura 3.13: Diagrama no plano temperatura reduzida $T_c(p)/T_c(1)$ vs. p do modelo XY tridimensional diluído com interação de supertroca $J_2(p) = 0,773p - 0,572$ comparado com resultados experimentais de Defotis e colaboradores [42].

Visto que a célula unitária do material magnético utilizado no experimento de DeFotis é 5,2% maior que a célula unitária do dopante (material não magnético), é razoável supor que a diluição não deve provocar a alteração dos parâmetros de rede. Ou seja, ao contrário da liga Fe-Al, os parâmetros de rede não devem mudar e por isso J_1 deve permanecer constante com a diluição. Uma vez que os parâmetros de rede não mudam, a aparente diminuição na intensidade da interação de supertroca J_2 com a concentração p deve estar relacionada à existência de diferentes valores de interação de supertroca que dependem do posicionamento da impureza com relação aos seus vizinhos. Ou seja, se uma impureza estiver ao lado de outra impureza (Fig3.10(b)) ela irá proporcionar uma interação J_2 com intensidade diferente de uma impureza que tem na sua vizinhança somente sítios magnéticos (Fig3.10(a)). Isso pode acontecer, por exemplo, por sobrar mais espaço entre a impureza e os sítios magnéticos já que as impurezas são menores. Portanto, uma impureza que tem apenas vizinhos magnéticos proporciona uma interação J_2^0 entre esses vizinhos, uma impureza que tem uma outra impureza proporciona uma interação J_2^1 , uma impureza que tem n outras impurezas vizinhas proporciona uma interação J_2^n . Na rede cúbica ($z = 6$) uma impureza que possua cinco outras impurezas vizinhas ($n = 5$) não propicia nenhuma interação supertroca entre seus vizinhos, pois só há um vizinho magnético, assim sendo, $J_2^5 = 0$ e $J_2^6 = 0$. Contudo, a simulação desse problema é extremamente complexa, porém o resultado dessa simulação seria próximo ao de simular um único valor para J_2 com intensidade igual à média ponderada dos J_2^n , semelhante a um problema de ligações mistas não

competitivas [19, 106]. O valor de J_2 assim definido deve depender de p com a seguinte relação

$$J_2(p) = \sum_{n=0}^4 J_2^n A_n(p), \quad (3.12)$$

onde $A_n(p)$ é a probabilidade de encontrar uma impureza com n impurezas entre os primeiros vizinhos. As probabilidades $A_n(p)$ podem ser obtidas através de Simulação Monte Carlo. Para isso, gera-se várias amostras aleatórias, conta-se as impurezas com n impurezas nos primeiros vizinhos e normaliza-se pelo número total de impurezas. Os valores de $A_n(p)$ para diferentes valores de p está apresentado na Figura 3.14. Observa-se que $A_n(p)$ não depende do tamanho da rede.

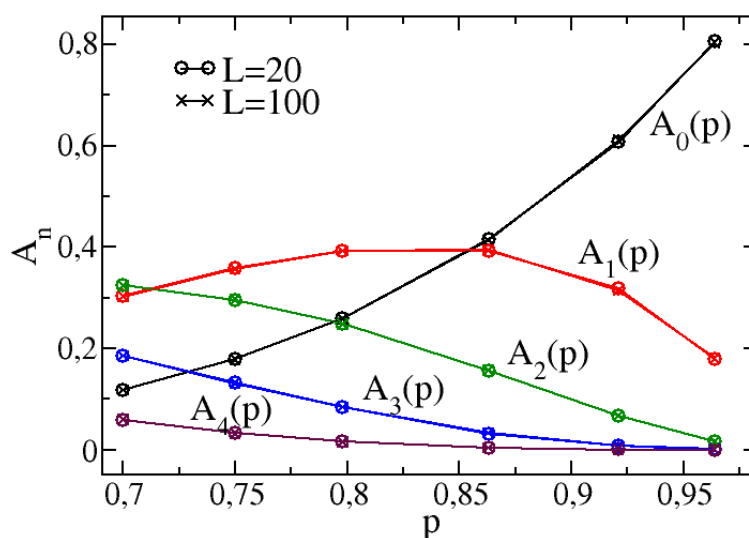


Figura 3.14: Probabilidades $A_n(p)$ como função de p obtidas através de Simulação Monte Carlo para $L = 20$ e $L = 100$.

Não é possível calcular os valores de J_2^n que ajuste a Eq. (3.12) aos pontos da Figura 3.12, visto que só há quatro pontos experimentais. Contudo, para demonstrar que a diminuição na intensidade da interação de supertroca J_2 com a concentração p deve estar relacionada à existência de diferentes valores de interação de supertroca J_2^n que dependem da vizinhança da impureza realizou-se uma simulação no modelo acrescentando uma condição que $J_2^0 = 0,21$ e $J_2^n = 0$ para $n > 0$. Ou seja, nessa simulação foram utilizados apenas dois parâmetros: uma interação entre primeiros vizinhos magnéticos $J_1 = 1$ e uma interação entre segundos vizinhos magnéticos $J_2^0 = 0,21$ proporcionada por uma impureza isolada entre vizinhos magnéticos (Figura 3.10(a)). Nessa simulação o $J_2(p) = \langle J_2^n \rangle = J_2^0 A_0(p)$ como está mostrado na Figura 3.12.

A Figura 3.15 mostra o diagrama encontrado nessa simulação, que se aproxima mais do

resultado experimental do que o diagrama da simulação com $J_2(p)$ constante, isto é, com apenas uma interação de supertroca $J_2^0 = J_2^1 = \dots = J_2^n = 0,18$. Uma vez que seria necessário diferentes valores de J_2^n e uma simulação mais complexa para se conseguir um ajuste melhor, a Figura 3.15 teve por principal objetivo apenas mostrar a possível origem da variação do $J_2(p)$. Por outro lado, um melhor ajuste pôde ser alcançado usando apenas uma relação linear na interação de supertroca $J_2(p)$ (Figura 3.13).

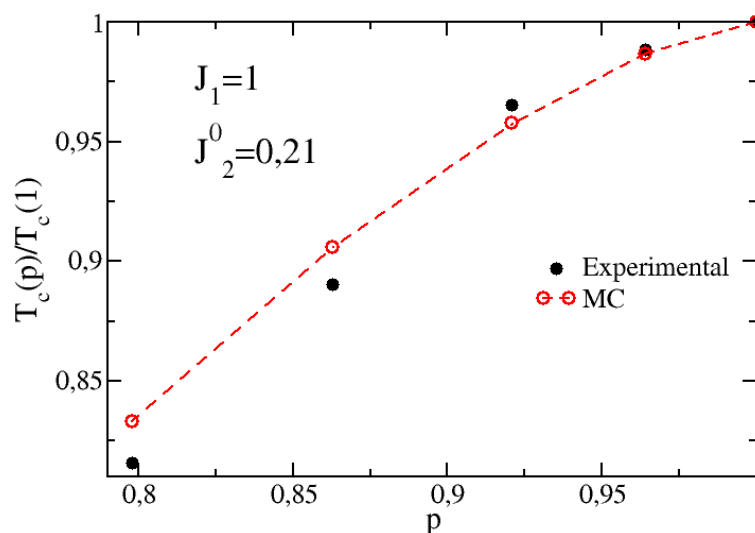


Figura 3.15: Diagrama no plano temperatura reduzida $T_c(p)/T_c(1)$ vs. p do modelo XY tridimensional diluído com interação de supertroca $J_2^0 = 0,21$ e $J_2^n = 0$ para $n > 0$ comparado com resultados experimentais de Defotis e colaboradores [42].

3.3 Conclusão

Nesse capítulo estudou-se o modelo XY ferromagnético com diluição temperada por sítios. A simulação Monte Carlo e técnica do Histograma utilizada mostraram-se eficientes na análise de diferentes características do modelo XY diluído. Um aspecto estudado foi o conjunto dos expoentes críticos em diferentes concentrações de partículas magnéticas. Segundo Reeve e Betts [43] poderia haver uma dependência do expoente γ com a concentração de impurezas para o modelo XY, conclusão que diverge do critério proposto por Harris [61] um ano antes. Em nosso trabalho verificou-se que os expoentes do modelo XY não variam com a diluição temperada, confirmando numericamente a validade do critério de Harris para o modelo. Estudou-se também a inclinação inicial da temperatura com a diluição, que ficou próxima, porém inferior aos resultados encontrados na literatura para o modelo XY com spin 1/2. Esse resultado corrobora com a hipótese apresentada por Garg e colaboradores [98]: a inclinação para $S \rightarrow \infty$ é menor que

para $S = 1/2$. O diagrama de transição de fase obtido concordou muito bem com o diagrama experimental do $[\text{Co}(\text{C}_5\text{H}_5\text{NO})_6](\text{NO})_3$, um antiferromagneto XY de spin $1/2$, apresentado por Burriel e colaboradores [100]. Apesar de nosso modelo ser clássico, não foi necessário nenhum ajuste do parâmetro teórico no modelo. Conseguiu-se também um bom ajuste para o diagrama experimental do $\text{Fe}[\text{Se}_2\text{CN}(\text{C}_2\text{H}_5)_2]_2\text{Cl}$, um ferromagneto XY, apresentado por DeFotis e colaboradores [42]. Nesse caso, no entanto, foi necessário considerar uma interação de supertroca que varia com a concentração. Essa interação justificou a baixa inclinação inicial no resultado experimental de DeFotis. Para uma melhor análise dessa interação de supertroca seria necessário mais pontos experimentais.

4 Filmes monocamadas de misturas de ^3He - ^4He

Neste capítulo são apresentados e discutidos os resultados da simulação Monte Carlo realizadas para a versão XY do modelo vetorial de Blume-Emery-Griffiths em filmes ultrafinos, utilizando redes quadradas e triangulares. Foi obtido o diagrama de fase que reproduz, para uma faixa dos valores dos parâmetros do modelo, a topologia do diagrama observado para filmes de misturas de ^3He - ^4He . Esse diagrama apresenta uma fase superfluida rica em ^4He , e uma fase fluida normal rica em ^3He e em ^4He . A transição da fase superfluida para a fluida rica em ^4He é do tipo BKT enquanto a transição para a fase fluida rica em ^3He é de primeira ordem. A característica marcante desse modelo é a existência do ponto BKT terminal e do ponto crítico simples.

4.1 Introdução

O XY-VBEG é um modelo magnético já definido na Seção 2.4 (Eq. (2.17)) cujo hamiltoniano é

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} [S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y] - K \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^z S_j^z + \Delta \sum_i (S_i^z)^2. \quad (4.1)$$

O estudo desse modelo será realizado usando spin clássico tridimensional representado no hamiltoniano por $\mathbf{S}_i = (S_i^x, S_i^y, S_i^z)$ com $S_i^2 = (S_i^x)^2 + (S_i^y)^2 + (S_i^z)^2 = 1$ representando átomos ^4He ou $S_i^2 = 0$ representando átomos ^3He . O primeiro e o segundo somatório no hamiltoniano são executados sobre todos os pares de vizinhos mais próximos. Como apresentado anteriormente, o primeiro somatório contribui para a superfluidez, já o segundo surge do modelo fenomenológico para a energia de interação entre pares de hélio do mesmo tipo ou de tipos diferentes. O parâmetro Δ , conhecido como a constante de anisotropia do termo de campo cristalino, é essencialmente a diferença de potencial químico $\mu_3 - \mu_4$ de ^3He e ^4He , respectivamente. Neste trabalho utilizou-se $J = 1$ e um parâmetro $\bar{d} = \Delta/J$

No modelo, cada sítio i da rede está associado a uma variável XY do magnetismo clássico, cujo ângulo faz analogia a fase do parâmetro de ordem complexo Ψ , que é a média do operador de criação do conjunto do bóson de átomo de hélio. Uma vez que o modelo não permite sítios desocupados, ele não apresenta uma fase de vapor. Esse modelo pode ser generalizado para incorporar a fase de vapor, mas neste trabalho, por razões de simplicidade, isso foi ignorado.

O modelo XY-VBEG foi estudado usando as técnicas computacionais e de análise de dados descritas com mais detalhes no Capítulo 2. Foram empregados o algoritmo de Gás-de-Rede (G) que contribui para separação de fase do modelo, o algoritmo Metropolis (M), uma versão não-ergódica do algoritmo de Wolff (W) [67, 107], e o algoritmo de super-relaxação (S) a energia configuracional constante, [75, 76] responsáveis pela reorientação de Spin e ordenamento topológico que corresponde a superfluidez. Cada algoritmo é simulado sobre todos os sítios da rede. Eles foram combinados usando o método Monte Carlo híbrido [74] a fim de reduzir na simulação as correlações entre as configurações sucessivas. Assim, um passo de Monte Carlo (MCS) é definido como a sequência dos algoritmos na seguinte configuração: G M G W G S. Os sistemas foram simulados com 1×10^3 MCS para atingir o equilíbrio e com 1×10^5 MCS para o cálculo da média. Foram simulados sistemas com tamanho linear que variaram de $L = 16$ a $L = 512$. Em pontos do diagrama que necessitaram de melhor precisão foi empregado a técnica do histograma simples (Seção 2.6). Nesses pontos o sistema foi simulado com 5×10^3 MCS para atingir o equilíbrio e com 5×10^6 MCS para o cálculo do histograma.

Quantidades termodinâmicas calculadas

Foram calculadas diferentes quantidades termodinâmicas na simulação. Nesta seção é apresentado um resumo dessas quantidades. A média termodinâmica de uma quantidade qualquer $\langle W \rangle$ é calculada da simulação Monte Carlo usando a seguinte equação

$$\langle W \rangle = \frac{1}{MCS} \sum_{j=1}^{MCS} W_j . \quad (4.2)$$

O parâmetro de ordem, ou seja, a magnetização no plano é dada por

$$M_{xy} = \frac{1}{N} \sum_i^N [(S_i^x)^2 + (S_i^y)^2]^{\frac{1}{2}} . \quad (4.3)$$

Apesar de no sistema infinito a magnetização ser nula, no sistema finito com N spins, a análise da Onda-de-Spin a baixa temperatura [89, 108, 109] prediz uma relação entre a magnetização e o número de sítios expressa por

$$M_{xy} \simeq \left(\frac{1}{2L^2}\right)^{T/8\pi} . \quad (4.4)$$

A energia interna por sítio é definida por

$$e = \frac{\langle E \rangle}{N} , \quad (4.5)$$

onde $N = L^2$ é o número de sítios da rede, E é a energia total do sistema.

A concentração de partículas de 3He (não-magnéticas) é dada por

$$q = \frac{1}{L^2} \sum_i^{L^2} [1 - S_i^2] . \quad (4.6)$$

A susceptibilidade magnética no plano é dada por

$$\chi_{xy} = L^2 \frac{\langle M_{xy}^2 \rangle - \langle M_{xy} \rangle^2}{T} . \quad (4.7)$$

No entanto, para $T > T_{BKT}$ a susceptibilidade é equivalente a média do quadrado da magnetização no plano [110], visto que a média da magnetização vai a zero em $T > T_{BKT}$. Por isso, nesse capítulo, a susceptibilidade foi obtida da equação

$$\chi_{xy} = L^2 \frac{\langle M_{xy}^2 \rangle}{T} . \quad (4.8)$$

Como apresentado na Seção 2.1, a susceptibilidade no plano diverge exponencialmente com a temperatura na transição de fase Berezinskii-Kosterlitz-Thouless (BKT) segundo a equação

$$\chi = ae^{b(T-T_{BKT})^{-\nu}}, \quad T \rightarrow T_{BKT}^+, \quad (4.9)$$

e permanece infinita para $T \leq T_{BKT}$ de tal forma que toda uma linha de pontos críticos aparece no diagrama de fases. Na equação acima a e b são constantes. Essa equação permite obter uma estimativa para a temperatura de transição [110]. No entanto, para sistemas de tamanhos finitos, é predito que a susceptibilidade em T_{BKT} comporta-se de acordo com a equação [111]

$$\chi = a'L^{2-\eta} (1 - b'Q), \quad (4.10)$$

onde a' e b' são constantes não universais, η é o expoente da função de correlação e Q é dado por

$$Q = \frac{\pi^2}{2[\ln(L) + u]^2} + O[\ln(L)^{-5}] \quad (4.11)$$

onde u é uma outra constante não universal. Uma vez que na temperatura de transição o expoente η possui um valor bem estabelecido de $\eta(T_{BKT}) = 1/4$ [112] essa equação é utilizada para obter uma estimativa da temperatura de transição BKT [37, 38, 40, 113]

Outra forma de estimar a temperatura de transição BKT é a partir do módulo da helicidade [98, 114, 115, 116]. Essa quantidade apresenta um salto no valor $2T/\pi$ a zero na temperatura de transição BKT para o sistema de tamanho infinito [112]. Já em sistemas de tamanho finito o módulo da helicidade apresenta uma relação dada por [87, 114, 117]

$$\Upsilon = \frac{2}{\pi} T \left(1 + \frac{1}{2\ln L + c} + \dots \right) \quad (4.12)$$

onde c é uma constante não universal. Embora a Eq. (4.12) tenha sido obtida considerando o caso em que não há impurezas, espera-se que sua extensão ao caso impuro seja válida. Argumentos baseados na aproximação harmônica auto-consistente mostram que o módulo da helicidade em $(2/\pi)T_{BKT}$ deve ser independente da concentração de impurezas (vide Ref. [118]).

O módulo da helicidade apresentado na Seção 2.2 é dado por

$$\Upsilon = \left\langle \frac{\partial^2 H}{\partial \delta^2} \Big|_{\delta=0} \right\rangle - \frac{1}{k_B T} \left\langle \left(\frac{\partial H}{\partial \delta} \Big|_{\delta=0} \right)^2 \right\rangle - \frac{1}{k_B T} \left\langle \frac{\partial H}{\partial \delta} \Big|_{\delta=0} \right\rangle^2, \quad (4.13)$$

para o Hamiltoniano do modelo XY-VBEG Eq. (4.1) tem-se

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial H}{\partial \delta} \right|_{\delta=0} &= -J \sum_{i \neq j} (\vec{r}_{ij} \cdot \hat{x}) (S_i^x S_j^y - S_i^y S_j^x) , \\ \left. \frac{\partial^2 H}{\partial \delta^2} \right|_{\delta=0} &= J \sum_{i \neq j} (\vec{r}_{ij} \cdot \hat{x})^2 (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y) . \end{aligned} \quad (4.14)$$

A ausência de picos definidos nas quantidades termodinâmicas torna a localização precisa da temperatura de transição BKT mais difícil. Portanto, foram realizadas as diferentes abordagens descritas nas Equações (4.9, 4.10 e 4.12) para estimar o ponto de transição BKT e verificar a qual se adéqua melhor a análise do modelo XY-VBEG. Essas quantidades foram estudadas a fim de obter o completo diagrama de transição de fase, como também verificar se todas as características das transições BKT estão preservadas em todos os pontos do diagrama. O resultado dessas, bem como suas discussões estão apresentados na próxima seção.

4.2 Resultados

Esta seção está dividida em três partes. Na primeira subseção são apresentados os resultados da Simulação Monte Carlo para o modelo XY-VBEG numa rede quadrada com a constante de troca biquadrática $K = 1$. Nela são apresentados e discutidos diferentes quantidades termodinâmicas do modelo. O diagrama de fase obtido foi comparado com o diagrama relatado por Cardy e Scalapino para o modelo VBEG na versão rotor planar. Na segunda subseção discute-se os resultados do modelo XY-VBEG com a constante de troca biquadrática $K = 0$ numa rede quadrada. Algumas quantidades termodinâmicas que sofreram maior influência da alteração na constante de interação de troca biquadrática são analisadas. O diagrama de fase obtido foi comparado com o relatado recentemente por Dillon e colaboradores para modelo vetorial de Blume-Capel que é equivalente ao modelo VBEG na versão rotor planar. E na ultima subseção é apresentado os resultados do modelo XY-VBEG para $K = 1$ numa rede triangular, com o objetivo de analisar diferenças com os resultados obtidos para rede quadrada, bem como, comparar com os resultados relatados por Berker e Nelson para o modelo rotor planar (RP).

4.2.1 Rede quadrada e $K = 1$

Concentração de ^3He .

A Figura 4.1 mostra a concentração de ^3He como função da temperatura para $d = \Delta/J = -4$, $d = 0$ e $d = 2$ e redes de tamanho variando de $L = 16$ a $L = 512$. Pode-se observar que a concentração de ^3He não depende do tamanho da rede. Para baixas temperaturas a concentração

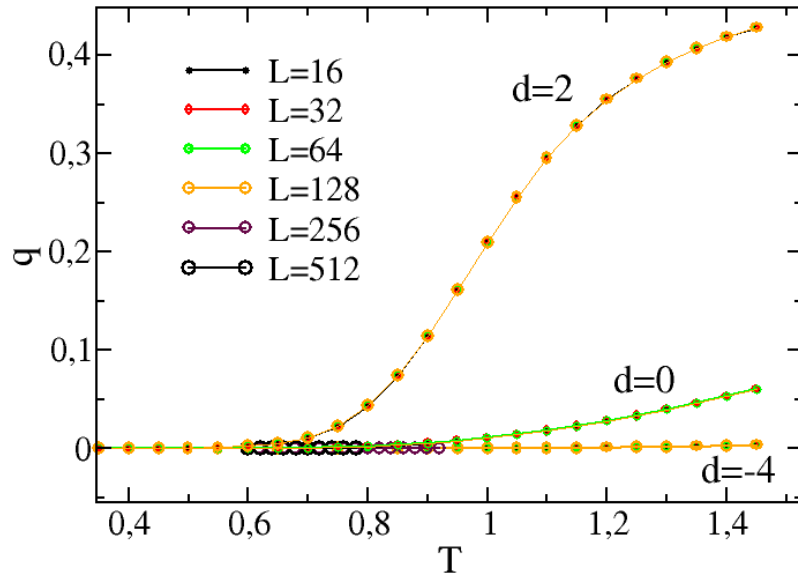


Figura 4.1: Curva da concentração de ${}^3\text{He}$ q como função da temperatura para $K = 1$, $d = \Delta/J = -4$, $d = 0$ e $d = 2$ e tamanhos de rede variando de $L = 16$ a $L = 512$.

de ${}^3\text{He}$ é próxima de zero para os três valores do campo cristalino d . Para $d = -4$ e $d = 0$ as curvas de concentração de ${}^3\text{He}$ estão próximas a zero até a temperatura $T \sim 1$ onde a curva de $d = 0$ começa a apresentar um crescimento. Para valores de d maiores a concentração fica perto da unidade e não está mostrada nessa Figura por questão de clareza. Esse comportamento da concentração q irá, entretanto, se refletir nas propriedades das outras grandezas termodinâmicas, como veremos abaixo.

Na Figura 4.2 está apresentada a concentração de ${}^3\text{He}$ como função do campo d , para rede de tamanho $L = 16$, nas temperaturas $T = 0,4$ (Fig. 4.2(a)), $T = 0,45$ (Fig. 4.2(b)) e $T = 0,5$ (Fig. 4.2(c)). Os pontos cheios foram obtidos da simulação partindo de um campo d inicial pequeno, e incrementando o campo a cada simulação. Já os pontos abertos foram obtidos da simulação partindo de um campo d inicial alto e decrementando o campo a cada simulação. Essas curvas formam uma figura de histerese o que indica a presença de uma transição de primeira ordem. Esse procedimento foi utilizado para localizar pontos de primeira ordem, onde o campo cristalino do ponto de transição de primeira ordem d_c foi considerado o ponto no centro da curva de histerese e o erro a largura da curva de histerese. Utilizando esse método para estimar o ponto de transição o erro desse aumenta com a diminuição da temperatura.

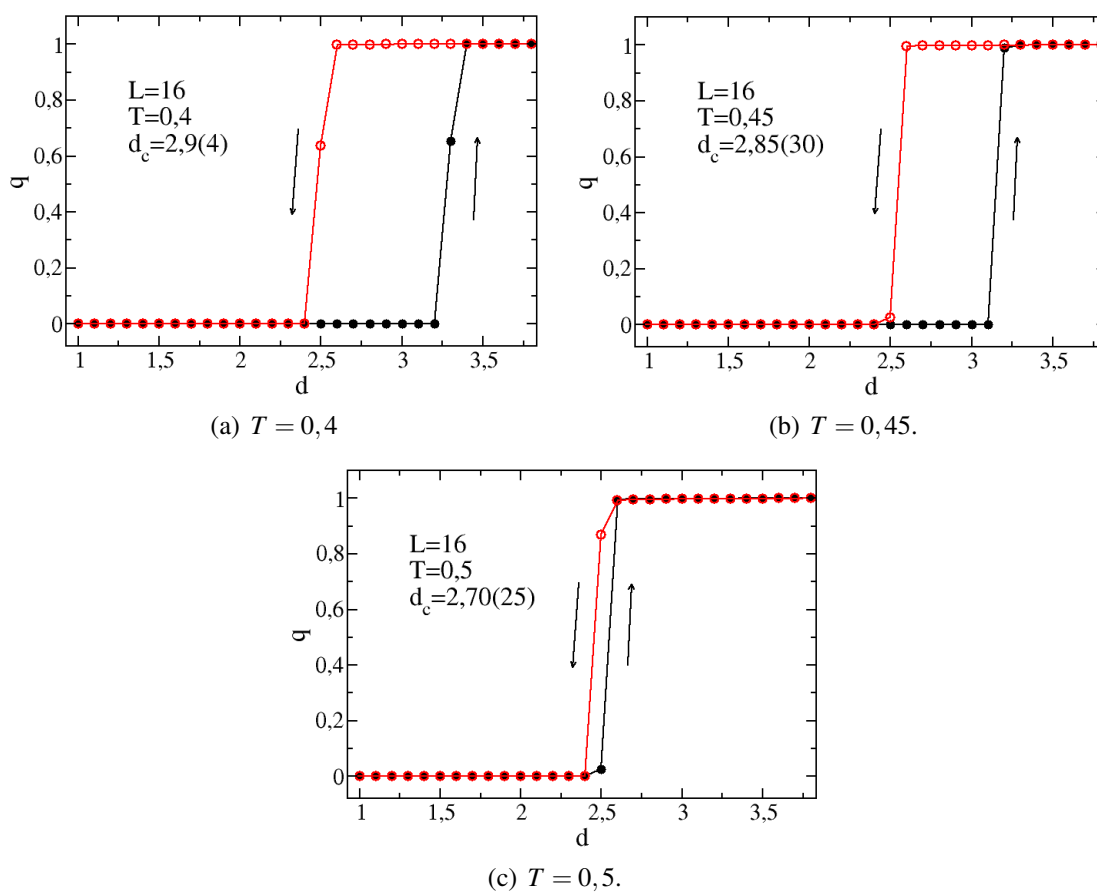


Figura 4.2: Curva da concentração de ^3He q como função do campo d para $K = 1$, e rede de tamanho $L = 16$. Os círculos cheios são resultados obtido da simulação com o incremento o campo d e os círculos abertos são resultados obtidos com o decremento o campo d .

Calor específico

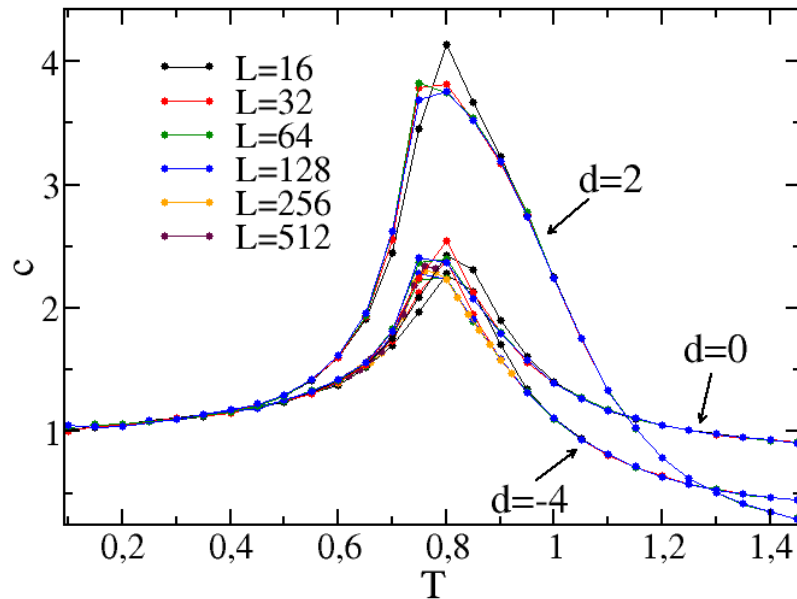


Figura 4.3: Curva do calor específico como função da temperatura para $K = 1$, $d = -4$, $d = 0$ e $d = 2$ e tamanhos de rede variando de $L = 16$ a $L = 512$.

A Figura 4.3 mostra o calor específico c como função da temperatura T para os campos cristalinos $d = -4$, $d = 0$ e $d = 2$, e tamanhos de redes $L = 16$, $L = 32$, $L = 64$, $L = 128$, $L = 256$ e $L = 512$. Com $d = -4$ o sistema quase se equivale ao modelo XY puro. A curva apresenta um máximo característico da transição de fase BKT. O máximo da curva ocorre a uma temperatura cerca de 10% acima da temperatura de transição. As curvas para $d = -4$, $d = 0$ e $d = 2$ se sobrepõem em baixa temperatura se diferenciando em $T > T_{BKT}$. As curvas para $d = -4$ e $d = 0$ nas vizinhanças da temperatura de transição quase se sobrepõem, isso porque as concentrações de ^3He são igualmente baixas na transição. Em $d = 2$, por outro lado, o sistema se encontra próximo do ponto crítico BKT onde a concentração de ^3He na transição sofre a maior variação e por isso apresenta o pico mais intenso.

Módulo da helicidade

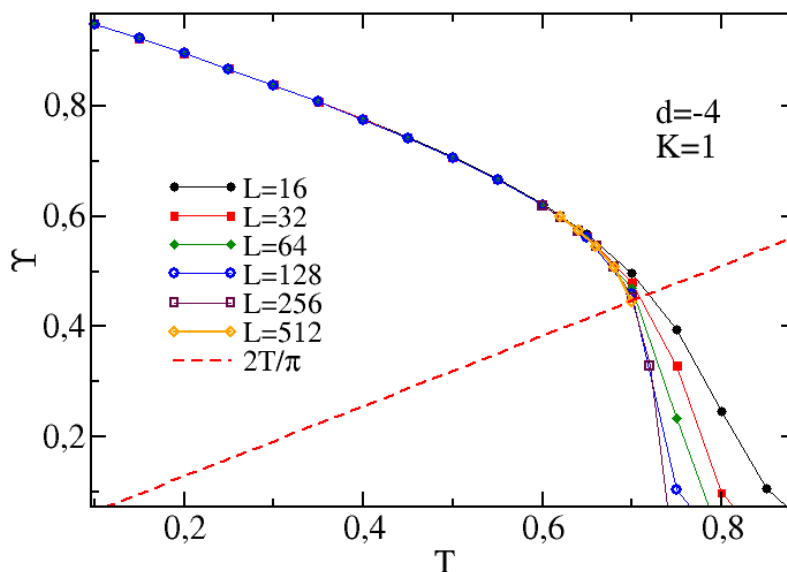


Figura 4.4: Curva do módulo da helicidade como função da temperatura para $K = 1$, $d = -4$ e redes de tamanho variando de $L = 16$ a $L = 512$. O cruzamento do módulo da helicidade com a reta $2T/\pi$ define a temperatura de transição.

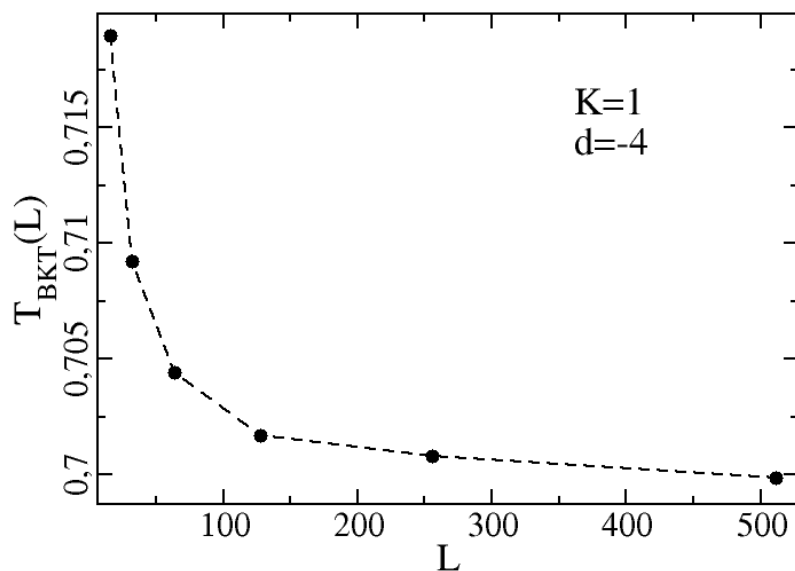


Figura 4.5: Curva das Temperatura de transição BKT (T_{BKT}) como função do tamanho da rede L obtida do módulo da helicidade para $K = 1$ e $d = -4$.

A Figura 4.4 mostra o módulo da helicidade como função da temperatura para o campo cristalino $d = -4$ e tamanhos de rede $L = 16, L = 32, L = 64, L = 128, L = 256$ e $L = 512$.

Ignorando o termo de correção de escala logarítmica da Eq. (4.12) pode-se estimar a temperatura de transição através do cruzamento das curvas do módulo da helicidade com reta $2T/\pi$. Observe que a temperatura de transição obtida desse modo depende do tamanho da rede L . Na Figura 4.5 está apresentada a temperatura BKT como função de L . Como a diferença entre as temperaturas $T_{BKT}(L)$ decai rapidamente alguns pesquisadores assumem o $T_{BKT}(L)$ como uma boa estimativa para a temperatura de transição BKT [119, 37]. Pode-se observar que a diferença entre as temperaturas de transição $T_{BKT}(L = 256) = 0,7008$ e $T_{BKT}(L = 512) = 0,69984$ é de apenas 0,00096. Assim, uma estimativa para a temperatura de transição obtida por esse método é $T_{BKT} = 0,700(1)$.

Susceptibilidade magnética

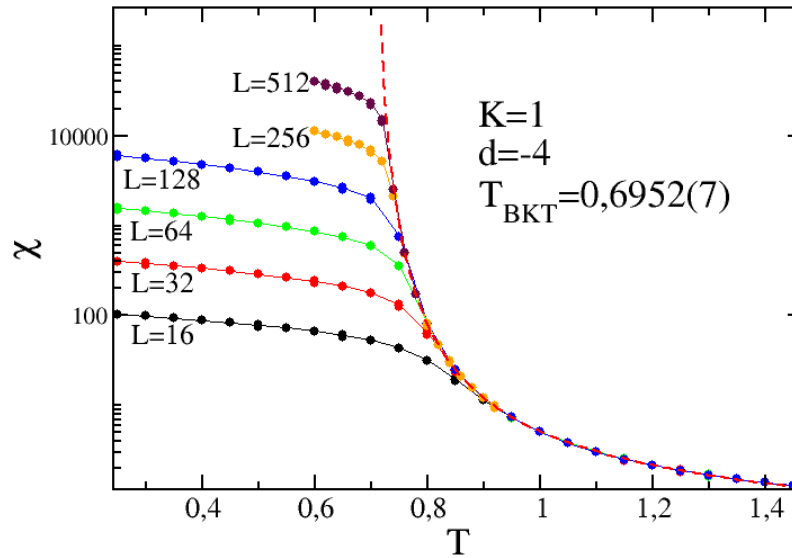


Figura 4.6: Curva de χ como função da temperatura para $K = 1$, $d = -4$ e redes de tamanho variando de $L = 16$ a $L = 512$. Os pontos são resultados da simulação Monte Carlo, a linha cheia é uma guia para os olhos e a linha tracejada é uma extrapolação usando a Eq. (4.9).

A Figura 4.6 mostra a curva de χ como função da temperatura para o campo $d = -4$ e tamanhos de rede $L = 16, L = 32, L = 64, L = 128, L = 256$ e $L = 512$. Nela observa-se o efeito do tamanho finito do sistema na curva de susceptibilidade. Para baixas temperaturas a susceptibilidade apresenta uma forte dependência com o aumento do tamanho da rede. Por outro lado, para altas temperatura as curvas para diferentes tamanhos de redes se colapsam. Ajustando a Eq. (4.9) aos pontos da Figura 4.6 encontra-se uma estimativa para temperatura de transição $T_{BKT} = 0,6952(7)$. Esse ajuste não-linear foi realizado utilizando o algoritmo de Levenberg-Marquardt [120, 121] e o algoritmo Nelder-Mead [120, 122], ambos disponíveis

na biblioteca matemática livre muParser como também em softwares livres como o programa Qtiplot.

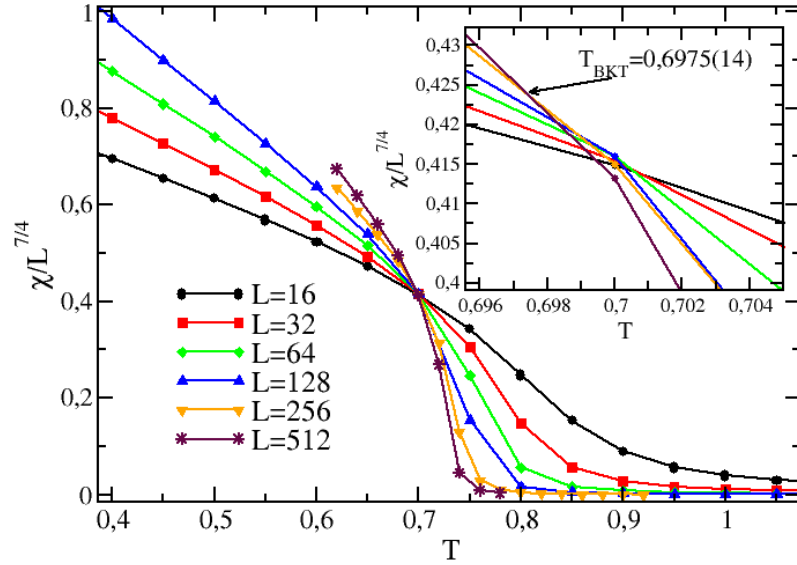


Figura 4.7: Curva de $\chi/L^{2-\eta}$ como função da temperatura, onde $\eta = 1/4$, $K = 1$, $d = -4$ e redes de tamanho variando de $L = 16$ a $L = 512$. Os pontos são resultado da simulação Monte Carlo, as linhas são guias para os olhos. O detalhe mostra o efeito de escala de tamanho finito.

Ignorando o termo de correção de escala logarítmica Eq. (4.11), ou seja, tomando $Q = 0$, pode-se obter uma estimativa para a temperatura BKT do sistema pelo cruzamento das curvas de $\chi/L^{2-\eta} \times T$ para diferentes tamanhos de rede. Esse procedimento está apresentado na Figura 4.7. Observa-se no destaque dessa figura que as curvas não se cruzam em um único ponto, isso ocorre devido a ausência do termo de correção logarítmica. Por outro lado, a dependência de $\chi/L^{2-\eta}$ com o tamanho da rede no ponto BKT é muito pequena. Assim, a temperatura de transição foi estimada do cruzamento das curvas para as duas maiores redes $L = 256$ e $L = 512$ resultando em $T_{BKT} = 0,6975(14)$.

Diagrama de transição fase

Para traçar o diagrama de transição do modelo XY-VBEG é necessário encontrar a linha de transição BKT e a linha de transição de primeira ordem. A linha BKT foi obtida estimando a temperatura BKT para um valor fixo do campo d e repetindo o procedimento para diferentes valores do campo d . Nas subseções anteriores apresentou-se três técnicas para estimar a temperatura de transição BKT para o campo $d = -4$. Primeiramente usando o módulo da helicidade Eq. (4.12) onde se obteve $T_{BKT} = 0,700(1)$, em seguida com o ajuste da susceptibilidade dado

pela Eq. (4.9) obtendo-se $T_{BKT} = 0,6952(7)$ e por último com a lei de escala dada pela Eq. (4.10), que resultou em $T_{BKT} = 0,6975(14)$. Na literatura, encontra-se os trabalhos de Cucoli e colaboradores [110] que obtiveram $T_{BKT} = 0,695(1)$ usando a Eq. (4.9) com rede de até $L = 256$, de Evertz e Landau [123] que encontraram $T_{BKT} = 0,700(5)$ usando uma relação de escala e redes de até $L = 192$ e de Wysin [124] que obteve $T_{BKT} = 0,699(1)$ usando a relação de escala da Eq. (4.10) e redes de até $L = 128$. Nota-se que todas as técnicas são equivalentes e geram temperaturas muito próximas. Contudo, a técnica de estimar a temperatura usando a relação de escala é mais simples, pois permite obter uma boa estimativa para T_{BKT} mesmo usando redes pequenas. Usando a lei de escala também é possível fixar a temperatura e variar o campo, visto que a Eq. (4.10) não depende de T , mas apenas de L . Na região próxima ao ponto BKT terminal é necessário fixar a temperatura e variar o campo d devido a inclinação da curva. Diante do exposto, nesse trabalho utilizou-se a técnica da lei de escala da Eq. (4.10) para obter a linha de transição BKT do diagrama de transição de fase. Outras análises realizadas na rede triangular (Sec. 4.2.3) acrescentam argumentos para essa escolha.

A linha de primeira ordem foi obtida fixando a temperatura T e observando a histerese na curva da concentração de ^3He como função do campo (Fig.4.2) como também na curva de susceptibilidade como função do campo. Esse procedimento foi repetido para diferentes temperaturas.

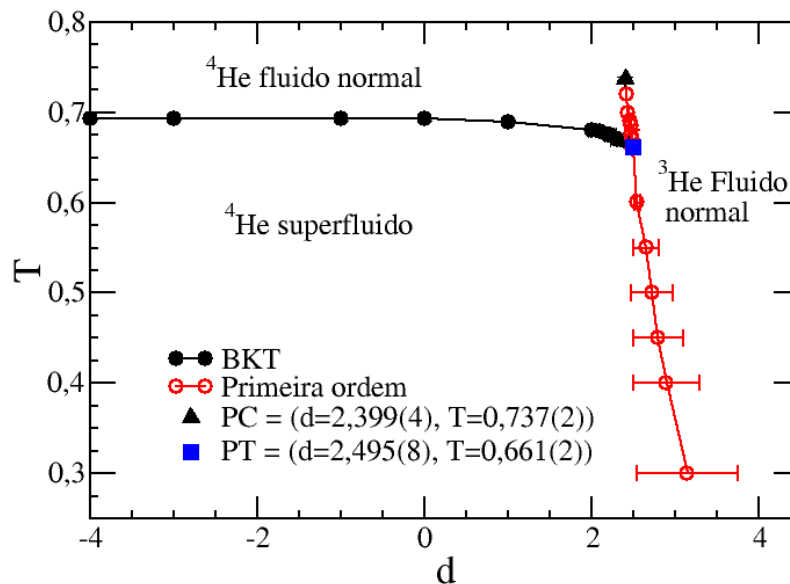


Figura 4.8: Diagrama de fase no plano temperatura vs. campo cristalino reduzido para o modelo com $K = 1$ numa rede quadrada. Os círculos cheios indicam a transição BKT e os abertos indicam a transição de primeira ordem. O triângulo cheio e o quadrado representam o ponto crítico simples e o ponto BKT terminal, respectivamente.

O diagrama de transição de fase obtido está apresentado na Figura 4.8. Ele apresenta uma linha de transição BKT que separa a fase rica em ^4He superfluido da fase rica em ^4He fluido normal. A linha BKT termina em uma linha de primeira ordem num ponto BKT terminal localizado em $T_{PT} = 0,661(2)$ e $d_{PT} = 2,495(8)$. A linha de primeira ordem marca a coexistência das fases rica em ^4He e rica em ^3He . Essa linha termina em um ponto crítico simples localizado em $T_{PC} = 0,737(2)$ e $d_{PC} = 2,399(4)$.

Na Figura 4.9 está apresentado o diagrama de coexistência no planos T/T_{BKT}^0 versus concentração de ^3He , onde T_{BKT}^0 é a temperatura de transição BKT para $q = 0$, ou seja d tendendo a $-\infty$. Em $d = -4$ o sistema apresenta a concentração de ^3He muito próxima de zero no ponto de transição, por isso considerou-se $T_{BKT}^0 = T_{BKT}(d = -4) = 0,6975(14)$. Nessa figura está apresentado também o diagrama relatado por Cardy e Scalapino [24] para o modelo VBEG na versão rotor planar. Eles utilizaram a técnica de renormalização Migdal-Kadanoff. Observa-se que o diagrama obtido apresenta a área da região de coexistência maior que a área do diagrama apresentado por Cardy e Scalapino. Por outro lado, a área da fase superfluida do diagrama de Cardy e Scalapino é muito maior que do diagrama encontrado neste trabalho. A concentração no ponto BKT terminal obtido neste trabalho para rede quadrada foi de $q_{PT} = 0,020(5)$ e enquanto o resultado de Cardy e Scalapino foi de $q_{PT} = 0,18(1)$.

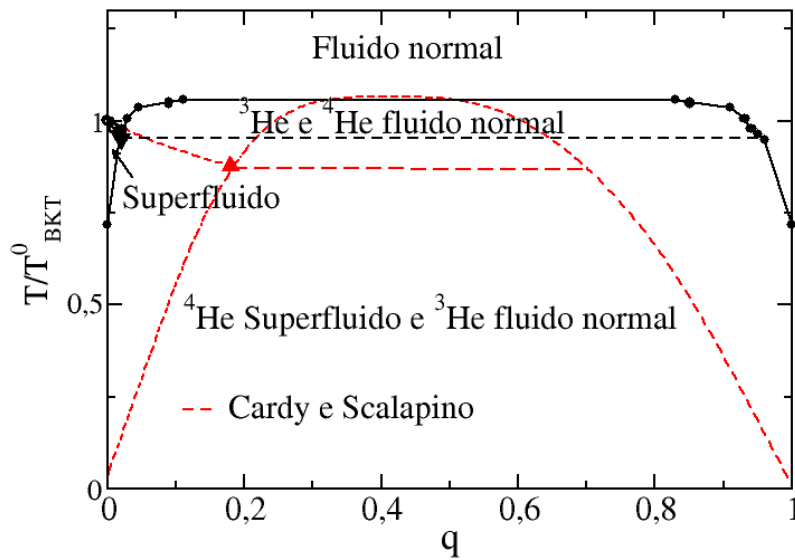


Figura 4.9: Diagrama de coexistência no plano T/T_{BKT}^0 versus concentração de ^3He . Os círculos cheios indicam resultado da simulação Monte Carlo (as linhas cheias são apenas guia para os olhos). A linha pontilhada mostra o resultado obtido por Cardy e Scalapino [24] para o modelo rotor planar (RP).

4.2.2 Rede quadrada e $K = 0$

Concentração de ^3He .

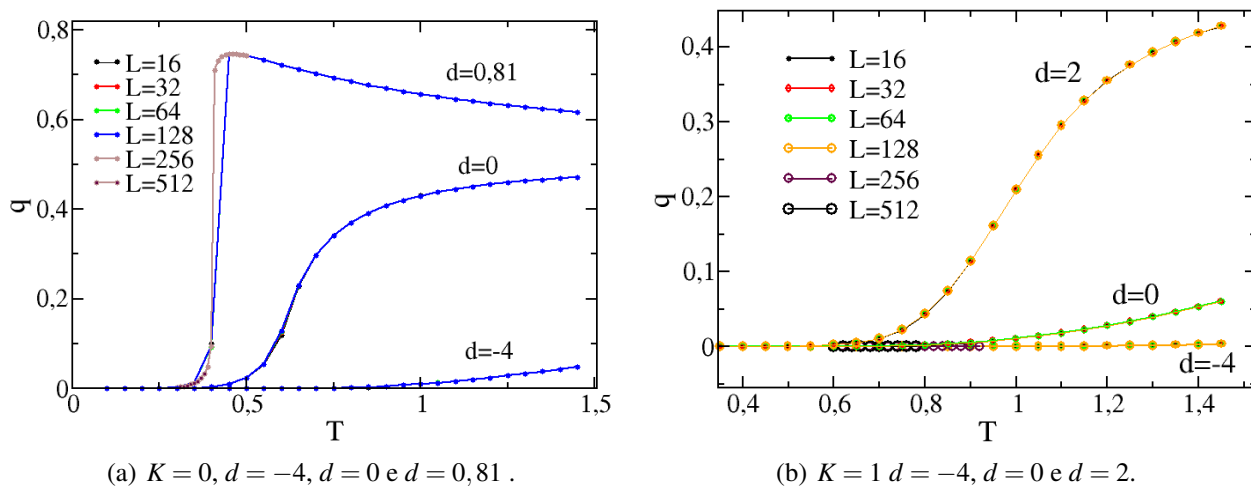


Figura 4.10: Curva da concentração de ^3He q como função da temperatura para redes de tamanho variando de $L = 16$ a $L = 512$.

A Figura 4.10 mostra a concentração de ^3He como função da temperatura para diferentes tamanhos de rede. A Figura 4.10(b) é a mesma Figura 4.1 que já foi discutida na seção anterior e foi reproduzida aqui para facilitar a comparação com a Figura 4.10(a). Observa-se nessa figura que a concentração de ^3He para baixas temperaturas é próxima de zero e independente do valor K para os valores de d considerados. A concentração de ^3He próxima da transição BKT apresenta uma grande variação para $K = 0$, $d = -4$ e $d = 0$ o que não acontece para $K = 1$. Nota-se que para $K = 0$ e $d = 0,81$ o sistema apresenta uma variação brusca na concentração de ^3He , o que revela proximidade a região de transição de primeira ordem.

Calor específico

A Figura 4.11 mostra o calor específico c como função da temperatura T , e tamanhos de redes $L = 16$, $L = 32$, $L = 64$, $L = 128$, $L = 256$ e $L = 512$. Observa-se que para $K = 0$ o pico do calor específico cresce com o campo d , efeito esse relacionado com a inclinação da curva de concentração de ^3He . Apesar das curvas de calor específico para $K = 0$ diferirem das curvas para $K = 1$, o comportamento de ambas está relacionado com a variação da concentração de ^3He no sistema.

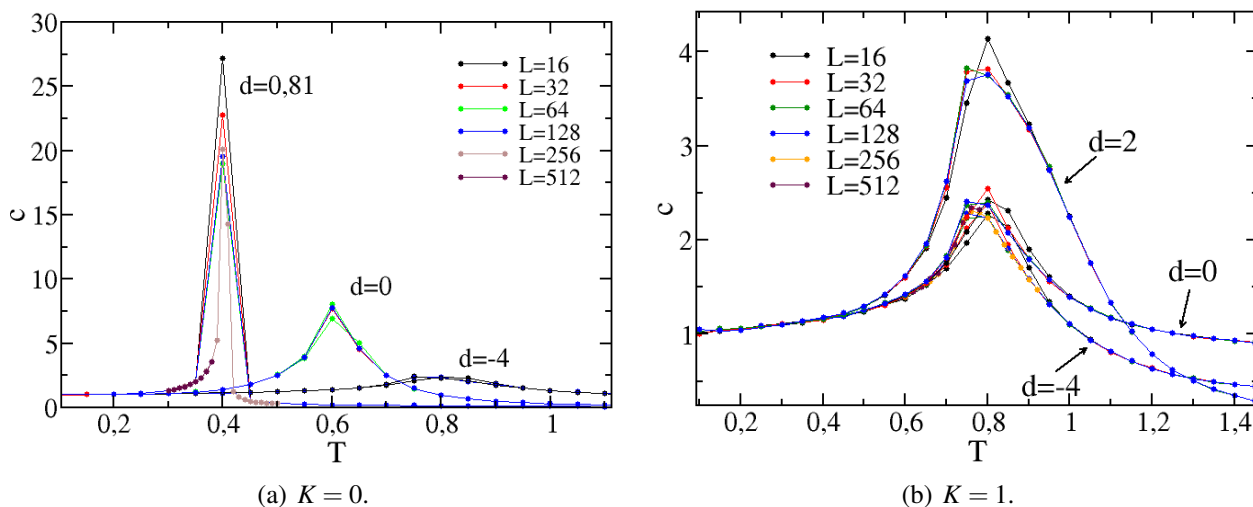


Figura 4.11: Curva da concentração de ^3He q como função da temperatura para $d = -4$, $d = 0$ e $d = 0,81$ e redes de tamanho variando de $L = 16$ a $L = 512$.

Diagrama de transição fase

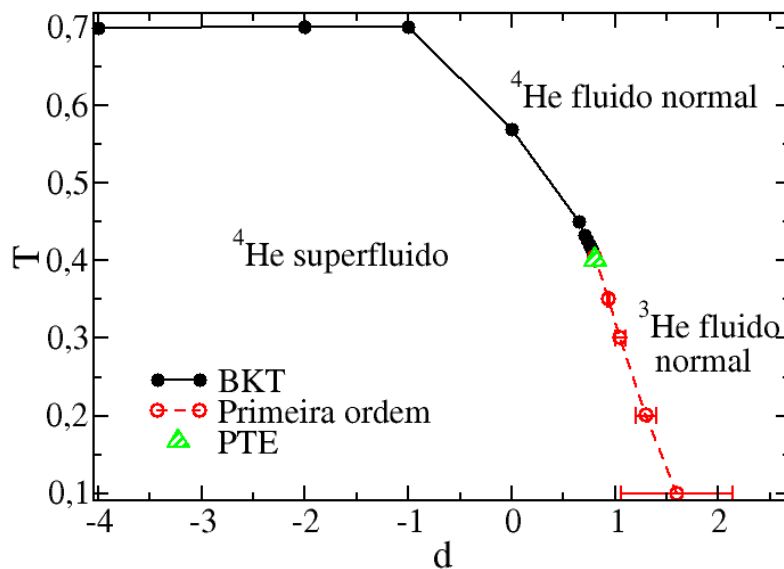


Figura 4.12: Diagrama de fase no plano temperatura vs. campo cristalino reduzido para o modelo com $K = 0$ numa rede quadrada. Os círculos cheios indicam a transição BKT e os abertos indicam a transição de primeira ordem. O triângulo indica o ponto tricrítico efetivo (PTE).

Na Figura 4.12 está apresentado o diagrama de transição de fase do modelo VBEG para $K = 0$ no plano $T \times d$. Os pontos de primeira ordem foram obtidos da curva de histerese

da concentração de ^3He . A linha de transição BKT foi obtida usando a Lei de escala Eq. (4.10). Esse diagrama apresenta um aparente ponto tricrítico localizado em $T = 0,401(2)$ $d = 0,810(2)$. Resultado semelhante foi recentemente apresentado por Dillon e colaboradores para o modelo VBEG na versão rotor planar. Eles localizaram um ponto tricrítico em $T = 0,40(2)$ e $d = 1,15(5)$.

Na Figura 4.13 está apresentado o diagrama de fase obtido neste trabalho comparado como o diagrama de fase relatado por Dillon e colaboradores e com alguns pontos apresentados por Garcia e Chan [125] no plano T/T_{BKT}^0 versus campo cristalino. Para o modelo rotor planar na rede quadrada a temperatura de transição BKT em $q = 0$, ou seja para $d \rightarrow -\infty$, é de $T_{BKT}^0 = 0,8921(1)$ [116], enquanto para o modelo XY-VBEG a temperatura é de $T_{BKT}^0 = 0,695(1)$. As curvas, apesar de serem modelos diferentes, encontram-se muito próximas, exceto no ponto $d = 1$.

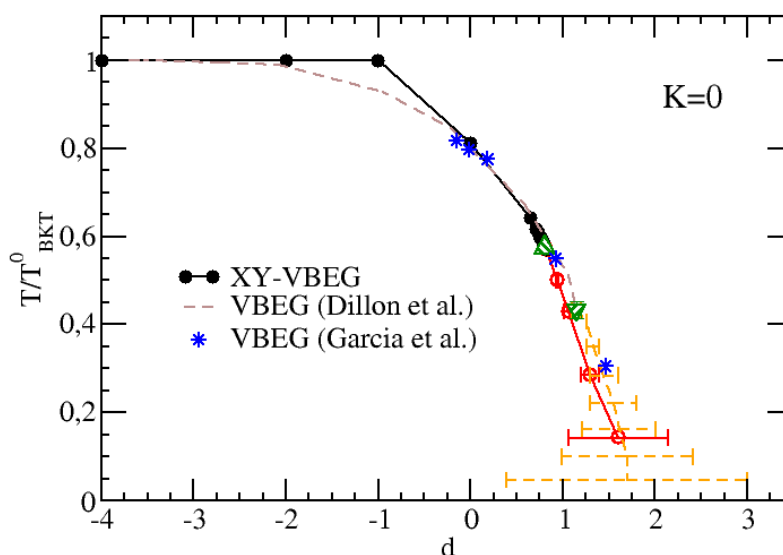


Figura 4.13: Diagrama de fase no plano T/T_{BKT}^0 versus campo cristalino, para $K = 0$ numa rede quadrada. Os círculos cheios são resultados da simulação para o modelo XV-VBEG, a linha tracejada é o resultado para o modelo VBEG apresentado por Dillon e colaboradores [119]. As estrelas são resultados do modelo VBEG apresentado por Garcia e colaboradores [125]. O triângulo e quadrado marcam o ponto tricrítico efetivo (PTE) do modelo XY-VBEG e do VBEG respectivamente.

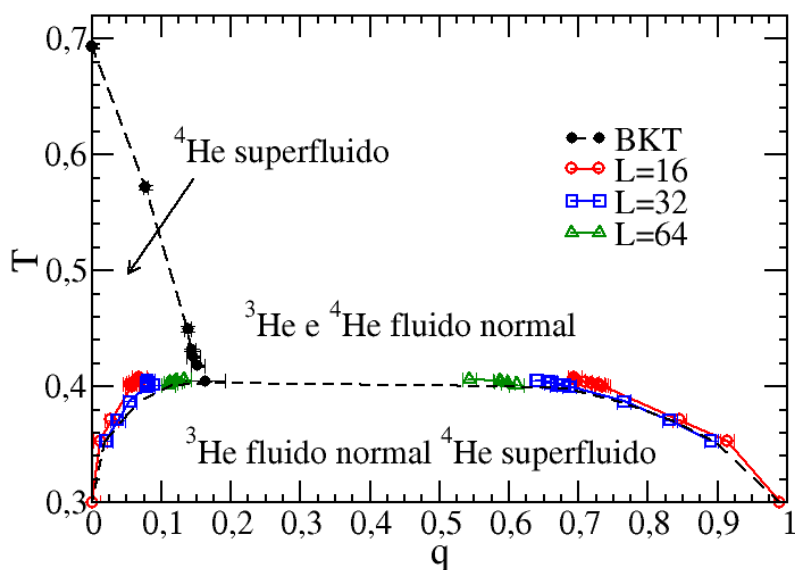


Figura 4.14: Diagrama de coexistência no plano T versus concentração de ^3He . Os círculos cheios indicam resultado da simulação Monte Carlo e as linhas são apenas guia para os olhos.

Na Figura 4.14 está apresentado o diagrama de coexistência no planos T versus concentração de ^3He . Esse diagrama difere qualitativamente do diagrama apresentado para $K = 1$. Pode-se observar que a área correspondente a região super fluida é maior.

Apesar de se observar no diagrama um aparente ponto tricrítico, Berker e Nelson em seu trabalho não conseguiram localizar um ponto tricrítico fixo e sim um ponto crítico isolado (PC) e um ponto BKT terminal (PT) muito próximos. Eles o denominaram de ponto tricrítico efetivo (PTE). Essa denominação será utilizada também neste trabalho. Afim de estudar o ponto tricrítico efetivo com melhor precisão foi empregado a técnica do histograma descrita na Seção 2.6. Com esta técnica foi possível localizar com melhor precisão a temperatura de transição BKT e a transição de primeira ordem. Para estimar os pontos de transição de primeira ordem também foi utilizado a distribuição de probabilidade da concentração de ^3He .

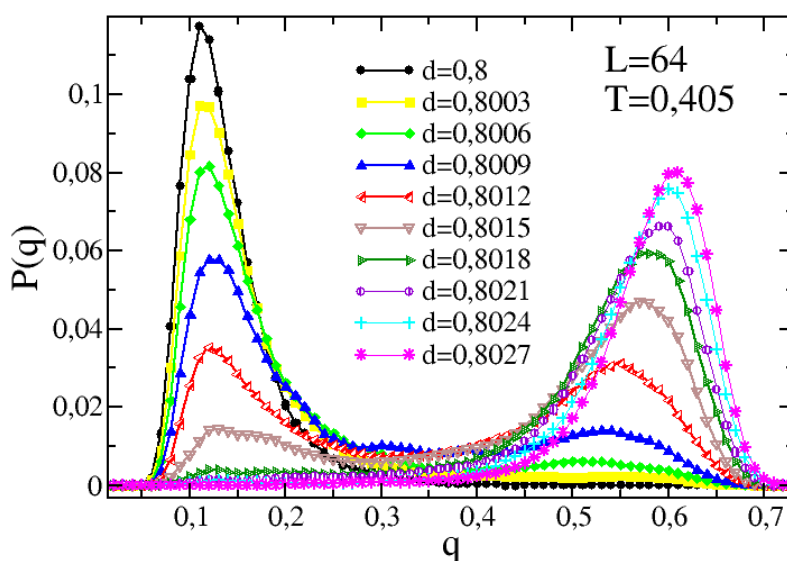


Figura 4.15: Curva da distribuição de probabilidade da concentração de ${}^3\text{He}$ $P(q)$ para rede de tamanho $L = 64$, temperatura $t = 0,405$ e uma série de campos d próximo ao ponto de transição de primeira ordem. As linhas são apenas guias para os olhos.

Na Figura 4.15 está apresentada a distribuição de probabilidade da concentração de ${}^3\text{He}$ como função da concentração $P(q)$ para um sistema de tamanho linear $L = 64$, na temperatura $T = 0,405$ e para diferentes valores do campo d . O objetivo dessa figura é ilustrar o método de obtenção do ponto de transição de primeira ordem. Observa-se na figura que a curva de distribuição de probabilidade para $d = 0,8$ apresenta um único pico localizado em $q = 0,11(1)$, indicando que em $T = 0,405$ e $d = 0,8$ o sistema está numa fase pobre em ${}^3\text{He}$ e rica em ${}^4\text{He}$. Em $d = 0,8027$ há a situação oposta, ou seja, o sistema se encontra numa fase rica em ${}^3\text{He}$ e pobre em ${}^4\text{He}$. Para os valores de campo cristalino intermediário, ao invés do deslocamento do pico de um ponto de baixa concentração ${}^3\text{He}$ para um ponto de alta concentração de ${}^3\text{He}$, há o surgimento de dois picos com intensidades diferentes até que no ponto $T = 0,405$ $d = 0,8012$ a distribuição de probabilidade apresenta dois picos de mesma intensidade. Nesse ponto o sistema apresenta duas fases igualmente prováveis, uma de baixa concentração de ${}^3\text{He}$ e um de alta concentração de ${}^3\text{He}$. Essa curva indica que $T_c = 0,405$ e $d_c = 0,8012(3)$ é um ponto de coexistência de fase para rede tamanho $L = 64$ [126]. No entanto, para encontrar a coexistência de fase no limite termodinâmico é necessário realizar o mesmo procedimento para redes de diferentes tamanhos e utilizar a teoria de escala de tamanho finito. Assim, foi fixado a temperatura em $T = 0,405$ e buscou-se o campo $d_c(L)$ que igualasse os picos nas curvas de $P(q)$ para diferentes tamanhos de rede L . A Figura 4.16 ilustra o procedimento descrito, onde estão apresentados as curvas de $P(q)$ para redes de tamanho $L = 16$, $L = 32$, $L = 64$ e $L = 128$.

Nessa figura observa-se que o aumento no tamanho da rede tende a formar um único pico na curva de distribuição de probabilidade. Esse fato indica que não há coexistência de fase no limite termodinâmico para $T = 0,405$. Em outras palavras, a linha de primeira ordem no limite termodinâmico não ultrapassa a temperatura $T = 0,405$.

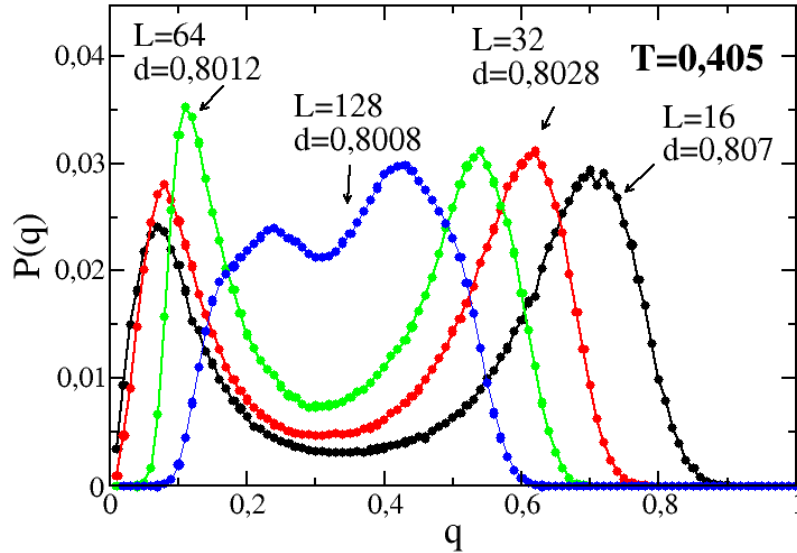


Figura 4.16: Curva da distribuição de probabilidade da concentração de ${}^3\text{He}$ $P(q)$ para temperatura $T = 0,405$, e diferentes tamanhos de rede. As linhas são apenas guias para os olhos.

O mesmo procedimento foi realizado em diferentes temperaturas. A Figura 4.17 ilustra o comportamento de $P(q)$ nas temperatura $T = 0,401$ (Figura 4.17(a)) e $T = 0,402$ (Figura 4.17(b)). Observa-se nessa figura que não há tendência dos dois picos desaparecerem com o aumento do tamanho da rede. Nota-se também que para cada valor de L há um valor de campo $d_c(L)$ para o qual a intensidade dos picos da distribuição de probabilidade se tornam iguais.

Uma vez que na transição de primeira ordem as quantidades escalam com a dimensão do sistema, foi possível obter o valor d_c no limite termodinâmico através da extrapolação do ajuste linear dos pontos da curva $d_c(L) \times L^{-2}$ como está ilustrado na Figura 4.18.

A transição BKT foi localizada com melhor precisão fixando a temperatura e variando o campo cristalino d com a ajuda da técnica do histograma multidimensional. A Figura 4.19 ilustra o ponto de transição BKT fixando a temperatura em $T = 0,402$ e variando o campo d para diferentes tamanhos de rede L . Nessa figura pode-se observar que há uma relação de escala. Isso ocorre porque foi negligenciado o termo de correção de escala logarítmica Eq. (4.11). No entanto, observa-se que a correção de escala é muito pequena, ficando na quarta casa decimal. Usando os valores de $\chi(L)$ no ponto de cruzamento das duas maiores redes ou seja $T = 0,402$

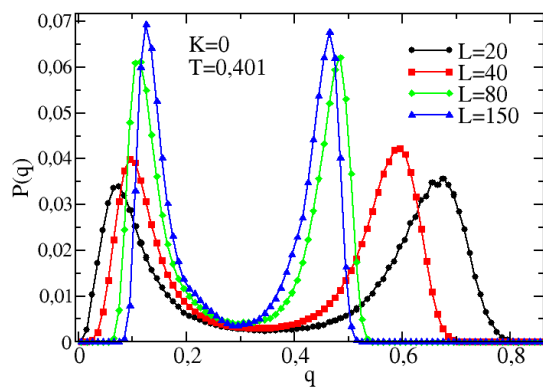
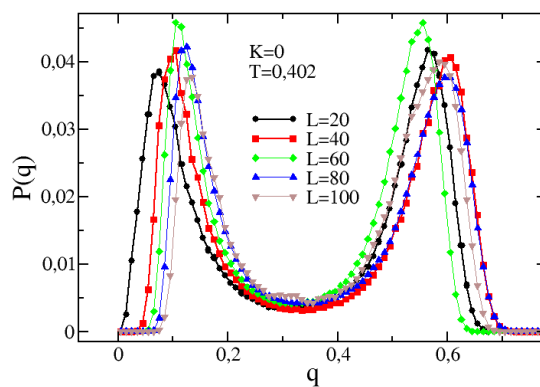
(a) Temperatura $T = 0,401$ (b) Temperatura $T = 0,402$.

Figura 4.17: Curva da distribuição de probabilidade da concentração de ^3He $P(q)$ para rede de diferentes tamanhos. As linhas são apenas guias para os olhos.

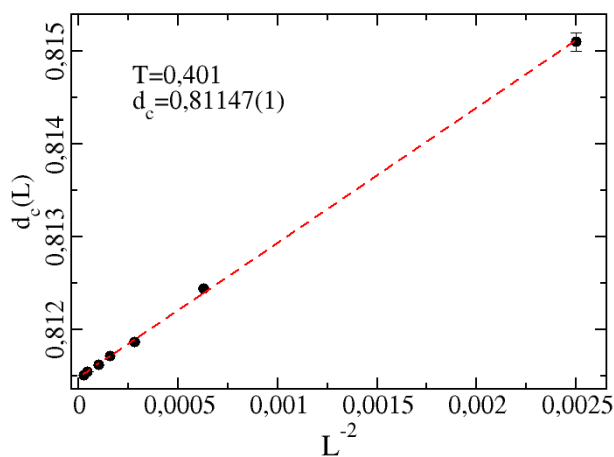
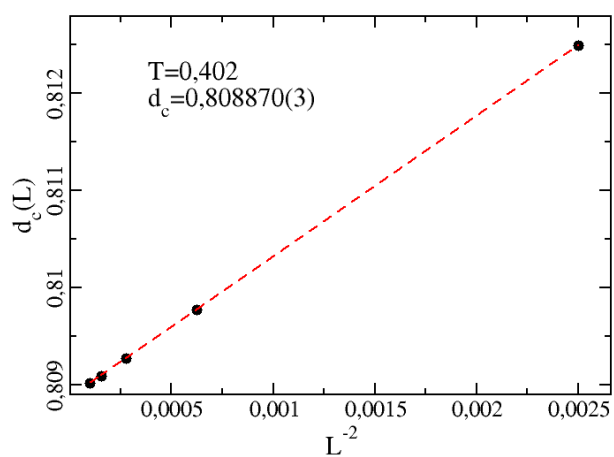
(a) Temperatura $T = 0,401$ (b) Temperatura $T = 0,402$.

Figura 4.18: Curva do campo $d_c(L)$ como função do L^{-2} , onde os pontos são resultado das simulação e a linha pontilhada é um ajuste linear.

e $d = 0,8087$ é possível obter um ajuste da Eq. (4.10) com o termo de correção de escala aos pontos da simulação como está ilustrado na Figura 4.20.

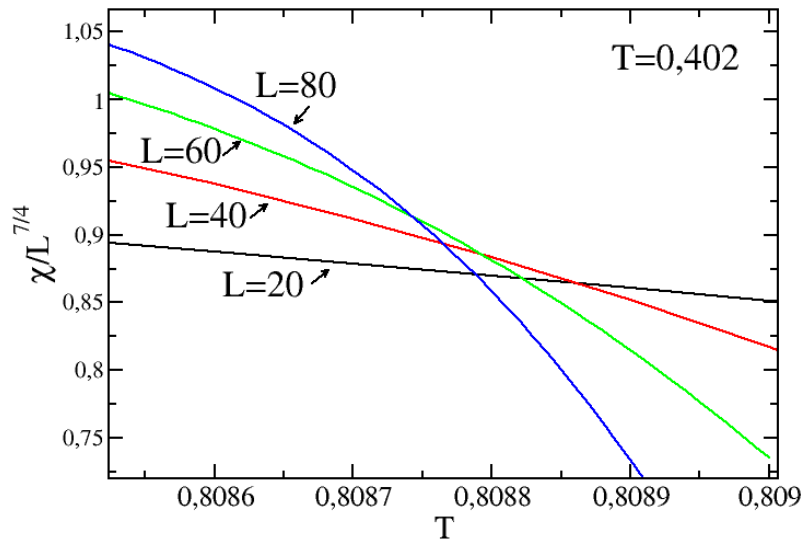


Figura 4.19: Curva de $\chi/L^{7/4}$ como função da temperatura para diferentes tamanhos de rede.

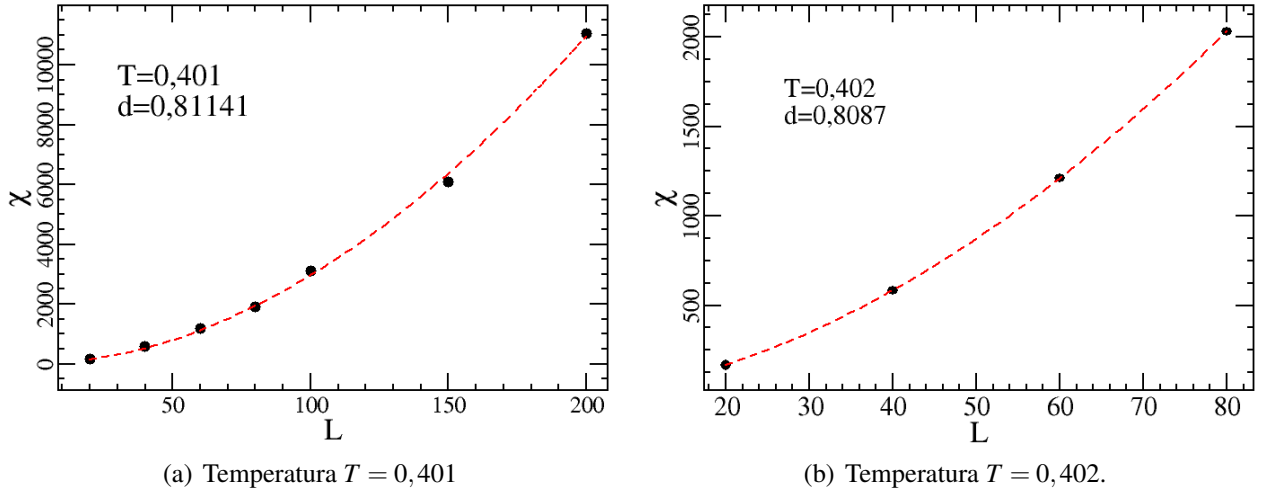


Figura 4.20: Ajuste do ponto de transição BKT.

Os pontos de transição de primeira ordem e os pontos de transição BKT obtidos com melhor precisão estão apresentados na Figura 4.21, onde se observa com melhor clareza a região do ponto tricrítico efetivo. No diagrama, a linha de primeira ordem para rede de tamanho $L = 16$ encontra-se afastada da linha de transição BKT. Com o aumento do tamanho da rede L as linhas de primeira ordem se aproximam da linha de transição BKT. No limite termodinâmico as linhas de primeira ordem e BKT quase se sobrepõem. Pode-se observar também que a distância do ponto

BKT terminal e do ponto crítico simples é de aproximadamente 0,05. Esse resultado é muito semelhante ao apresentado por Berker e Nelson reproduzido na Figura 4.22, onde é possível observar que a distância entre o ponto BKT terminal e do ponto crítico simples também é de aproximadamente 0,05. Como Berker e Nelson utilizaram rede triangular e uma versão rotor planar do modelo VBEG a localização dos pontos críticos são diferente da encontrada neste trabalho. Contudo, o fato da rede ser triangular não deve alterar a topologia do diagrama de fase, como será visto na próxima subseção.

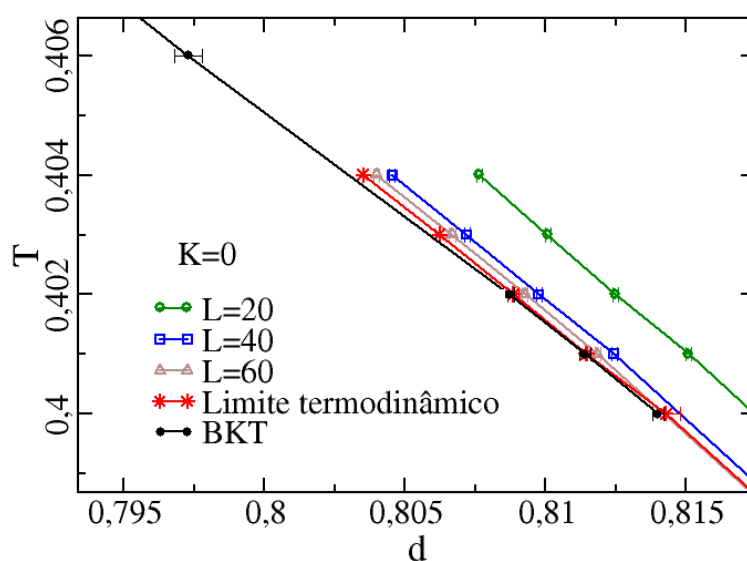


Figura 4.21: Detalhe da região do ponto tricrítico efetivo do diagrama de fase no plano temperatura vs. campo cristalino reduzido para o modelo com $K = 0$ numa rede quadrada.

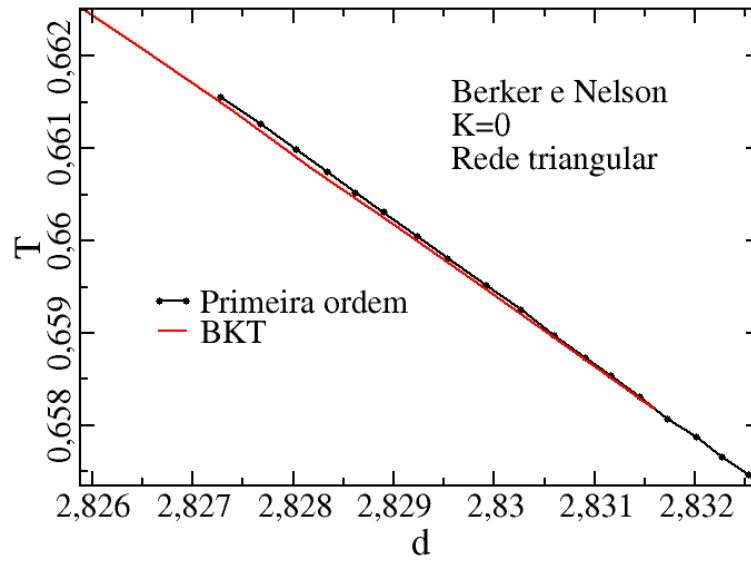


Figura 4.22: Detalhe da região do ponto tricrítico efetivo no plano T vs. d do modelo VBEG com $K = 0$ numa rede triangular retirado do trabalho de Berker e Nelson [23].

4.2.3 Rede triangular e $K = 1$

Magnetização

Uma característica da transição BKT em sistemas finitos é a magnetização [89], embora não haja quebra de simetria no modelo XY 2D a função de correlação decai muito lentamente com a distância, o que garante uma magnetização mensurável em sistemas finitos. Essa magnetização apresenta um aparente expoente crítico universal $\beta = 0,23$ observáveis experimentalmente em diferentes materiais magnéticos que se assemelham ao modelo XY [90]. A magnetização também determina uma temperatura de Curie efetiva do sistema finito $T_m(L)$ que tende para T_{BKT} quando a rede tende a infinito seguindo a lei logarítmica

$$T_m(L) \approx T_{BKT} + \frac{\pi^2}{4c(\ln L)^2}. \quad (4.15)$$

A magnetização foi estudada nesse modelo não com a finalidade de comparar com alguma quantidade mensurável do problema de misturas de ^3He - ^4He , mas se investigou o expoente crítico β e a temperatura T_m , a fim de verificar se todas as propriedades da transição BKT foram conservadas mesmo diante da existência de impurezas de ^3He na transição. A curva da magnetização e os expoentes críticos estão ilustrado na Figura 4.23. O expoente β mostrou-se independente do tamanho da rede. O ajuste dos pontos $T_m(L)$ está apresentado na Figura 4.24. A temperatura T_{BKT} obtida da magnetização não se aproximou muito da encontrada por outros

métodos devido à dificuldade de se encontrar com exatidão a temperatura $T_m(L)$ e também porque os tamanhos de redes utilizados foram pequenos para a aproximação utilizada. Também a Eq. (4.15) tem validade garantida pela teoria de grupo de renormalização somente para temperaturas muito próxima da temperatura BKT [84] o que só pode ser alcançada com redes acima de $L = 1024$. O expoente β se mostrou independente também do campo, como ilustrado na Figura 4.25

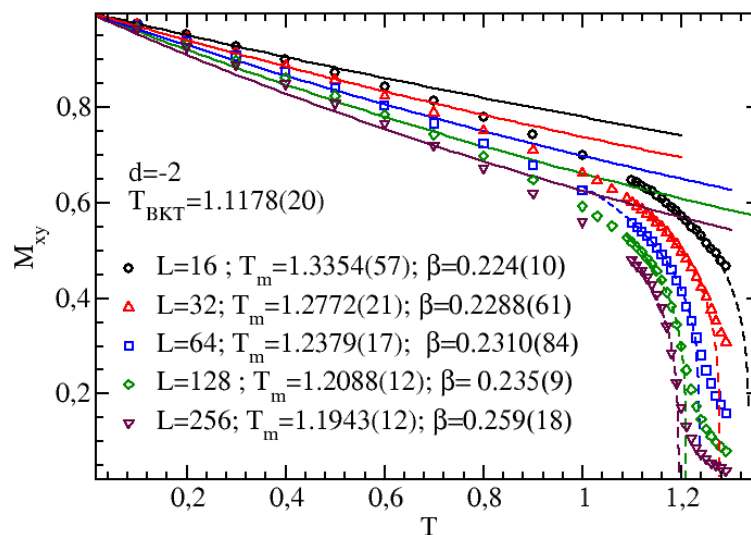


Figura 4.23: Magnetização no plano como função da temperatura para diferentes tamanhos de rede e campo $d = -2$, onde os pontos são o resultados da simulação, a linha tracejada é um ajuste de uma lei de potência e a linha cheia é o resultado exato da Eq. (4.4).

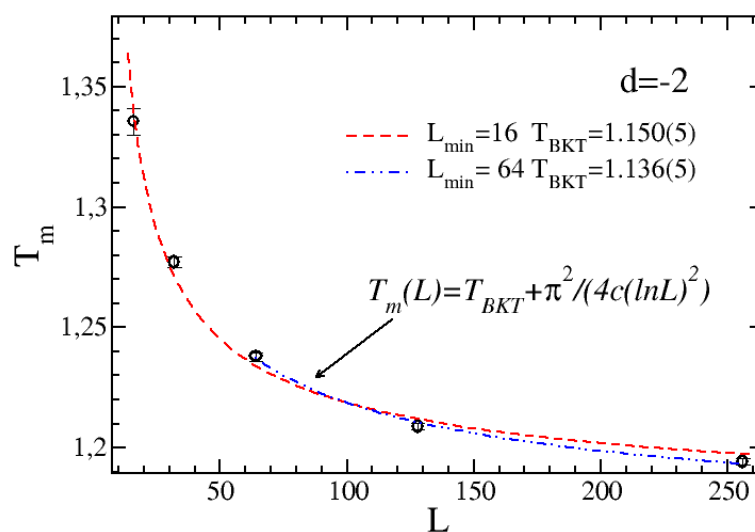


Figura 4.24: Curva da temperatura crítica $T(L) \times L$, onde os pontos são o resultado do ajuste na magnetização e a linha tracejada é o resultado do ajuste utilizando a Eq. (4.15) em dois intervalos diferentes.

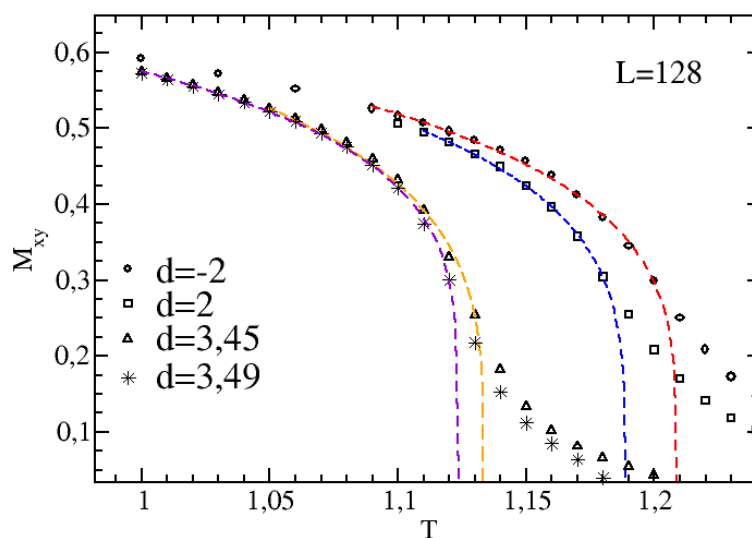


Figura 4.25: Magnetização no plano como função da temperatura para diferentes valores de campos cristalino, onde os pontos são os resultados da simulação, a linha tracejada é um ajuste de uma lei de potência.

Susceptibilidade magnética

O comportamento característico do XY-VBEG está ilustrado mais uma vez na Figura 4.26 na qual se observa a susceptibilidade como função da temperatura para diferentes valores de tamanho de rede L e campo d . Nota-se que para altas temperaturas a susceptibilidade independe

do tamanho da rede L . Para baixas temperaturas, por outro lado, o sistema independe do campo d para um dado valor do tamanho L . O comportamento que é dependente simultaneamente de d e L somente aparece próximo da transição BKT. Nota-se que a curva apresenta a mesma característica que a apresentada na rede quadrada.

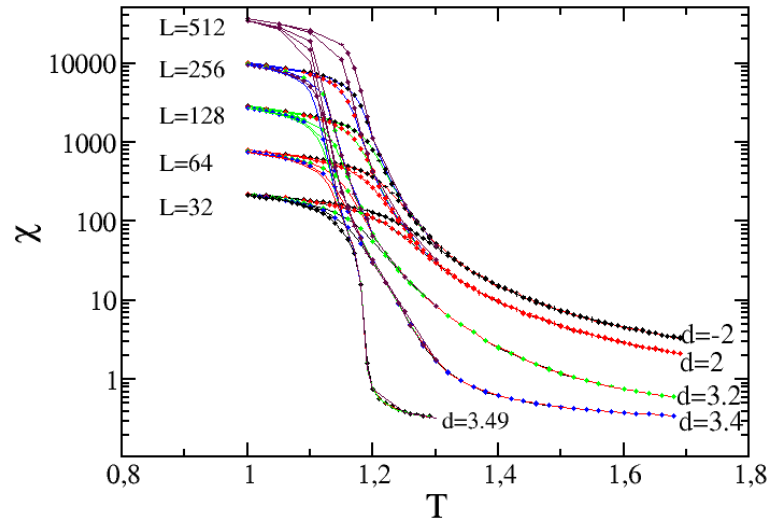


Figura 4.26: Logaritmo da susceptibilidade como função da temperatura para tamanhos de redes variando $L = 32$ a $L = 512$ e diferentes valores de campo cristalino reduzido d . Os pontos são resultados da simulação e as linhas cheias são guias para os olhos.

Como apresentado na seção anterior, a temperatura de transição BKT pode ser obtida realizando um ajuste dos pontos da susceptibilidade para $T > T_{BKT}$ utilizando a Eq. (4.9). Na Figura 4.27 está um exemplo mais completo para diferentes valores do campo d . Os pontos utilizados nesse ajuste são a média dos valores obtidos em diferentes tamanhos de redes, contudo nas vizinhanças de T_{BKT} a média é somente sobre as redes maiores de forma a minimizar o desvio padrão da média, bem como, minimizar o erro da regressão não-linear (χ^2/dof). Nesse ajuste foi utilizado o algoritmo de Levenberg-Marquardt [121] e o algoritmo de Nelder–Mead [122].

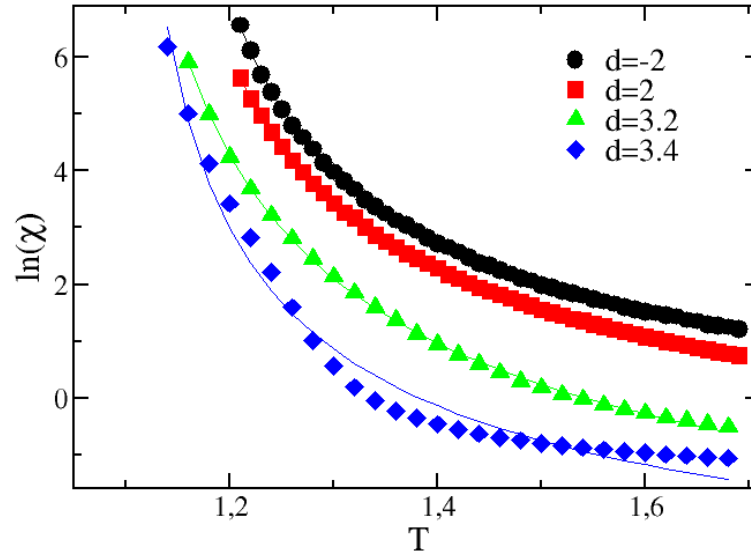


Figura 4.27: Ajuste do logaritmo da susceptibilidade com função da temperatura de acordo com a Eq. (4.9) para diferentes valores do potencial químico reduzido d . A linha cheia é o melhor ajuste BKT.

Como apresentado anteriormente (Sec. 4.2.1), o ajuste dos pontos da curva de susceptibilidade obtidos da simulação, Eq. (4.9), fornece uma boa estimativa para a temperatura T_{BKT} para $d = -4$. Entretanto, para alguns valores de campo cristalino próximos ao ponto BKT terminal a equação não fornece um ajuste satisfatório, como pode ser observado na Figura 4.27. Isso ocorre porque próximo da região do ponto BKT terminal a concentração de ${}^3\text{He}$ muda rapidamente com a temperatura para $T > T_{BKT}$. Nas Figuras 4.28 observa-se melhor esse comportamento, onde está apresentado a curva de concentração q e a susceptibilidade. Para temperaturas $T > T_{BKT}$ a concentração de ${}^3\text{He}$ cresce e provoca a redução da susceptibilidade. A linha tracejada ilustra o comportamento da susceptibilidade descrito pela Eq. 4.9 fixando a temperatura BKT. Essa temperatura foi obtida com a lei de escala dada pela Eq. (4.9).

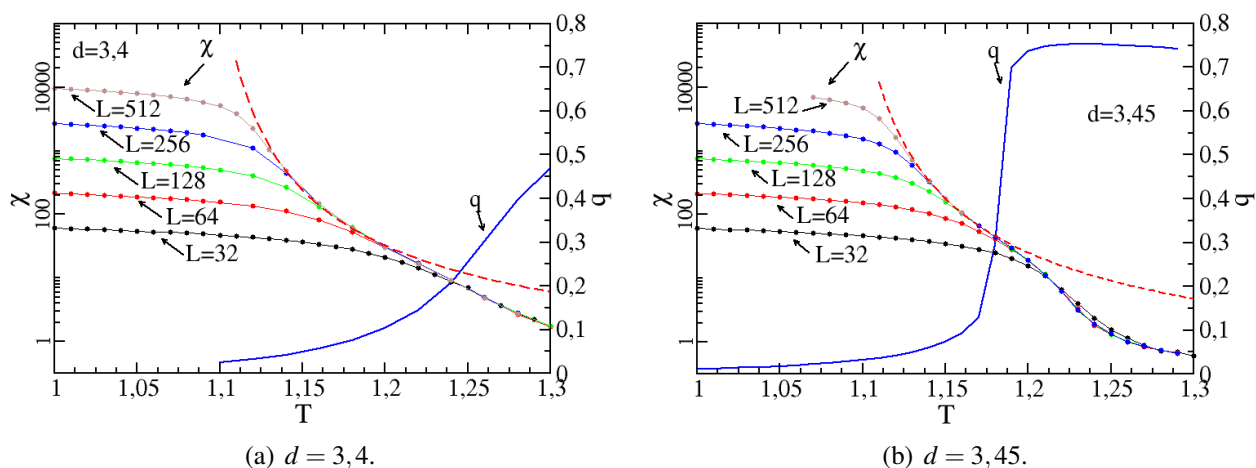


Figura 4.28: Curva da susceptibilidade e da concentração de ^3He como função da temperatura para redes de tamanho variando de $L = 16$ a $L = 512$.

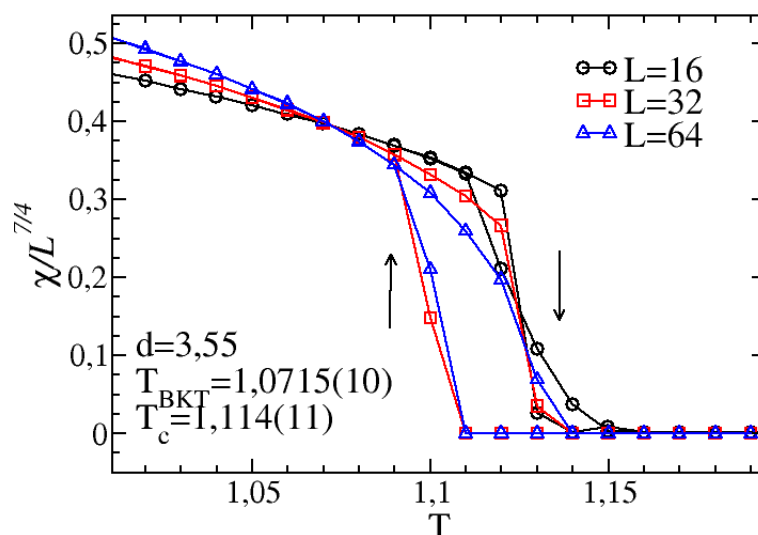


Figura 4.29: Curvas de $\chi/L^{2-\eta} \times T$ para diferentes valores de rede, e $d = 3,55$ incrementando e decrementando a temperatura. Os pontos são resultado da simulação e as linhas são guias para os olhos.

Na Figura 4.29 observa-se que além do cruzamento das curvas devido à transição BKT, há também uma histerese indicando um ponto de transição de primeira ordem. A presença de uma transição BKT e uma transição de primeira ordem indica a proximidade da curva ao ponto BKT terminal onde a linha de transição BKT é truncada pela linha de primeira ordem.

Concentração de ^3He e sua distribuição de probabilidade

Para obter a linha de transição de primeira ordem foi utilizado o mesmo procedimento utilizado na rede quadrada, ou seja, a histerese observada na curva de susceptibilidade e na concentração de ^3He . Da mesma forma que na rede quadrada, a histerese independe do tamanho da rede, conforme mostrado na Figura 4.30. A histerese fica mais larga com a redução da temperatura, tornando a precisão muito pequena. Dessa forma foi utilizada, nas proximidades do ponto BKT terminal e no ponto crítico simples, a distribuição de probabilidade da concentração de ^3He para localizar com melhor precisão a linha de primeira ordem.

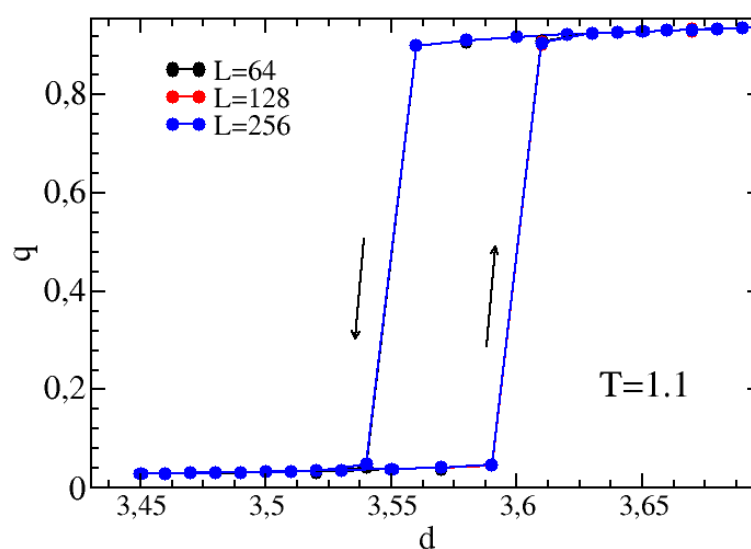


Figura 4.30: Curva de histerese da concentração de ^3He como função do campo para diferentes tamanhos de rede. Os pontos são resultado da simulação e a linha é guia para os olhos.

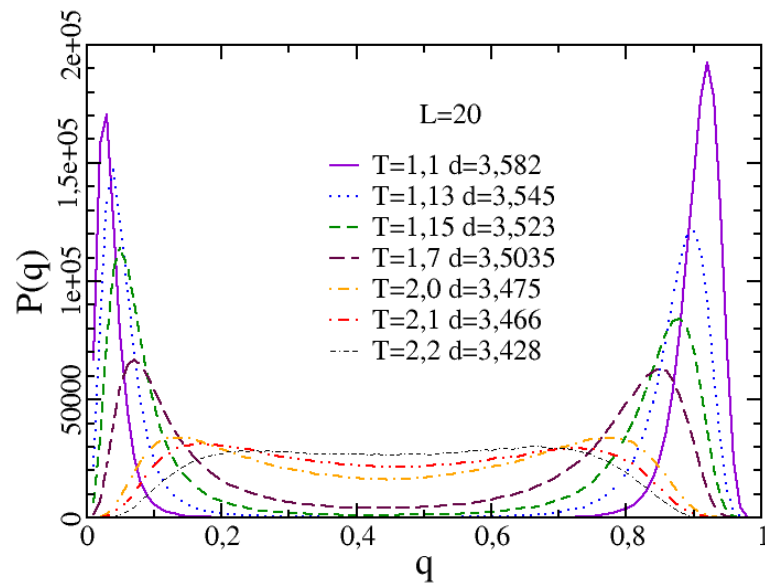


Figura 4.31: Curva da distribuição de probabilidade da concentração de ^3He $P(q)$ para rede de tamanho $L = 20$, em diferentes valores de temperatura e campo cristalino sobre a linha de coexistência.

Na Figura 4.31 está apresentado a distribuição de probabilidade da concentração de ^3He $P(q)$ para rede de tamanho $L = 20$, em diferentes temperaturas sob a linha de transição de primeira ordem. Pode-se observar que com o aumento da temperatura os dois picos se aproximam e desaparecem. A presença de dois picos para rede $L = 20$ não garante a coexistência de fases no limite termodinâmico, com discutido na Sec. 4.2.2. Na Figura 4.32(a) observa-se que mesmo existindo dois picos para $T = 1.2$ na rede $L = 20$ o mesmo não acontece para rede $L = 40$ indicado que o ponto crítico isolado encontra-se abaixo dessa temperatura. Já na Figura 4.32(b) os dois picos existem para as redes simuladas e a tendência é que para redes maiores eles fiquem ainda mais definidos indicando que o ponto crítico isolado se encontra há uma temperatura acima de $T = 1,16$

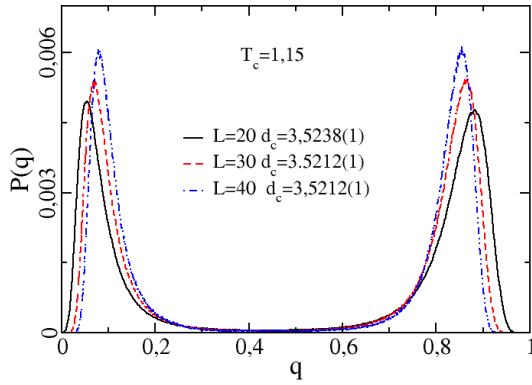
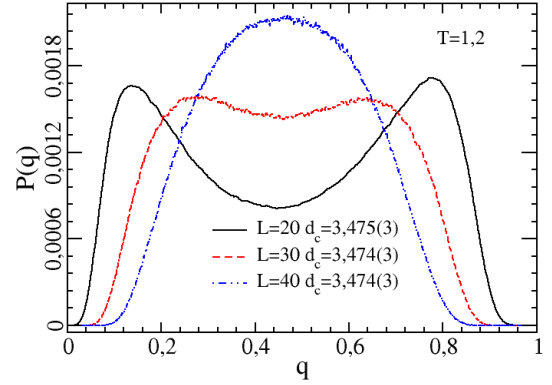
(a) Distribuição de probabilidades em $T = 1,15$ (b) Distribuição de probabilidades em $T = 1,2$

Figura 4.32: Distribuição de probabilidades da concentração de ^3He para as redes $L = 20$, $L = 30$ e $L = 40$.

Diagrama de transição de fase

Na Figura 4.33 está apresentado o diagrama de transição de fase no plano temperatura versus campo cristalino. O diagrama apresenta a mesma topologia do diagrama obtido para a rede quadrada (Fig. 4.8), o que evidencia que as características do diagrama não dependem do tipo de rede. Na Figura 4.34 está apresentado o diagrama de coexistência no plano temperatura versus concentração de ^3He . O ponto BKT terminal está localizado $T_{PT} = 1,064(3)$ e $d_{PT} = 3,610(5)$ com o ponto crítico simples em $T_{PC} = 1,175(25)$ e $d_{PC} = 3,49(2)$. Embora o presente modelo seja ligeiramente diferente do original proposto por Berker e Nelson, os valores da temperatura correspondente são bastante comparáveis, a saber $T_{PT} = 0,9895$ e $T_{PC} = 1,2159$. Em $q = 0$ ou seja para $d \ll 0$ a presente temperatura é $T_{BKT}^0 = 1,1275(7)$ e para o modelo rotor planar é $T_{BKT} = 1,468$ [127].

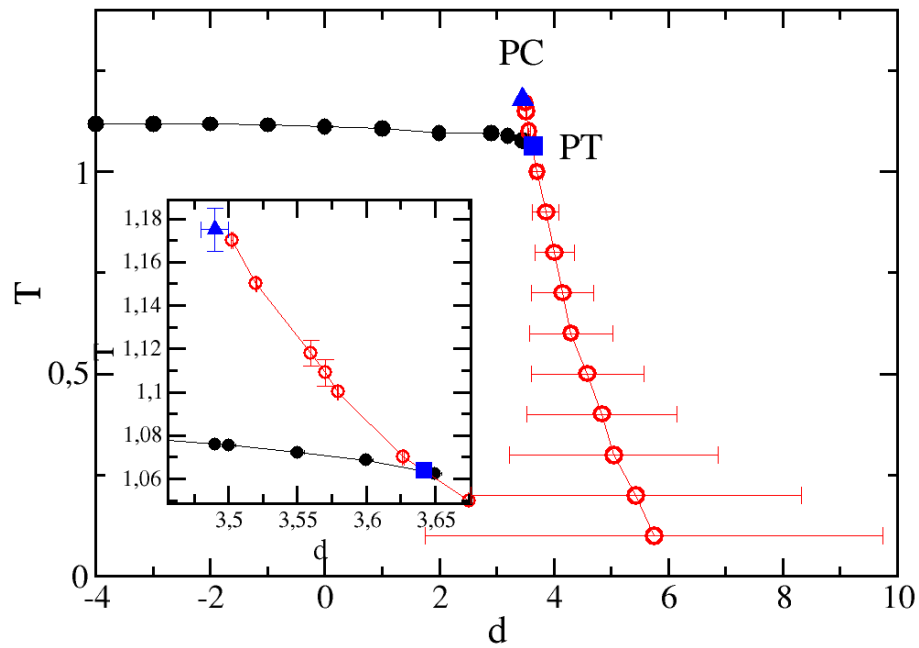


Figura 4.33: Diagrama de fase no plano temperatura vs. campo cristalino reduzido para o modelo com $K = 1$. Os círculos cheios indicam a transição BKT e os abertos indicam a transição de primeira ordem. O triângulo cheio e o quadrado representam o ponto crítico simples e o ponto BKT terminal, respectivamente. A inserção mostra em detalhe a região próxima aos pontos críticos, onde há uma aparente continuação analítica da transição BKT.

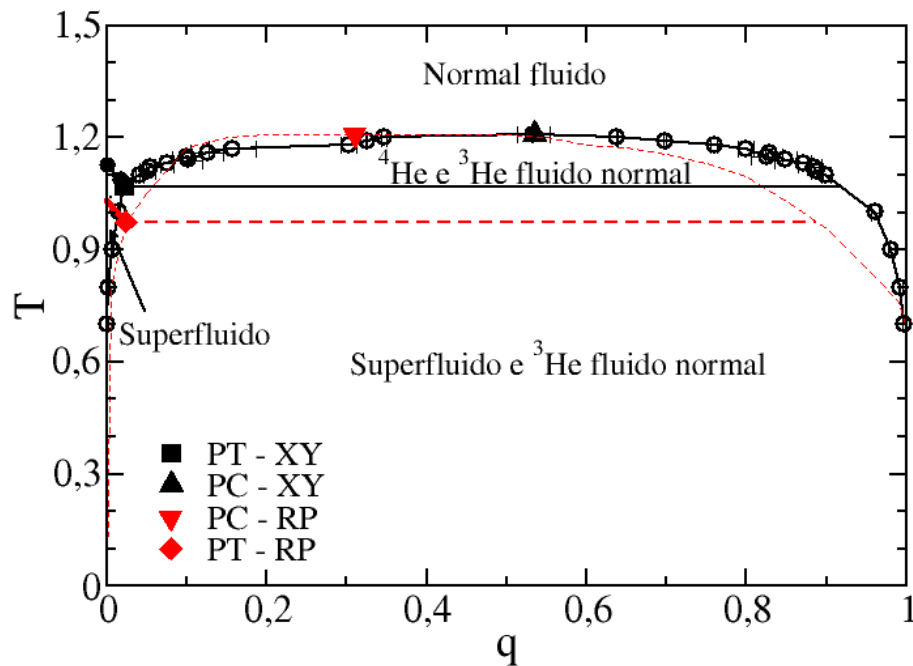


Figura 4.34: Diagrama de coexistência no plano da temperatura versus concentração para o modelo com $K = 1$. Os círculos cheios indicam a transição e os círculos abertos indicam o limite de coexistência do superfluido e ^3He fluido normal, bem como a transição ^4He e ^3He líquido normal (as linhas são apenas guia para os olhos). O triângulo cheio e o quadrado cheio representam, respectivamente, o ponto crítico simples e o ponto BKT terminal para o modelo XY VBEG. A linha pontilhada mostra o resultado obtido por Berker e Nelson para o modelo rotor planar (RP).

4.3 Conclusão

Neste capítulo apresentou-se a versão XY do modelo vetorial de Blume-Emery-Griffiths em redes quadradas e redes triangulares. Os diagramas obtidos para as redes quadradas e triangulares apresentaram topologias semelhantes, com uma linha de transição BKT terminando em uma linha de transição de primeira ordem num ponto BKT terminal, e a linha de primeira ordem terminando num ponto crítico isolado. Essa é a mesma topologia apresentada pelo diagrama de fases do modelo VBEG na versão rotor planar apresentado por Cardy e Scalapino e por Berker e Nelson. Algumas diferenças, no entanto puderam ser notadas, entre elas a concentração do ponto BKT terminal da rede quadrada apresentado por Cardy e Scalapino difere significativamente dos resultados obtidos nesse trabalho. Por outro lado, a concentração no ponto BKT terminal da rede triangular ficou muito próxima do encontrado por Berker e Nelson. Isso indica que a diferença do resultado de Cardy e Scalapino com o obtido nesse trabalho deve está

relacionado ao método de aproximação utilizado. Para a $K = 1$ as concentrações para rede triangular e quadrada foram iguais considerando o intervalo de precisão, que é um indicativo que a concentração no ponto BKT terminal não depende da rede. Contudo, seria necessário analisar a concentração no ponto BKT terminal em outros valores de K .

Para rede quadrada com $K=0$, o diagrama ficou muito semelhante ao encontrado por Dilon e colaboradores. O estudo preciso do ponto tricrítico efetivo revelou a exigência de um ponto BKT terminal e um ponto crítico isolado, semelhante ao obtido por Berker e Nelson. Contudo, devido a grande proximidade desses pontos (no limite da precisão do método de Monte Carlo) uma prova conclusiva só deverá ser alcançada por um método analítico.

Nesse capítulo estudou-se a magnetização para diferentes valores de campo cristalino. Verificou-se que esta apresenta um expoente subcrítico igual ao encontrado na literatura. Observou-se que dentro da faixa de precisão esse expoente não varia com o campo cristalino. Assim, conclui-se que mesmo a magnetização sendo um fenômeno que surge devido ao efeito de tamanho finito, a mesma permanece inalterada na linha de transição BKT.

5 Filmes multicamadas de misturas de ^3He - ^4He

Neste capítulo são apresentados os resultados do Modelo XY-VBEG em filmes multicamadas. Nesses filmes o comportamento na transição de fase continua característico de uma transição do tipo BKT. O diagrama de fase apresenta a topologia similar do modelo ultrafino, exibindo um ponto BKT terminal e um ponto crítico isolado. Por outro lado, a localização destes pontos, bem como a temperatura BKT do sistema puro, depende da espessura do filme, ou seja, do número de camadas do sistema. Também foi estudada a distribuição da concentração de ^3He em cada camada do filme, mostrando a influência das condições de contorno livre e a concentração de ^3He no ponto BKT terminal, mostrando que essa depende da espessura do filme.

5.1 Introdução

Neste capítulo é estudada a transição de fase no modelo XY vetorial de Blume-Emery-Griffiths Eq. (4.1) numa rede cúbica simples com geometria de filme fino, ou seja, uma dimensão com comprimento finito e duas com comprimento infinito. Esse sistema, na transição de fase, comporta-se efetivamente como um sistema bidimensional apresentando uma transição do tipo BKT.

O estudo de filmes de ^4He em diferentes substratos mostra que o parâmetro de ordem superfluido desaparece no contorno do filme [128]. Essa característica foi implementada no modelo utilizando condições de contorno livre na superfície do filme. A condição de contorno livre pode ser interpretada como uma condição de contorno de Dirichlet com o valor do campo nulo nas superfícies [117]. Uma alternativa às condições de contorno livre é a condição de contorno alternada (staggered). Resultados numéricos mostraram que condições de contorno livre e alternada apresentam os mesmos resultados para as quantidades universais [129].

Neste trabalho foram simuladas redes com dimensões $L \times L \times h$, com condições de contorno periódicas na direção de L e condição de contorno livre na direção de h . Assim, os sítios localizados nas superfícies do filme apresentam apenas cinco vizinhos como esquematizado na Figura 5.1.

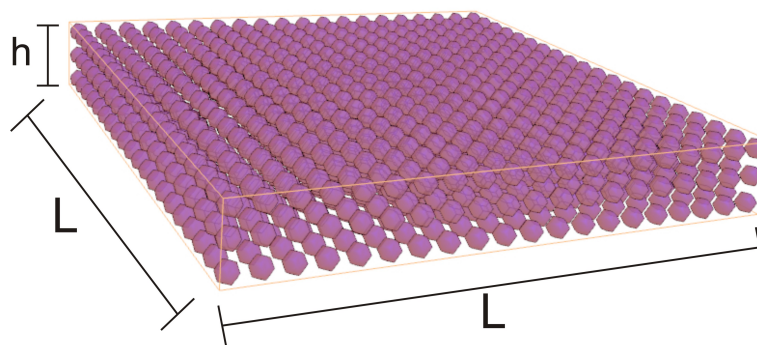


Figura 5.1: Ilustração do filme multicamada simulado.

Neste capítulo foram empregados os mesmos algoritmos de Simulação Monte Carlo utilizados no Capítulo 4, ou seja, o algoritmo de Gás-de-Rede, o algoritmo Metropolis, o algoritmo de Wolff e o algoritmo de super-relaxação. Foram empregadas também as técnicas do histograma simples e do histograma multidimensional.

5.2 Resultados

Calor específico

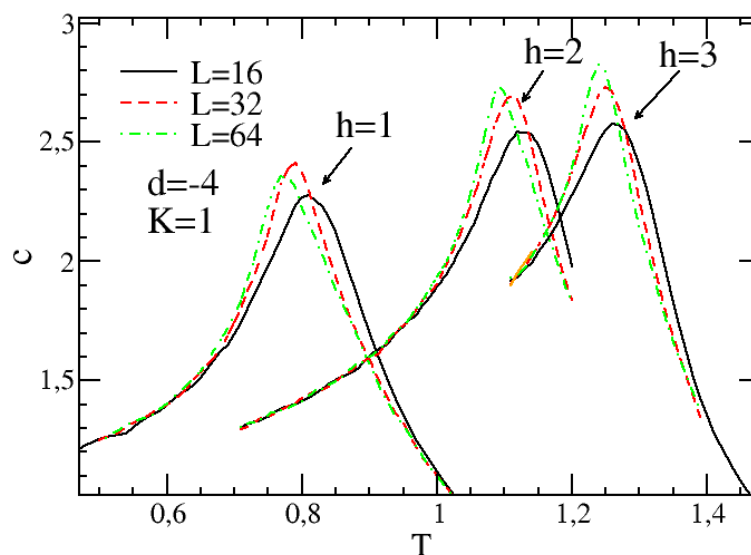


Figura 5.2: Curva do calor específico como função da temperatura do modelo XY-VBEG com $K = 1$ e $d = -4$ para diferentes tamanhos de rede e de espessuras h .

A Figura 5.2 mostra o calor específico c como função da temperatura T para o campo cristalino $d = -4$, redes de tamanho $L = 16$, $L = 32$ e $L = 64$, e espessuras $h = 1$, $h = 2$ e $h = 3$. Observa-se que o aumento da espessura leva o deslocamento do pico para temperaturas maiores, contudo as curvas de calor específico para as diferentes espessuras h apresentam a mesma forma característica da transição de fase BKT. O máximo da curva ocorre a uma temperatura superior à temperatura de transição.

Módulo da helicidade

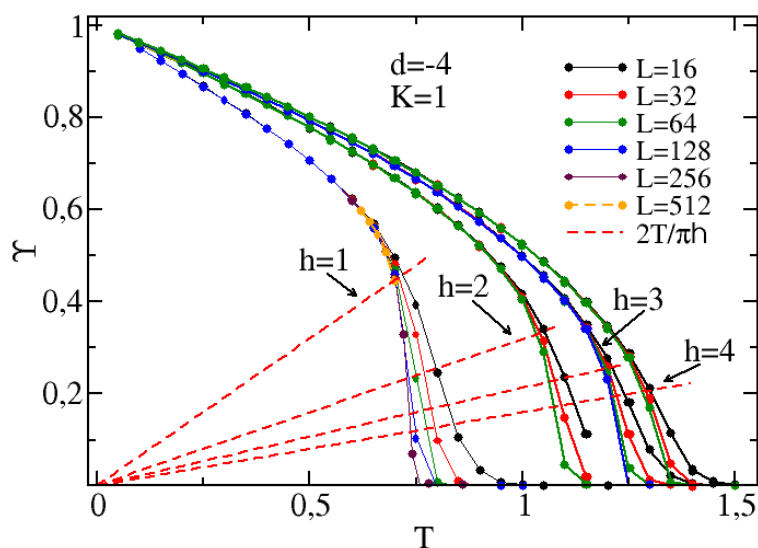


Figura 5.3: Curva do módulo da helicidade como função da temperatura do modelo XY-VBEG com $K = 1$ e $d = -4$ para diferentes tamanhos de rede e de espessuras h . O cruzamento do módulo da helicidade com a reta $2T/h\pi$ define a temperatura de transição.

Na Figura 5.3 está apresentado o módulo da helicidade para diferentes espessuras h em $d = -4$. Ele foi calculado a partir da simulação Monte Carlo utilizando a Eq. (4.13) e a Eq. (4.14), as mesmas utilizada para filmes ultrafinos. Contudo, diferente desses os filmes multicamadas apresentam um salto de $2T/h\pi$ na temperatura de transição [34, 130]. Pode-se então estimar a temperatura de transição a partir do cruzamento do módulo da helicidade com a reta $2T/h\pi$, como ilustrado na Figura 5.3. As temperaturas assim obtidas estão apresentadas na Tabela 5.1.

Susceptibilidade

Na Figura 5.4 está apresentada as curva de $\chi/L^{2-\eta}$ como função da temperatura para diferentes tamanhos de rede e espessuras com $K = 1$ e $d = -4$. O cruzamento das curvas para diferentes tamanhos de rede dá uma estimativa para a temperatura de transição BKT para um filme de espessura h . Observa-se que o comportamento das curvas nas diferentes espessuras é o mesmo, ou seja, as curvas para os diferentes valores de L se cruzam em um único ponto. As temperaturas obtidas estão apresentadas na Tabela 5.1. Nessa tabela, observa-se que a temperatura obtida com a lei de escala da susceptibilidade é equivalente a temperatura obtida com o módulo da helicidade, porém com uma melhor precisão. Por isso a linha de transição BKT do

diagrama de fase será calculada utilizando o cruzamento das curvas de $\chi/L^{2-\eta}$ como função da temperatura.

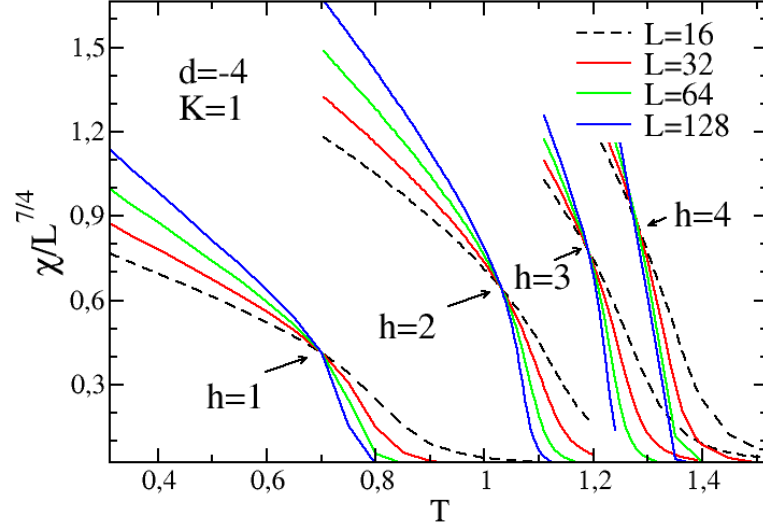


Figura 5.4: Curva de $\chi/L^{2-\eta}$ como função da temperatura, onde $\eta = 1/4$, $K = 1$, $d = -4$ para diferentes tamanhos de rede e de espessuras h .

Tabela 5.1: Temperatura de transição BKT obtida com o módulo da helicidade (T_{BKT}^Y) e com a lei de escala da susceptibilidade (T_{BKT}^X) para $k = 1$ e $d = -4$ em diferentes espessuras.

h	T_{BKT}^Y	T_{BKT}^X
1	0,700(1)	0,6975(14)
2	1,030(3)	1,0305(5)
3	1,189(5)	1,1895(20)
4	1,282(8)	1,281(1)

A temperatura de transição BKT nos filmes segue uma relação de escala com a espessura do filme relatada por Schultka e Manousakis [34, 130]. Para o modelo rotor planar, essa relação é dada por

$$T_{BKT}(h) = T_c^{3D} \left(1 + \frac{a''}{(h+b'')^{1/\nu}} \right), \quad (5.1)$$

onde a'' e b'' são constantes não universais, e ν e T_c^{3D} são o expoente e a temperatura crítica do sistema tridimensional. Essa equação se ajusta muito bem aos resultados do modelo XY como pode ser observado na Figura 5.5. Nessa figura apresentamos a dependência da temperatura de transição BKT com a espessura do filme h em $d = -4$. A linha pontilhada foi obtida fixando os parâmetros conhecidos da Eq. (5.1), ou seja, o expoente do sistema tridimensional

$\nu = 0,6717(1)$ [9] e a temperatura crítica do sistema tridimensional $T_c^{3D} = 1,5518(2)$ [95]. Ajustando as respectivas constantes obtêm-se $a'' = 1,587(8)$ e $b'' = -2,25(1)$. Na Figura 5.6 está apresentado o mesmo ajuste para outros valores de campo cristalino. A temperatura do sistema tridimensional foi retirada do trabalho de Freire e colaboradores [35].

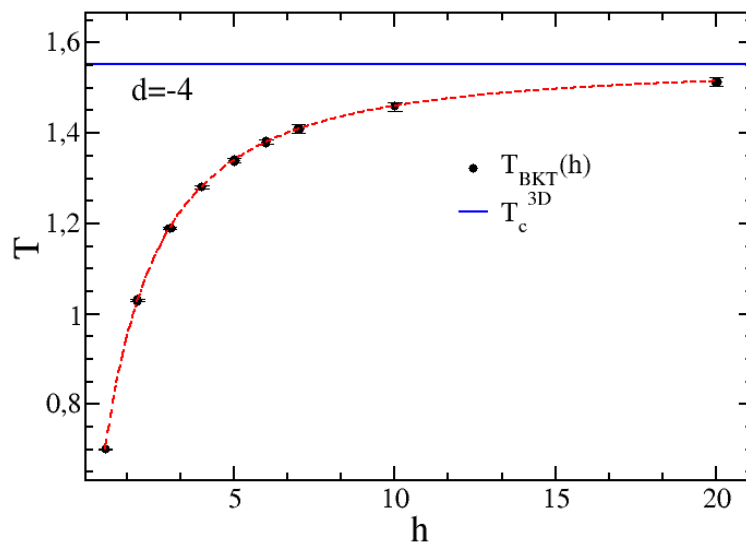


Figura 5.5: Temperatura BKT do modelo VBEG com $K = 1$ como função da espessura h dos filmes. A linha pontilhada é um ajuste usando a Eq. (5.1). A linha cheia marca a temperatura de transição de um sistema tridimensional.

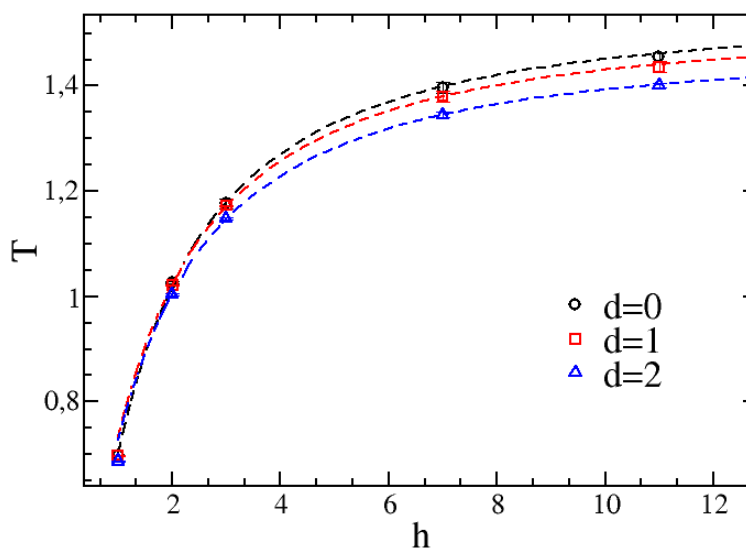


Figura 5.6: Temperatura BKT do modelo VBEG com $K = 1$ como função da espessura h dos filmes para diferentes valores da campo cristalino. A linha pontilhada é um ajuste usando a Eq. (5.1).

Diagrama de transição de fase

Os diagramas de transição de fase do modelo XY-VBEG para $K = 1$ e diferentes espessuras estão apresentados na Figura 5.7. Observa-se que os diagramas dos filmes aproximam-se do diagrama do sistema tridimensional com o aumento da espessura h . Pode-se observar que a linha de transição BKT do filme ultrafino ($h = 1$) é praticamente paralela ao eixo do campo cristalino, enquanto que a linha de transição de segunda ordem do modelo tridimensional apresenta uma curvatura suave. Essa curvatura já pode ser observada também na linha de transição BKT do diagrama do filme com espessura $h = 3$. Observa-se também que enquanto nos filmes há um ponto BKT terminal e um ponto crítico isolado, no sistema tridimensional há um ponto tricrítico. Contudo, com o aumento da espessura do filme a distância entre o ponto BKT terminal e o ponto crítico isolado diminui.

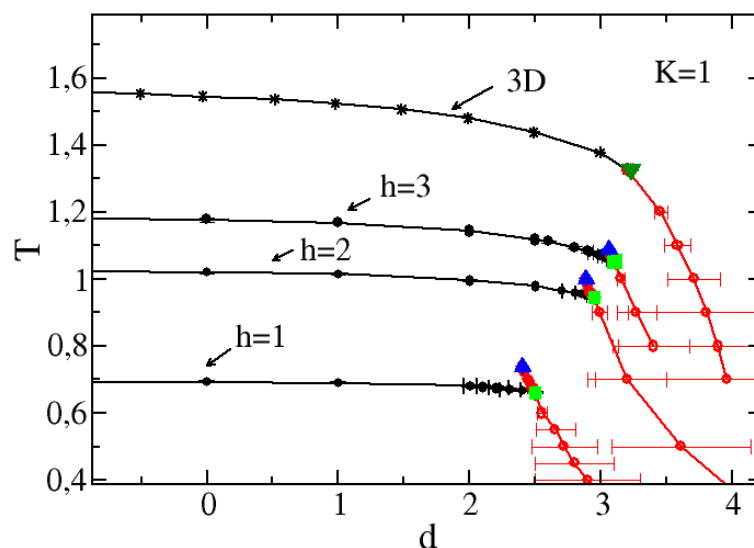


Figura 5.7: Diagrama de fase no plano temperatura vs. campo cristalino reduzido para o modelo VBEG com $K = 1$ para filmes com diferentes espessuras, comparado com o modelo na rede tridimensional apresentado por Freire e colaboradores [35]. Os círculos cheios indicam uma transição BKT, os abertos indicam a transição de primeira ordem e as estrelas indicam transição de segunda ordem.

Na figura 5.8 está apresentado a localização do ponto BKT terminal e do ponto crítico isolado para diferentes espessuras e o ponto tricrítico do sistema tridimensional. Observa-se que os pontos BKT terminal e o ponto crítico isolado tende para o ponto tricrítico, como esperado.

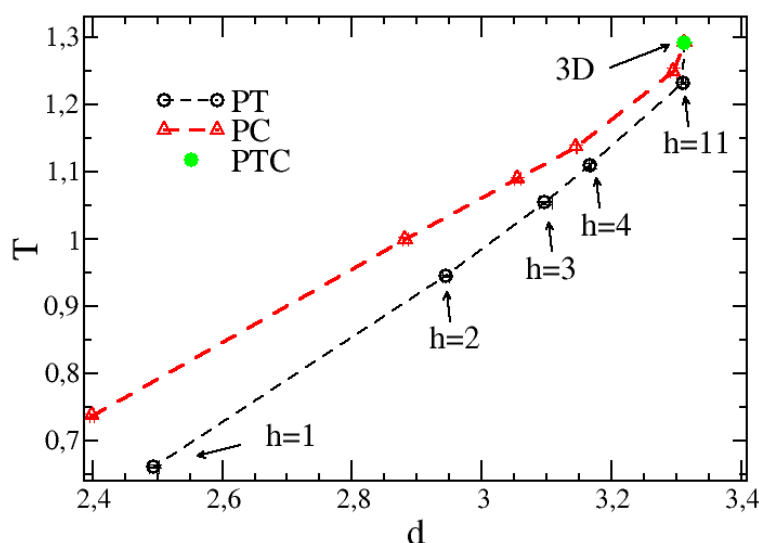


Figura 5.8: Localização do ponto BKT terminal (PT) e do ponto crítico isolado (PC) do modelo XY-VBEG com $K = 1$ para diferentes espessuras. O ponto tricrítico do modelo tridimensional está marcado com um círculo cheio e foi retirado da Ref. [35].

No sistema tridimensional, a concentração no ponto tricrítico q_{PTC} , e razão entre a temperatura do ponto tricrítico e a do sistema puro T_c^{PTC}/T_c^0 são dois parâmetros utilizados para comparar os resultados teóricos com os resultados experimentais [35].

Neste trabalho foram estudados parâmetros equivalentes, que são a concentração de ^3He no ponto BKT terminal q_{PT} e as razões $T_{BKT}^{PT}(h)/T_{BKT}^0(h)$ e $T_{BKT}^{PC}(h)/T_{BKT}^0(h)$ com o objetivo de verificar se as condições de contorno influenciam o comportamento desses parâmetros no sistema tridimensional.

Na Figura 5.9 estão apresentadas as razões $T_{BKT}^{PT}(h)/T_{BKT}^0(h)$ e $T_{BKT}^{PC}(h)/T_{BKT}^0(h)$ obtido neste trabalho e T_c^{PTC}/T_c^0 do sistema tridimensional tirado da Ref. [35]. Observa-se que as razões $T_{BKT}^{PT}(h)/T_{BKT}^0(h)$ e $T_{BKT}^{PC}(h)/T_{BKT}^0(h)$ aproximam-se rapidamente de T_c^{PTC}/T_c^0 com o aumento da espessura do filme. Isso indica que esse parâmetro não depende significativamente das condições de contorno.

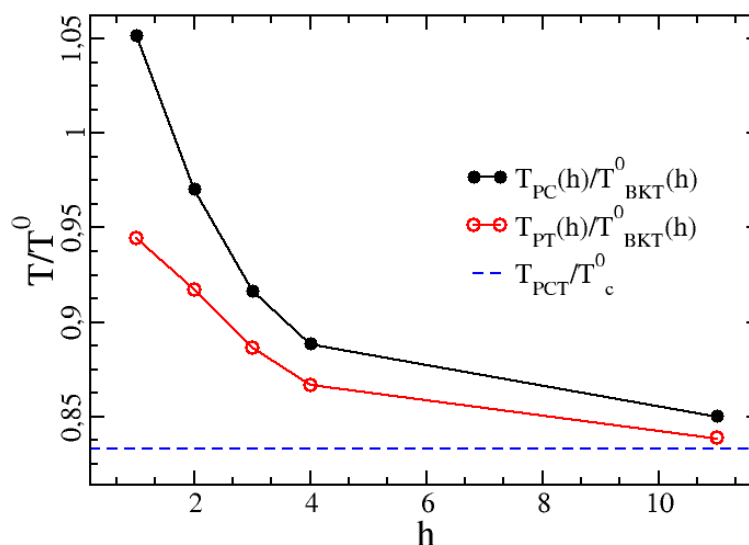


Figura 5.9: Razões $T_{BKT}^{PT}(h)/T_{BKT}^0(h)$ e $T_{BKT}^{PC}(h)/T_{BKT}^0(h)$ do modelo XY-VBEG com $K = 1$ para diferentes espessuras. A razão T_c^{PCT}/T_c^0 do modelo tridimensional retirada da Ref. [35] está marcado com uma linha tracejada.

Na Figura 5.10 está apresentada a concentração média de ^3He no ponto BKT terminal para filmes de diferentes espessuras. Para filme com espessura $h = 11$ a concentração no ponto BKT terminal é de $q_{PT} = 0,312$, quase o dobro da concentração do modelo tridimensional no ponto tricrítico que é de $q_{PTC} = 0,17$ [35], contudo é inferior a concentração no ponto tricrítico medido experimentalmente que é de $q_{PTC} = 0,67$ [64]. O crescimento da concentração com a espessura indica que concentrações maiores podem ser alcançadas com filmes de maior espessura, podendo se igualar a concentração experimental no limite h tendendo a infinito. Esse resultado mostra que o contorno tem uma grande influência na concentração de ^3He e por isso a distribuição da concentração de ^3He foi estudada com mais detalhes.

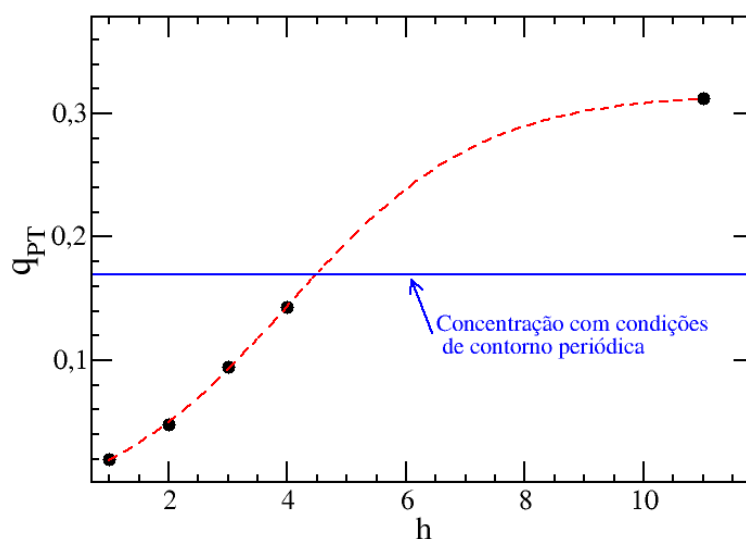


Figura 5.10: Concentração média de ^3He no ponto BKT terminal como função da espessura. Os pontos são resultados das simulações e a linha pontilhada é uma guia para os olhos.

Concentração de ^3He

Uma característica importante do modelo VBEG em filmes é a variação da concentração de ^3He entre as camadas do filme. Isso ocorre devido às condições de contorno livre nas superfícies do filme. Contudo, camadas com mesma distância à superfície livre apresentam as mesmas concentrações devido à simetria do problema. Os resultados apresentados nessa seção são referentes a um filme com espessura $h = 11$ e tamanho linear $L = 40$. Sendo assim, são apresentadas apenas as concentrações da primeira à sexta camada, onde a primeira camada é a mais externa e a sexta camada a mais interna do filme.

Na Figura 5.11 apresenta-se a distribuição de probabilidade da concentração de ^3He no ponto $T = 1,23$ e $d = 3,3145$ para cada uma das camadas. Nessa configuração o sistema se encontra na fase superfluida muito próxima da transição de primeira ordem. Na figura observa-se que a distribuição da concentração de ^3He no filme segue uma distribuição normal. Com o ajuste de uma gaussiana obtêm-se a média e o desvio padrão da distribuição. A concentração média de ^3He diminui da camada mais externa (camada um) para camada mais interna (camada seis). A distribuição de probabilidade da concentração ^3He na segunda camada é mais larga que a da primeira, ou seja apresenta um maior desvio padrão. A partir da segunda camada as curvas de distribuição de probabilidade ficam mais estreitas com o afastamento da superfície livre. Observe que mesmo estando numa fase superfluida a concentração de ^3He na primeira camada é alta ($\langle q \rangle = 0,73372(6)$).

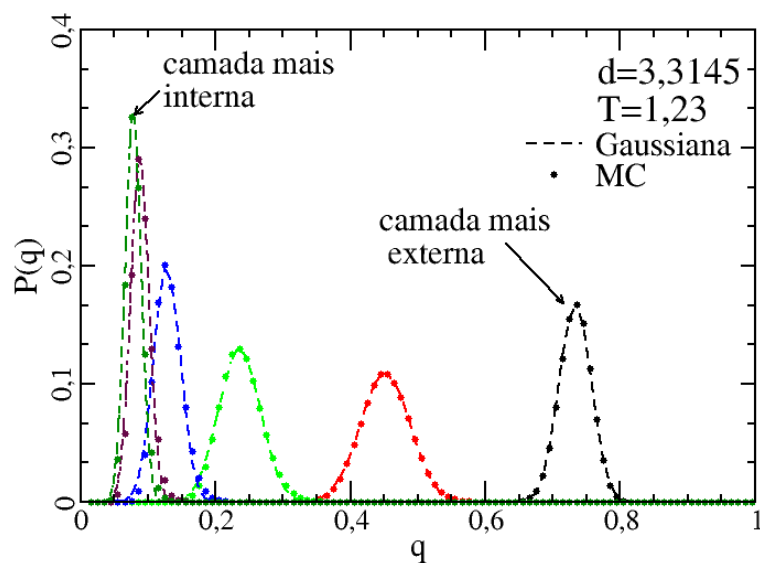


Figura 5.11: Distribuição de probabilidade da concentração de ^3He $P(q)$ em cada camada de um filme com $h = 11$ e $L = 40$.

Na Figura 5.12 está apresentada a concentração média como função de d , para primeira, segunda, terceira e sexta camada na temperatura $T = 1,23$. Observa-se que o crescimento de concentração na primeira camada é mais suave e a concentração é muito superior a das outras para campos pequenos. Na segunda camada há um crescimento da concentração mais acentuado nas proximidades da transição de primeira ordem.

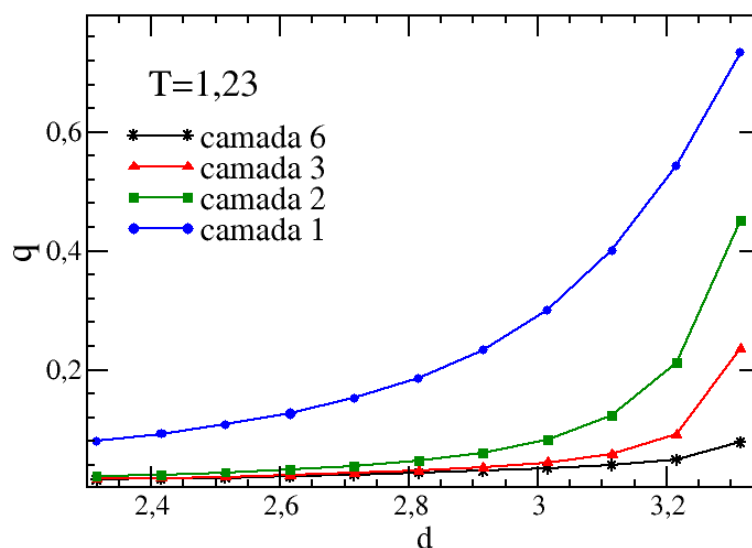


Figura 5.12: Concentração de ^3He em cada camada como função do campo cristalino. Os pontos são resultados da simulação e as linhas são guias para os olhos.

A Figura 5.13 apresenta a distribuição da concentração de ^3He no ponto de transição de primeira ordem $T = 1,23$, $d = 3,315$. Pode-se observar na primeira camada que a distribuição apresenta dois picos muito próximos. Para camadas mais internas os picos se separam tendo o máximo afastamento na sexta camada. A intensidade dos picos muda com as camadas. Observa-se que enquanto na primeira camada o pico maior concentração apresenta maior intensidade, na sexta camada o pico de menor concentração apresenta maior intensidade. As intensidades dos picos são iguais na quinta camada. Considerando que a transição de primeira ordem ocorre no ponto exato onde os dois picos apresentam intensidades iguais, implica que para $T = 1,23$ o ponto de coexistência da primeira camada ocorre para um campo cristalino levemente inferior a $d = 3,315$ enquanto que para sexta camada ocorre a um campo levemente superior a este.

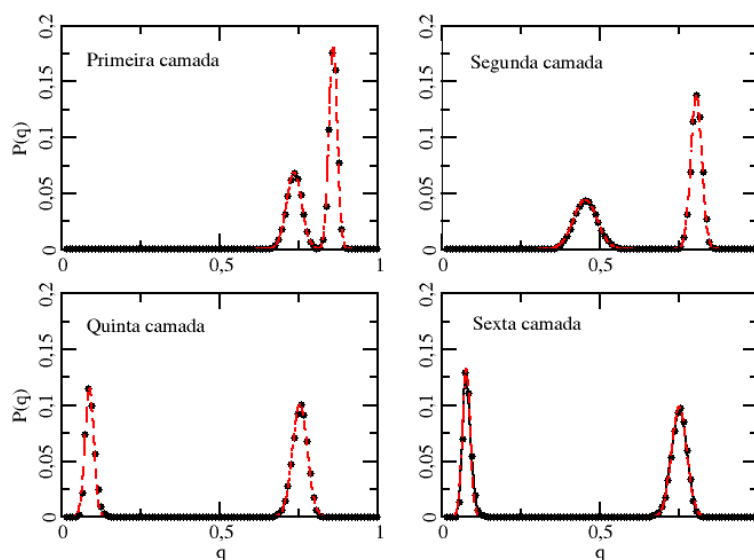


Figura 5.13: Distribuição de probabilidade em diferentes camadas num ponto sobre a linha de transição de primeira ordem. Os pontos são resultado da simulação a linha é um ajuste gaussiano.

5.3 Conclusão

Nesse capítulo, estudou-se o modelo XY-VEBEG em filmes finos utilizando Simulação Monte Carlo e Técnica do Histograma. Os filmes multicamadas desse modelo apresentaram uma transição de fase do tipo BKT com a mesma característica do filme monocamada estudado no capítulo anterior.

Utilizando a relação de escala com $\eta = 1/4$ para os filmes de diferentes espessuras foi

obtida uma temperatura de transição BKT que coincide com a temperatura BKT obtida com o módulo da helicidade. Com isso acredita-se que o expoente η não varia com a espessura do filme e a relação de escala com $\eta = 1/4$ pode ser utilizada para obter as linhas de transição BKT para filmes de diferentes espessuras.

Por outro lado, a temperatura de transição BKT aumenta com a espessura do filme. Essa temperatura tende a temperatura de transição de segunda ordem do sistema tridimensional quando a espessura do filme tende a infinito. Foi possível ajustar a relação apresentada por Schultka e Manousakis à temperatura BKT obtida nas diferentes espessuras. Para o ajuste foi utilizado a temperatura e o expoente do comprimento de correlação ν do sistema tridimensional. Um bom ajuste foi obtido para o modelo XY-VBEG com diferentes valores de campo cristalinos, isso indica que o expoente ν não varia com o campo. Ressalta-se que no terceiro capítulo foi mostrado que o expoente não varia com a diluição temperada.

Para $K = 1$, o diagrama de transição de fase dos filmes apresenta um ponto BKT terminal e um ponto crítico isolado. Esses pontos aproximam-se um do outro com o aumento da espessura do filme e tendem para o ponto tricrítico no sistema tridimensional.

No sistema tridimensional, a concentração no ponto tricrítico q_{PCT} e razão entre a temperatura do ponto tricrítico e a do sistema puro T_c^{PTC}/T_c^0 são parâmetros utilizados para comparar os resultados teóricos com os resultados experimentais. Estudou-se esses parâmetros nos filmes a fim de verificar se as condições de contorno influenciam o comportamento desses parâmetros. Verificou-se que a concentração no ponto BKT terminal aumenta muito com o aumento da espessura do filme, de forma que para $h = 11$ a concentração q_{PCT} é o dobro do resultado obtido para o sistema tridimensional. Conclui-se que q_{PCT} é influenciado pelas condições de contorno. Já as razões $T_{BKT}^{PT}(h)/T_{BKT}^0(h)$ e $T_{BKT}^{PC}(h)/T_{BKT}^0(h)$ tende para T_c^{PTC}/T_c^0 , o que indica que esse parâmetro não depende significativamente das condições de contorno.

A concentração q_{PCT} medida experimentalmente é muito superior à obtida para o modelo XY-VBEG tridimensional, os estudos indicam que as condições do contorno podem ser a causa para a diferença nos resultados.

O estudo da distribuição de probabilidade da concentração de ^3He no filme revelou que a concentração de ^3He é maior nas camadas mais externas. No ponto de transição de primeira ordem a distribuição apresenta dois picos em cada uma das camadas. A posição dos picos muda dependendo da camada, isso está relacionado ao potencial livre na superfície do filme.

6 Considerações finais e perspectivas

Neste trabalho estudou-se o diagrama de transição de fase do modelo XY com diluição por sítios do tipo temperada, numa rede cúbica simples, através de simulação Monte Carlo. Foram obtidos a temperatura crítica e expoentes críticos do modelo para diferentes concentrações de partículas magnéticas. Mostrou-se que os expoentes não mudam com a diluição, o que já era esperado pelo critério de Harris, visto que o expoente $\alpha < 0$. Entretanto, essa evidência numérica se torna importante, uma vez que o expoente do calor específico é muito pequeno e o critério de Harris localiza-se em seu limite. Também foram comparados os resultados com os dados experimentais [42, 100]. Verificou-se que a baixa inclinação inicial do trabalho de DeFotis e colaboradores pode ser justificada pela presença de interação de super-troca que variam com a concentração. Parte desses resultados já foram publicados na revista *Comp. Phys. Comm.* [10]. Um artigo completo com novos resultados está sendo preparado para submissão. Futuramente, deseja-se realizar um estudo dos expoentes crítico do modelo XY diluído com interação de supertroca, a fim de analisar o comportamento desses com a diluição. Uma vez que nesse modelo a diluição altera o alcance das interações, há probabilidade da diluição levar o sistema a uma nova classe de universalidade. Caso isso ocorra, os expoentes tornam-se uma ferramenta para verificar experimentalmente se as interações de supertroca são a causa da baixa inclinação inicial no diagrama de fase apresentado por DeFotis e colaboradores.

Ao mesmo tempo, estudou-se o diagrama de fase de uma versão XY do modelo vetorial de Blume-Emery-Griffiths que é um tipo de diluição recozida. Este modelo foi estudado em redes quadradas, triangulares e em filmes multicamadas, utilizando simulações Monte Carlo. O modelo XY-VBEG reproduz satisfatoriamente a topologia do diagrama de fases obtido experimentalmente para misturas de ^3He - ^4He . Para $K = 1$, o diagrama apresentou uma linha de transições BKT que é truncada por uma linha de primeira ordem num ponto BKT terminal. O sistema exhibe, assim, uma fase superfluida, rica em ^4He , que sofre uma transição BKT para uma fase normal, rica em ^4He ou uma transição de primeira ordem para uma fase normal rica em ^3He . A concentração no ponto BKT terminal da rede quadrada e da rede triangular ficaram muito próximas. Alguns desse resultado foram publicado na *Physica A* [22]. Futuramente

pretende-se investigar essa concentração para a rede de Kagomé e para diferentes valores de K a fim de verificar se a concentração de ^3He no ponto BKT terminal independe da rede.

Estudou-se com maior precisão o ponto tricrítico efetivo presente no diagrama do modelo XY-VBEG para $K = 0$. Este ponto também foi encontrado recentemente por Dillon e colaboradores [119] no modelo similar de Blume-Capel. O estudo revelou um ponto BKT terminal e um ponto crítico isolado. Semelhante ao resultado obtido por Berker e Nelson para o modelo VBEG na versão rotor planar numa rede triangular [23] utilizando grupo de renormalização. Esta sendo preparado um artigo com esse resultado para submissão. Futuramente pretende-se investigar se a possível não-analiticidade da linha de primeira ordem no ponto BKT terminal. Isso foi previsto por Fisher [131] para o ponto crítico terminal e detectado em sistemas fluidos [132].

No Capítulo 5 foi localizado o ponto BKT terminal e o ponto crítico simples para os filmes em diferentes espessuras, e verificou-se a tendência dos pontos BKT terminal e pontos crítico simples tornarem-se um ponto tricrítico no sistema tridimensional. Observou-se ainda que a concentração no ponto tricrítico depende das condições de contorno. O estudo, de forma detalhada, da concentração de ^3He - ^4He em cada camada permitiu verificar que as partículas de ^3He se nas proximidades da superfície livres.

Neste trabalho foram realizadas simulações considerando condições de contorno livre. Futuramente é importante investigar a equivalência das condições de contorno alternadas e livres no modelo XY-VBEG, visto que sua equivalência foi verificada apenas para o modelo puro. Também é importante estudar os filmes com $K=-1$, pois para esse valor Freire e colaboradores [35] obtiveram a razão T_c^{PTC}/T_c^0 próxima do valor experimental, mas com a concentração q_{PCT} próxima da metade do valor experimental. Com as condições de contorno livres acredita-se que possa ser atingido valores próximos do experimental.

Diferentemente do modelo rotor planar, que não possui dinâmica de spin, os resultados obtidos neste trabalho serão utilizados num estudo subsequente da dinâmica de spins, cujos resultados contribuirão para a melhor compreensão de características dinâmicas como por exemplo a condutividade térmica em filmes de misturas de hélio.

Referências Bibliográficas

- [1] FISHER, M. E. The renormalization group in the theory of critical behavior. *Rev. Mod. Phys.*, American Physical Society, v. 46, n. 4, p. 597–616, Oct 1974.
- [2] FISHER, M. E. Renormalization group theory: Its basis and formulation in statistical physics. *Rev. Mod. Phys.*, American Physical Society, v. 70, n. 2, p. 653–681, Apr 1998.
- [3] PELISSETTO, A.; VICARI, E. Critical phenomena and renormalization-group theory. *Physics Reports*, v. 368, n. 6, p. 549 – 727, 2002. ISSN 0370-1573.
- [4] LIPA, J. A. et al. Heat capacity and thermal relaxation of bulk helium very near the lambda point. *Phys. Rev. Lett.*, v. 76, n. 76944, p. 944–947, 1996. 12f.
- [5] LIPA, J. A. et al. Specific heat of liquid helium in zero gravity very near the lambda point. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 68, n. 17, p. 174518, Nov 2003.
- [6] SINGASAAS, A.; AHLERS, G. Universality of static properties near the superfluid transition in ^4He . *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 30, n. 9, p. 5103–5115, Nov 1984.
- [7] GOLDNER, L. S.; AHLERS, G. Superfluid fraction of ^4He very close to t_λ . *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 45, n. 22, p. 13129–13132, Jun 1992.
- [8] BARMATZ, M. et al. Critical phenomena in microgravity: Past, present, and future. *Rev. Mod. Phys.*, American Physical Society, v. 79, n. 1, p. 1–52, Jan 2007.
- [9] CAMPOSTRINI, M. et al. Theoretical estimates of the critical exponents of the superfluid transition in ^4He by lattice methods. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 74, n. 14, p. 144506, Oct 2006.
- [10] SANTOS-FILHO, J.; PLASCAK, J. Monte carlo simulations of the site-diluted three-dimensional XY model. *Computer Physics Communications*, v. 182, n. 5, p. 1130 – 1133, 2011. ISSN 0010-4655.
- [11] DEUTSCHER, G. *New superconductors: from granular to high Tc*. [S.l.]: World Scientific Pub Co Inc, 2006.
- [12] NHO, K.; MANOUSAKIS, E. Scaling of thermal conductivity of helium confined in pores. *Phys. Rev. B*, v. 64, n. 144513, p. 1–5, 2001. 15f.
- [13] LIPA, J. A. et al. Specific heat of helium confined to a 57- μm planar geometry near the lambda point. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 84, n. 21, p. 4894–4897, May 2000.
- [14] JIANG, J.; CHIEN, C. Magnetization and finite-size effects in Gd/W multilayers. *Journal of Applied Physics*, AIP, v. 79, n. 8, p. 5615–5617, 2009. ISSN 0021-8979.

- [15] JOHNSON, D.; PERERA, P.; OSHEA, M. Finite size effects in nanoscale Tb particles. *Journal of Applied Physics*, AIP, v. 79, n. 8, p. 5299–5301, 2009. ISSN 0021-8979.
- [16] CARDY, J. *Scaling and renormalization in statistical physics*. [S.l.]: Cambridge Univ Pr, 1996.
- [17] GASPARINI, F. M. et al. Finite-size scaling of ^4He at the superfluid transition. *Rev. Mod. Phys.*, American Physical Society, v. 80, n. 3, p. 1009–1059, Sep 2008.
- [18] BALABANYAN, K. G. Effect of disorder on the superfluid transition in two-dimensional systems. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 75, n. 14, p. 144512, Apr 2007.
- [19] SANTOS-FILHO, J. B.; MORENO, N. O.; ALBUQUERQUE, D. F. de. Monte carlos studies of critical and dynamic phenomena in mixed bond ising model. *Journal of Physics: Conference Series*, v. 249, n. 1, p. 012038, 2010.
- [20] JANKE, W. et al. Phase transitions in disordered ferromagnets. In: CITESEER. *NIC Symposium 2004*. [S.l.], 2004. p. 241–250.
- [21] JANKE, W. et al. Quenched disordered ferromagnets. In: CITESEER. *Proceedings of "Lattice"*. [S.l.], 2005.
- [22] SANTOS-FILHO, J.; PLASCAK, J.; LANDAU, D. Monte carlo study of the triangular XY vector blume-emery-griffiths model. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, v. 389, n. 15, p. 2934 – 2938, 2010. ISSN 0378-4371. Statistical, Fluid and Biological Physics Problems - An MIT Symposium and Articles dedicated to A. Nihat Berker on his 60th Birthday.
- [23] BERKER, A. N.; NELSON, D. R. Superfluidity and phase separation in helium films. *Phys. Rev. B*, v. 19, n. 2488, p. 2488–2503, 1979. 19.
- [24] CARDY, J. L.; SCALAPINO, D. J. Phase diagram of a model for ^3He - ^4He mixtures in two dimensions. *Phys. Rev. B*, v. 19, n. 1428, p. 1428–1436, 1979. 20f.
- [25] RAMOS, R.; VILCHES, O. The high temperature phase diagram of single-layer ^3He - ^4He mixtures. *J. Low Temp Phys*, v. 134, n. 112, p. 55–60, 2004.
- [26] TIWARI, R.; GLABERSON, W. I. Phase diagram of ^3He - ^4He mixture films. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 42, n. 4, p. 2075–2083, Aug 1990.
- [27] BISHOP, D. J.; REPPY, J. D. Study of the superfluid transition in two-dimensional ^4He films. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 22, n. 11, p. 5171–5185, Dec 1980.
- [28] NOIRAY, J. C. et al. Stratification transition in ^3He - ^4He mixture films. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 53, n. 25, p. 2421–2424, Dec 1984.
- [29] FLOERCHINGER, S.; WETTERICH, C. Superfluid bose gas in two dimensions. *Phys. Rev. A*, American Physical Society, v. 79, n. 1, p. 013601, Jan 2009.
- [30] KIMBALL, M. O.; GASPARINI, F. M. Superfluid fraction of ^3He - ^4He mixtures confined at $0.0483\mu\text{m}$ between silicon wafers. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 86, n. 8, p. 1558–1561, Feb 2001.

- [31] APAJA, V.; KROTSCHKECK, E. Layered ^4He and ^3He - ^4He mixture between two surfaces. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 64, n. 13, p. 134503, Aug 2001.
- [32] MACIOŁEK, A.; DIETRICH, S. Critical casimir effect in ^3He - ^4He films. *EPL (Europhysics Letters)*, IOP Publishing, v. 74, p. 22, 2006.
- [33] ZHANG, C.; NHO, K.; LANDAU, D. Finite-size effects on the thermal resistivity of ^4He in the quasi-two-dimensional geometry. *Physical Review B*, APS, v. 73, n. 17, p. 174508, 2006.
- [34] SCHULTKA, N.; MANOUSAKIS, E. Boundary effects in superfluid films. *Journal of Low Temperature Physics*, Springer, v. 109, n. 5, p. 733–762, 1997. ISSN 0022-2291.
- [35] FREIRE, R. T. S. et al. Monte carlo study of the XY vector blume-emery-griffiths model for ^3He - ^4He mixtures in three dimensions. *Phys. Rev. E*, v. 72, p. 056117, 2005.
- [36] KAPIKRANIAN, O.; BERCHE, B.; HOLOVATCH, Y. Interplay of topological and structural defects in the two-dimensional XY model. *Physics Letters A*, Elsevier, v. 372, n. 35, p. 5716–5721, 2008.
- [37] SUN, Y. et al. Berezinskii-kosterlitz-thouless phase transition of 2D dilute generalized XY model. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, Elsevier, v. 389, n. 7, p. 1391–1399, 2010.
- [38] SUN, Y.; YI, L.; GAO, Y. Thermodynamic and critical properties of dilute XY magnets: Monte carlo study. *Solid State Communications*, Elsevier, v. 149, n. 25-26, p. 1000–1003, 2009.
- [39] LEONEL, S. et al. Monte carlo study of the critical temperature for the planar rotator model with nonmagnetic impurities. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 67, n. 10, p. 104426, 2003.
- [40] WYSIN, G. M. et al. Extinction of the berezinskii-kosterlitz-thouless phase transition by nonmagnetic disorder in planar symmetry spin models. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 72, n. 9, p. 094418, Sep 2005.
- [41] BETTS, D. Critical properties of the XY model. *Physica B+ C*, Elsevier, v. 86, p. 556, 1977. ISSN 0378-4363.
- [42] DEFOTIS, G. et al. Dependence of the magnetic ordering temperature on dilution in a 3D XY insulating ferromagnet. *Journal of Physics: Condensed Matter*, Institute of Physics Publishing, v. 20, p. 135222, 2008.
- [43] REEVE, J.; BETTS, D. The magnetically dilute XY ferromagnet. i. the quenched site case. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, Institute of Physics Publishing, v. 8, p. 2642–2654, 1975.
- [44] TUCKER, J.; IDOGAKI, T.; MIYOSHI, Y. An effective field theory for dilute anisotropic heisenberg ferromagnets. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, v. 154, p. 221–230, 1996.

- [45] DOTSENKO, V.; DOTSENKO, V. Critical behaviour of the phase transition in the 2D Ising model with impurities. *Advances in Physics*, Taylor & Francis, v. 32, n. 2, p. 129–172, 1983.
- [46] SHANKAR, R. Exact critical behavior of a random bond two-dimensional ising model. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 58, n. 23, p. 2466–2469, Jun 1987.
- [47] SHALAEV, B. Correlation function and susceptibility of a two-dimensional Ising model with impurities. *Sov. Phys. Solid State*, v. 26, p. 1811–1813, 1984.
- [48] MARTINS, P.; PIASCAK, J. A. Universality class of the two-dimensional site-diluted Ising model. *Physical Review E*, American Physical Society, v. 76, n. 1, p. 12102, 2007.
- [49] STANLEY, H. *Introduction to phase transitions and critical phenomena*. [S.l.]: Clarendon Press-Oxford, 1971.
- [50] LANDAU, L.; LIFSCHITZ, E. Second order phase transitions. *Phys. Z. Sowjet*, v. 11, p. 545–563, 1937.
- [51] MATSUBARA, T.; MATSUDA, H. A lattice model of liquid helium, i. *Progress of Theoretical Physics*, v. 16, p. 569–582, 1956.
- [52] BETTS, D. D.; LEE, M. H. Critical properties of the XY model. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 20, n. 26, p. 1507 – 1510, Jun 1968.
- [53] REEVE, J. The magnetically dilute XY ferromagnet. ii. the annealed site case. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, IOP Publishing, v. 9, p. 2575, 1976.
- [54] MERMIN, N. D.; WAGNER, H. Absence of ferromagnetism or antiferromagnetism in one- or two-dimensional isotropic heisenberg models. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 17, n. 22, p. 1133–1136, Nov 1966.
- [55] KOSTERLITZ, J.; THOULESS, D. Ordering, metastability and phase transitions in two-dimensional systems. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, IOP Publishing, v. 6, p. 1181, 1973.
- [56] BEREZINSKII, V. Destruction of long range order in one dimensional and two dimensional systems having a continuous symmetry group, i classical systems, *zef* 59 (1970) 907. *Sov. Phys. JEPT*, v. 32, p. 493, 1971.
- [57] GOULD, H. et al. *STP XY Model Program*. March 2009. Disponível em: <<http://www.compadre.org/stp/items/detail.cfm?ID=8642>>.
- [58] FISHER, M. E.; BARBER, M. N.; JASNOW, D. Helicity modulus, superfluidity, and scaling in isotropic systems. *Phys. Rev. A*, American Physical Society, v. 8, n. 2, p. 1111–1124, Aug 1973.
- [59] BROUT, R. Statistical mechanical theory of a random ferromagnetic system. *Physical Review*, APS, v. 115, n. 4, p. 824 – 835, 1959. ISSN 0031-899X.
- [60] FISHER, D.; GRINSTEIN, G.; KHURANA, A. Theory of random magnets. *Physics Today*, v. 41, n. 12, p. 56–67, 1988.

- [61] HARRIS, A. Effect of random defects on the critical behaviour of Ising models. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, IOP Publishing, v. 7, p. 1671, 1974.
- [62] LEGGETT, A. J. Interpretation of recent results on ^3He below 3mk : A new liquid phase ? *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 29, n. 18, p. 1227–1230, Oct 1972. Baixado artigo que garantil nobel.
- [63] ROBERTS, T.; SYDORIAK, S. Sound velocity, phase separation, and lambda transitions of He [single bond] He mixtures. *Physics of Fluids*, v. 3, p. 895, 1960.
- [64] GRAF, E. H.; LEE, D. M.; REPPY, J. D. Phase separation and the superfluid transition in liquid ^3He - ^4He mixtures. *Phys. Rev. Lett.*, v. 19, n. 417, p. 417–419, 1967. 16f.
- [65] BLUME, M.; EMERY, V.; GRIFFITHS, R. Ising model for the λ transition and phase separation in ^3He - ^4He mixtures. *Physical Review A*, APS, v. 4, n. 3, p. 1071–1077, 1971.
- [66] BAYM, G.; PETHICK, C. *Landau Fermi-liquid theory: concepts and applications*. [S.l.]: Wiley-Interscience, 1991.
- [67] NEWMAN, M.; BARKEMA, G. *Monte Carlo methods in statistical physics*. [S.l.]: Oxford University Press, USA, 1999.
- [68] LANDAU, D. P.; BINDER, K. *A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics*. [S.l.]: Cambridge University Press, Cambridge, 2004.
- [69] MARSAGLIA, G. Choosing a point from the surface of a sphere. *The Annals of Mathematical Statistics*, JSTOR, v. 43, p. 645–646, 1972.
- [70] MACIOLEK, A.; KRECH, M.; DIETRICH, S. Phase diagram of a model for ^3He - ^4He mixtures in three dimensions. *Phys. Rev. E*, v. 69, n. 036117, p. 036117–1–036117–17, 2004. 21.
- [71] STAUFFER, D. Scaling theory of percolation clusters. *Physics Reports*, Elsevier, v. 54, n. 1, p. 1–74, 1979.
- [72] SWENDSEN, R. H.; WANG, J.-S. Nonuniversal critical dynamics in monte carlo simulations. *Phys. Rev. Lett.*, v. 58, n. 86, p. 86–88, 1987.
- [73] WOLFF, U. Collective monte carlo updating for spin systems. *Phys. Rev. Lett.*, v. 62, p. 361–364, 1989.
- [74] PLASCAK, J.; FERRENBURG, A.; LANDAU, D. Cluster hybrid monte carlo simulation algorithms. *Physical Review E*, APS, v. 65, n. 6, p. 66702, 2002.
- [75] CREUTZ, M. Overrelaxation and monte carlo simulation. *Physical Review D*, APS, v. 36, n. 2, p. 515–519, 1987.
- [76] PAWIG, S.; PINN, K. Monte carlo algorithms for the fully frustrated XY model. *International Journal of Modern Physics C*, v. 9, p. 727–736, 1998.
- [77] SALSBURG, Z. et al. Application of the monte carlo method to the lattice-gas model. i. two-dimensional triangular lattice. *The Journal of Chemical Physics*, v. 30, p. 65, 1959.

- [78] FERRENBURG, A. M.; SWENDSEN, R. H. New monte carlo technique for studying phase transitions. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 61, n. 23, p. 2635–2638, Dec 1988.
- [79] BINDER, K. Finite size scaling analysis of ising model block distribution functions. *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter*, Springer, v. 43, n. 2, p. 119–140, 1981.
- [80] SCHULTKA, N.; MANOUSAKIS, E. Finite-size scaling in two-dimensional superfluids. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 49, n. 17, p. 12071–12077, 1994.
- [81] JANKE, W.; NATHER, K. High-precision monte carlo study of the two-dimensional XY villain model. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 48, n. 10, p. 7419–7433, Sep 1993.
- [82] KIM, J. Phase transition in the two-dimensional classical XY model. *Physics Letters A*, Elsevier, v. 223, n. 4, p. 261–266, 1996.
- [83] JANKE, W. Logarithmic corrections in the two-dimensional XY model. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 55, n. 6, p. 3580–3584, Feb 1997.
- [84] CHUNG, S. Essential finite-size effect in the two-dimensional XY model. *Physical Review B*, APS, v. 60, n. 16, p. 11761–11764, 1999.
- [85] LEPRI, S.; RUFFO, S. Finite-size effects on the Hamiltonian dynamics of the XY-model. *EPL (Europhysics Letters)*, IOP Publishing, v. 55, p. 512, 2001.
- [86] PALMA, G.; MEYER, T.; LABBÉ, R. Finite size scaling in the two-dimensional XY model and generalized universality. *Phys. Rev. E*, American Physical Society, v. 66, n. 2, p. 026108, Aug 2002.
- [87] HASENBUSCH, M. The two-dimensional XY model at the transition temperature: a high-precision monte carlo study. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, IOP Publishing, v. 38, p. 5869, 2005.
- [88] ARCHAMBAULT, P. et al. Universal magnetic fluctuations in the two-dimensional XY model. *Journal of Applied Physics*, AIP, v. 83, n. 11, p. 7234–7236, 2009. ISSN 0021-8979.
- [89] BRAMWELL, S. T.; HOLDSWORTH, P. C. W. Magnetization: A characteristic of the kosterlitz-thouless-berezinskii transition. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 49, n. 13, p. 8811–8814, Apr 1994.
- [90] BRAMWELL, S.; HOLDSWORTH, P. Magnetization and universal sub-critical behaviour in two-dimensional XY magnets. *Journal of Physics: Condensed Matter*, IOP Publishing, v. 5, p. L53, 1993.
- [91] TOBOCHNIK, J.; CHESTER, G. V. Monte carlo study of the planar spin model. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 20, n. 9, p. 3761–3769, Nov 1979.
- [92] CHATTOPADHYAY, T. et al. Antiferromagnetic ordering in Gd_2CuO_4 . *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, Elsevier, v. 104, p. 607–608, 1992. ISSN 0304-8853.

- [93] BRAMWELL, S. et al. Neutron scattering and optical study of the magnetic properties of the two-dimensional ionic rubidium chromium bromide chloride ferromagnets $\text{Rb}_2\text{CrCl}_3\text{Br}$ and $\text{Rb}_2\text{CrCl}_2\text{Br}_2$. *Inorganic Chemistry*, ACS Publications, v. 25, n. 4, p. 417–421, 1986. ISSN 0020-1669.
- [94] HIRAKAWA, K.; IKEDA, H. Investigations of Two-Dimensional Ferromagnet K_2CuF_4 by Neutron Scattering. *Journal of the Physical Society of Japan*, v. 35, n. 5, 1973.
- [95] KRECH, M.; LANDAU, D. P. Spin-dynamics simulations of the three-dimensional XY model: Structure factor and transport properties. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 60, n. 5, p. 3375–3387, Aug 1999.
- [96] LANDAU, D. P.; KRECH, M. Spin dynamics simulations of classical ferro- and antiferromagnetic model systems: comparison with theory and experiment. *J. Phys. Condens. Matter*, v. 11, p. 179–213, 1999.
- [97] STAUFFER, D.; AHARONY, A. *Introduction to percolation theory*. [S.l.]: CRC, 1994. 17 p.
- [98] GARG, A. et al. Helicity moduli of three-dimensional dilute XY models. *Physical Review B*, APS, v. 30, n. 1, p. 106, 1984.
- [99] BROWN, E.; ESSAM, J. W.; PLACE, C. M. Critical temperature of the heisenberg model with random bond dilution. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, v. 8, n. 3, p. 321, 1975.
- [100] BURRIEL, R. et al. Magnetic susceptibilities of the random-site diluted XY antiferromagnet $[\text{Co}_p\text{Zn}_{1-p}(\text{C}_5\text{H}_5\text{NO})_6](\text{NO}_3)_2$. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 36, n. 16, p. 8461–8466, Dec 1987.
- [101] BILT, A. van der et al. Low-temperature susceptibilities of the $S = \frac{1}{2}$, simple cubic XY antiferromagnet $[\text{Co}(\text{C}_5\text{H}_5\text{NO})_6](\text{NO}_3)_2$. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 24, n. 1, p. 445–449, Jul 1981.
- [102] DEFOTIS, G. et al. Magnetic behavior of halobis (diethyldiselenocarbamate) iron (III): Interactions, anisotropy, and three-dimensional XY ferromagnetism. *Physical Review B*, APS, v. 29, n. 7, p. 3795–3809, 1984. ISSN 1550-235X.
- [103] PLASCAK, J. A.; ZAMORA, L. E.; ALCAZAR, G. A. P. Ising model for disordered ferromagnetic *Fe – Al* alloys. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 61, n. 5, p. 3188–3191, Feb 2000.
- [104] DIAS, D.; SOUSA, J. de; PLASCAK, J. Ising model for the Fe_pAl_q alloys according to the effective field theory. *Physics Letters A*, Elsevier, v. 373, n. 39, p. 3513–3515, 2009. ISSN 0375-9601.
- [105] DIAS, D.; PLASCAK, J. Site-diluted blume-capel model for the Fe-Al disordered alloys. *Physics Letters A*, v. 375, n. 21, p. 2089 – 2093, 2011. ISSN 0375-9601.
- [106] SANTOS-FILHO, J. et al. Monte Carlo studies of the cubic lattice mixed-bond Ising model. *Physica B: Condensed Matter*, Elsevier, v. 398, n. 2, p. 294–296, 2007. ISSN 0921-4526.

- [107] WOLFF, U. Collective monte carlo updating in a high precision study of the XY model. *Nuclear Physics B*, North-Holland, v. 322, n. 3, p. 759–774, 1989.
- [108] ARCHAMBAULT, P. et al. Universal magnetic fluctuations in the two-dimensional XY model. *Journal of Applied Physics*, v. 83, p. 7234, 1998.
- [109] PALMA, G.; ZAMBRANO, D. Analytical computation of the magnetization probability density function for the harmonic 2D XY model. *Arxiv preprint arXiv:0912.0420*, 2009.
- [110] CUCCOLI, A.; TOGNETTI, V.; VAIA, R. Two-dimensional XYZ model on a square lattice: A monte carlo simulation. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 52, n. 14, p. 10221–10231, Oct 1995.
- [111] BUTERA, P.; PERNICI, M. High-temperature expansions through order 24 for the two-dimensional classical XY model on the square lattice. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 76, n. 9, p. 092406, Sep 2007.
- [112] KOSTERLITZ, J. The critical properties of the two-dimensional XY model. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, Institute of Physics Publishing, v. 7, p. 1046–1060, 1974.
- [113] SUN, Y.-Z.; YI, L.; WYSIN, G. M. Berezinskii-kosterlitz-thouless phase transition for the dilute planar rotator model on a triangular lattice. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 78, n. 15, p. 155409, Oct 2008.
- [114] WEBER, H.; MINNHAGEN, P. Monte carlo determination of the critical temperature for the two-dimensional XY model. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 37, n. 10, p. 5986–5989, Apr 1988.
- [115] LI, Y.-H.; TEITEL, S. Finite-size scaling study of the three-dimensional classical XY model. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 40, n. 13, p. 9122–9125, Nov 1989.
- [116] OLSSON, P. Monte carlo analysis of the two-dimensional XY model. ii. comparison with the kosterlitz renormalization-group equations. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 52, n. 6, p. 4526–4535, Aug 1995.
- [117] HASENBUSCH, M. The Kosterlitz–Thouless transition in thin films: a Monte Carlo study of three-dimensional lattice models. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, IOP Publishing, v. 2009, p. P02005, 2009.
- [118] CASTRO, L.; PIRES, A.; PLASCAK, J. Low-temperature thermodynamic study of the diluted planar rotator model using a self-consistent harmonic approximation. *Journal of magnetism and magnetic materials*, Elsevier, v. 248, n. 1, p. 62–67, 2002.
- [119] DILLON, B. S.; CHIESA, S.; SCALETTAR, R. T. Monte carlo study of the two-dimensional vector Blume-Capel model. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 82, n. 18, p. 184421, Nov 2010.
- [120] PRESS, W. et al. *Numerical recipes in Fortran 77: the art of scientific computing*. [S.l.]: Cambridge university press Cambridge, UK, 2001.
- [121] MORE, J. The levenberg-marquardt algorithm: implementation and theory. *Numerical analysis*, Springer, v. 1, p. 105–116, 1978.

- [122] NELDER, J.; MEAD, R. A simplex method for function minimization. *The computer journal*, Br Computer Soc, v. 7, n. 4, p. 308, 1965.
- [123] EVERTZ, H.; LANDAU, D. Critical dynamics in the two-dimensional classical XY model: A spin-dynamics study. *Physical Review B*, APS, v. 54, n. 17, p. 12302–12317, 1996. ISSN 1550-235X.
- [124] WYSIN, G. M. Vacancy effects in an easy-plane heisenberg model: Reduction of t_c and doubly charged vortices. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 71, n. 9, p. 094423, Mar 2005.
- [125] GARCIA, R.; CHAN, M. Critical casimir effect near the ^3He - ^4He tricritical point. *Physical review letters*, APS, v. 88, n. 8, p. 86101, 2002.
- [126] BORGS, C.; KOTECKÝ, R. Finite-size effects at asymmetric first-order phase transitions. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 68, n. 11, p. 1734–1737, Mar 1992.
- [127] BUTERA, P.; COMI, M. High-temperature study of the kosterlitz-thouless phase transition in the XY model on the triangular lattice. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 50, n. 5, p. 3052–3057, Aug 1994.
- [128] MEHTA, S.; KIMBALL, M. O.; GASPARINI, F. M. Superfluid transition of ^4He for two-dimensional crossover, heat capacity, and finite-size scaling. *Journal of Low Temperature Physics*, Springer Netherlands, v. 114, p. 467–521, 1999. ISSN 0022-2291.
- [129] NHO, K.; MANOUSAKIS, E. Heat-capacity scaling function for confined superfluids. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 68, n. 17, p. 174503, Nov 2003.
- [130] SCHULTKA, N.; MANOUSAKIS, E. Crossover from two- to three-dimensional behavior in superfluids. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 51, n. 17, p. 11712–11720, May 1995.
- [131] FISHER, M. E.; UPTON, P. J. Universality and interfaces at critical end points. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 65, n. 19, p. 2402–2405, Nov 1990.
- [132] WILDING, N. Coexistence curve singularities at critical end points. *Physical Review Letters*, APS, v. 78, n. 8, p. 1488–1491, 1997.