

Ronaldo Givisiez Melo Rodrigues

**Sobre o uso dos zeros da função de partição no
estudo de transições de fase**

Brasil

Fevereiro 15, 2017

Ronaldo Givisiez Melo Rodrigues

**Sobre o uso dos zeros da função de partição no estudo
de transições de fase**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-graduação em Física da Universidade Federal de Minas Gerais, para a obtenção de Título de Mestre em Física.

Universidade Federal de Minas Gerais

Departamento de Física

Programa de Pós-Graduação

Orientador: Lucas Alvares da Silva Mól

Brasil

Fevereiro 15, 2017

Agradecimentos

Sou muito grato a minha família pelo apoio durante todos esses anos, principalmente aos meus pais, Elaine e Romero, nada disso seria possível sem vocês. Ao meu irmão pelos momentos de descontração e risadas. A todos os meus amigos, por dividirem os bons e maus momentos, pelas risadas nas mesas de bar e por sempre estarem dispostos a ajudar quando eu precisei. Em especial ao pessoal da física por tirarem minhas dúvidas e pelo café de todo dia.

Não posso deixar de agradecer ao pessoal do laboratório e aos professores Lucas Mól e Bismarck, pelas discussões, orientações e por fazerem do laboratório um bom lugar para se trabalhar.

Por último, agradeço ao CNPq e a CAPES pelo apoio financeiro.

Resumo

Os zeros da função canônica foram introduzidos por Fisher, como uma forma alternativa para o estudo das transições de fase. Porém, essa abordagem trouxe consigo alguns problemas, o tratamento analítico dos zeros de Fisher é complicado e muitas vezes impossível, sendo necessário uma abordagem numérica. Mesmo com o avanço tecnológico, ainda encontramos dois grandes problemas para a solução numérica dos zeros de Fisher, o polinômio gerado da função de partição canônica, possui como coeficientes a densidade de estados e seu grau depende do tamanho do sistema. Então, temos que lidar com polinômios de grau elevado, da ordem de 30.000 e com as imprecisões geradas ao fazermos operações com a densidade de estados, pois a diferença entre seu menor e maior termo é de 10^{400} . Visando resolver esses problemas, foi proposto um método alternativo [1], com base nos zeros de Fisher, capaz de contornar todos esses problemas. Após uma transformação simples, os coeficientes do polinômio passam a ser dados pelo histograma da energia do sistema, que possui valores entre $[0, 1]$ quando devidamente normalizado. Desta forma, podemos descartar termos menos relevantes no histograma, reduzindo o grau do polinômio drasticamente. Neste trabalho aplicamos esse novo método em dois sistemas com transições de fase diferentes, no modelo de Ising, onde ocorre a clássica transição de ordem e desordem e no o modelo do rotor planar, que sofre uma transição KT. Analisamos os efeitos do ponto de corte no histograma e discutimos o comportamento do algoritmo proposto em [1].

Abstract

Zeros of the partition function were introduced by Fisher as an alternative way to study phase transitions. However, this approach has arisen some issues, the analytical treatment is difficult and often impossible, requiring numerical methods. Despite the technological development, we still face two major problems for the Fisher zeros numerical solution, the polynomial generated by the canonical partition function has the coefficient given by density of states and their degree depends on the size of the system. Then we have to deal with high degree polynomials at the order of 30.000 and the imprecision generated by numerical computation using the density of states, which has the difference between their maximal and minimal value at the order of 10^{400} . Aiming the solution to those problems, an alternative method has been proposed [1] based on the Fisher zeros and able to solve these issues. After a simple transformation, the polynomials coefficients are given by the energy of the system, which has values between $[0, 1]$, if correctly normalized. This way, we have a clear criterion to select the most relevant coefficients of the polynomial, drastically reducing their degree. In this work, we apply this new method to Ising model and two-dimensional XY, analyzing the effects of the chosen cut in the histogram and discussing the behaviour of the proposal algorithm in [1].

Lista de ilustrações

Figura 1 – Exemplo de uma rede quadrada do modelo de Ising bidimensional.	13
Figura 2 – Exemplo de uma rede quadrada do modelo de rotor planar.	14
Figura 3 – Parte singular do potencial termodinâmico, encontrado pela teoria de Landau, em função da magnetização. Abaixo da temperatura crítica temos dois mínimos simétricos. Figura retirada de [2].	17
Figura 4 – Processo de reescala, definindo novos blocos de momentos magnéticos para a rede.	20
Figura 5 – Gráfico das funções reescaladas h' por m' , retirada de [3]. As medidas da magnetização pelo campo aplicado, foram feitas em um sistema ferromagnético de $CrBr_3$ para isotermas com temperaturas entre $T_c - 0.9K < T < T_c + 6.7K$, onde $T_c = 32.844K$	22
Figura 6 – Par de vórtice e anti-vórtice ligados.	24
Figura 7 – Histogramas para o modelo de Ising, rede de tamanho $L = 50$, para as temperaturas $T_1 = 2.25, T_2 = 2.30$ e $T_3 = 2.35$	29
Figura 8 – Valores para o calor específico utilizando o método do histograma múltiplo (quadrados) e o método de Monte Carlo (círculos), para o modelo de Ising em rede de tamanho $L = 50$	30
Figura 9 – Distribuição de probabilidade obtidas utilizando o método do histograma múltiplo. A simulações originais foram feitas nas temperaturas $T_1 = 2.25, T_2 = 2.30$ e $T_3 = 2.35$	30
Figura 10 – Mapa dos zeros da função de partição grande canônica, contendo uma região livre de zeros, ou seja, o sistema só possui uma única fase. Figura retirada de [4]	34
Figura 11 – Esquerda e Centro: Gráficos das funções P e $1/v$ em função da fugacidade, onde podemos observar que as funções são analíticas para todo z . Direita: Gráfico de P por v onde só temos a existência de uma única fase. Figura retirada de [4]	35
Figura 12 – Mapa dos zeros da função de partição grande canônica, contendo duas regiões livres de zeros, logo o sistema passa por uma transição de fase no ponto z_o . Figura retirada de [4]	35
Figura 13 – Esquerda e Centro: Gráficos das funções P e $1/v$ em função da fugacidade, onde podemos observar uma descontinuidade no ponto z_o , indicando uma transição de fase de primeira ordem. Direita: Gráfico de P por v , apresentando um platô, onde temos a coexistência de duas fases. Figura retirada de [4]	35

Figura 14 – Mapa dos zeros para o modelo de Ising com segundos vizinhos. As figuras possuem diferentes valores para as interações $R = J_1/J_2$, onde J_1 é a constante de acoplamento entre os primeiros vizinhos e J_2 é a constante de acoplamento para os segundos vizinhos [5].	37
Figura 15 – Convergência para a temperatura pseudo crítica em rede de tamanho $L = 20$. Escolhemos como ponto de corte no histograma 10^{-1} . Na figura da esquerda foi utilizando o critério de $ T_{i+1} - T_i < 10^{-3}$ e o algoritmo para após 10 passos, enquanto na figura da direita finalizamos o algoritmo após 23 passos.	41
Figura 16 – Esquerda: Parte imaginária do zero principal em função do número de passos. Não existe um valor fixo para a parte imaginária quando nos aproximamos da temperatura pseudo crítica, porém esperamos que está se encontre próxima de zero. Direita: Parte real do zero principal em função do número de passos. A medida que nos aproximamos da temperatura pseudo crítica, $\Re\{x_c\}$ tende a um.	41
Figura 17 – Modelo de Ising com $L = 20$, onde foram feitas simulações a uma temperatura $T = 2.30$. Esquerda: Ao todo temos 63 raízes, com a raiz principal estando no ponto $x_c = (0.9998, 0.1583)$ Direita: Histograma normalizado de forma que seu ponto de valor máximo seja igual a um. Desprezamos valores do histograma menores que 10^{-1}	42
Figura 18 – Modelo de Ising com $L = 20$, onde foram feitas simulações a uma temperatura $T = 2.30$. Esquerda: Ao todo temos 84 raízes, com a raiz principal estando no ponto $x_c = (1.0056, 0.1681)$ Direita: Histograma normalizado de forma que seu ponto de valor máximo seja igual a um. Desprezamos valores do histograma menores que 10^{-2}	43
Figura 19 – Modelo de Ising com $L = 20$, onde foram feitas simulações a uma temperatura $T = 2.30$. Esquerda: Ao todo temos 104 raízes, com a raiz principal estando no ponto $x_c = (1.0046, 0.1689)$ Direita: Histograma normalizado de forma que seu ponto de valor máximo seja igual a um. Desprezamos valores do histograma menores que 10^{-4}	43
Figura 20 – Gráfico log-log da dependência da susceptibilidade magnética com o tamanho da rede. Obtemos do ajuste linear (linha sólida), a relação dos expoentes críticos $\gamma/\nu = 1.756(3)$	44
Figura 21 – Temperatura pseudo crítica de T_c^{Cv} (esquerda) e T_c^x (direita) em função de $1/L$. As linhas sólidas representam o ajuste linear de onde obtemos $T_c^{Cv} = 2.269(0)$ e $T_c^x = 2.269(4)$	45

Figura 22 – Gráfico log-log de $Im\{x_c\}$ pelo tamanho da rede L em diferentes pontos de corte. Obtemos por meio de um ajuste linear os valores para o expoente $1/\nu_1 = 1.0684$, $1/\nu_2 = 1.0600$ e $1/\nu_3 = 1.0003$, com os pontos de corte 10^{-1} , 10^{-2} e 10^{-4} , respectivamente.	46
Figura 23 – Temperatura pseudo crítica em função de $1/L$, para os pontos de corte no histograma de 10^{-1} (esquerda) e 10^{-2} (direita). As linhas sólidas são os ajustes lineares de onde obtemos $T_c = 2.269(8)$ (esquerda) e $T_c = 2.267(9)$ (direita).	47
Figura 24 – Esquerda: Temperatura pseudo crítica em função de $1/L$, para o ponto de corte no histograma de 10^{-4} . A linha sólida é o ajuste linear de onde obtemos $T_c = 2.2679$. Direita: Para a rede de tamanho $L = 150$ e ponto de corte em 10^{-2} , temos os mapas de zeros de três amostras, os quais indicam zeros principais em diferentes posições, isso causa as flutuações indicadas pelas barras de erro no gráfico da figura 23 a direita. Com a posição dos zeros principais sendo de $x_c^1 = (0.9935, 2.0318 \times 10^{-2})$, $x_c^2 = (1.0071, 1.9214 \times 10^{-2})$ e $x_c^3 = (1.000, 2.2666 \times 10^{-2})$	48
Figura 25 – Gráfico da temperatura pseudo crítica indicada pela helicidade em função de $\ln(L)^{-2}$, onde foram utilizados as redes de tamanho $L = 60, 80, 100$ e 120 . O ajuste linear indica a temperatura crítica $T_{KT} = 0.8964(6)$	49
Figura 26 – Convergência do modelo de rotor planar em uma rede $L = 20$, onde escolhemos como ponto de corte no histograma 10^{-1} . Esquerda: Temperaturas iniciais $T_i = 0.9$ e $T_i = 3.0$, convergindo para $T_{KT} = 1.0963$. Direita: Parte do gráfico ampliada próximo ao ponto de convergência.	50
Figura 27 – Convergência do modelo de rotor planar em uma rede $L = 20$, onde escolhemos como ponto de corte no histograma 10^{-1} . Temperatura inicial $T_i = 0.5$, convergindo para $T_{KT} = 0.0$	50
Figura 28 – Comportamento dos zeros para um rede de tamanho $L = 20$. Esquerda: Parte real do zero principal em função do número de passos. Direita: Parte imaginária do zero principal em função do número de passos.	51
Figura 29 – Convergência do modelo de rotor planar em uma rede $L = 60$, onde escolhemos como ponto de corte no histograma 10^{-1} . Temperaturas iniciais $T_i = 1.085, 1.07, 1.06, 1.04, 1.03$ e 1.2 , convergindo para $T_f = 1.081, 1.05, 1.05, 1.041, 1.038$ e 1.038	51

Lista de tabelas

Tabela 1 – Valores dos expoentes críticos para algumas classes de Universalidade, retirado de [6]. d é a dimensão do sistema e n é a dimensionalidade do parâmetro de ordem.	18
Tabela 2 – Valores de $1/\nu$ para cada ponto de corte adotado.	46
Tabela 3 – Valores da temperatura crítica para cada ponto de corte adotado. . . .	47

Sumário

1	INTRODUÇÃO	10
2	MODELOS	12
2.1	Ising	12
2.2	Rotor planar	13
3	TRANSIÇÕES DE FASE	15
3.1	Fenomenologia de Landau	15
3.2	Expoentes críticos e classe de universalidade	17
3.3	Escala	18
3.4	Escala da tamanho finito	22
3.5	Transição Kosterlitz-Thouless	24
4	MÉTODOS DE SIMULAÇÃO	27
4.1	Monte Carlo	27
4.2	Histograma Múltiplo	29
5	ZEROS DA FUNÇÃO DE PARTIÇÃO	33
5.1	Zeros de Yang e Lee	33
5.2	Zeros de Fisher	36
5.3	Uma nova abordagem	38
6	RESULTADOS E DISCUSSÕES	40
6.1	Características do algoritmo	40
6.2	Modelo de Ising	44
6.3	Rotor planar	48
7	CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS	52
	REFERÊNCIAS	54
	APÊNDICES	57
	APÊNDICE A – MATRIZ COMPANHEIRA	58

1 Introdução

O fenômeno de transição de fase está ligado com mudanças bruscas nas propriedades do sistema, podendo ser observados em diversos lugares, alguns mais simples, como na sua própria casa, na forma da transição líquido-gás da água após ser aquecida ou de forma menos explícita, a desnaturação de proteínas quando temos febre. Outras transições só são observadas em laboratórios com condições muito específicas, como é o caso dos supercondutores, materiais onde os elétrons se movem sem nenhum tipo de resistência e dos superfluidos, onde o fluido não apresenta viscosidade. Esses fenômenos abrangem, não somente a física, mas a engenharia, biologia, medicina, química, entre outros. Sendo uma área de estudo abrangente e de caráter multidisciplinar.

O estudo sobre transições de fase se mostrou complicado e ao mesmo tempo muito rico. Foram necessários muitos anos desenvolvendo teorias e modelos matemáticos, para que começássemos a entender o processo de transições de fase. Partimos de teorias simplificadas como fenomenologia de Landau, a qual só conseguia explicar o fenômeno de forma qualitativa, até o desenvolvimento da teoria do grupo de renormalização, que conseguiu mostrar um comportamento de caráter mais universal presente nas transições de fase. Neste meio tempo, muitos prêmios Nobel foram dados para pesquisadores da área, pela descoberta da supercondutividade (1913) [7], desenvolvimento da teoria BCS (1972) [8], do superfluido (1978) [9], o grupo de renormalização (1982) [10], a transição de fase topológica, conhecida por transição KT (2016) [11] entre outros.

Com o avanço da tecnologia, conseguimos produzir computadores mais robustos, capazes de simular sistemas complexos e obter resultados mais precisos. Por isso, de tempos em tempos, revisitamos algumas ideias que por limitações tecnológicas, não foram mais utilizadas. Que é o caso dos zeros da função de partição, inicialmente proposto por Yang-Lee [12][13] no ensemble grande canônico, onde procuravam explicar como a energia livre desenvolvia uma não analiticidade no limite termodinâmico, foi estendida por Fisher para o ensemble canônico [14]. Porém, neste último caso, algumas dificuldades operacionais apareceram, a ideia básica por traz do método é reescrever a função de partição em uma forma polinomial, onde as suas raízes, no limite termodinâmico, teriam informações sobre os pontos de transição de fase.

Para utilizar os zeros de Fisher, temos que lidar com dois problemas, o grau elevado do polinômio que cresce com o tamanho do sistema e seus coeficientes, dados pela densidade de estados. Temos algoritmos capazes de resolver polinômios de ordem elevada, acima de 20.000 [15] [16][17] e também de estimar a densidade de estados [18][19]. Porém, os valores encontrados para a densidade de estados, conseguem facilmente superar a precisão

quadrupla dos computadores modernos e a diferença na ordem de grandeza entre o seu menor e maior valor, podem gerar erros numéricos alterando a posição das raízes e tornando qualquer resultado questionável.

Foi proposto um algoritmo capaz de resolver os problemas dos zeros de Fisher [1], reduzindo drasticamente o grau do polinômio, onde seus coeficientes são dados pela distribuição de probabilidade da energia, valores entre $(0, 1]$. O que torna os resultados mais confiáveis e com um custo computacional menor. Durante esse trabalho, aplicamos esse algoritmo em dois sistemas diferentes, o modelo de Ising e o modelo do rotor planar, afim de estudar as transições de fase do tipo ordem-desordem e as transições topológicas.

2 Modelos

Neste capítulo descrevemos os modelos utilizados no trabalho. Destacamos algumas características gerais e propriedades dos sistemas, sem nos aprofundarmos em conceitos sobre transições de fase, como o parâmetro de ordem, classe de universalidade, entre outros. Deixamos essas revisões para os capítulos seguintes.

2.1 Ising

O modelo de Ising foi profundamente estudado por físicos durante várias décadas, é um dos poucos modelos que possui solução exata, sendo muito utilizado no ensino de física estatística e em testes de novos algoritmos. Apesar de ser um modelo muito simplificado, apresenta transição de fase do tipo ordem e desordem para dimensões maiores que $d = 1$. A solução analítica para uma dimensão foi encontrada por Enerst Ising, que também dá o nome ao modelo. Para duas dimensões a solução foi encontrada por Osnager [20], muito tempo depois, em dimensões maiores não existe até hoje solução exata, sendo necessário uma abordagem numérica.

O modelo é constituído basicamente de momentos magnéticos localizados, espaçados por uma distância a_o em uma rede. Tem seu sentido fixo ao longo de um único eixo, podendo assumir valores $\sigma = \pm 1$. Existem diversas redes nas quais o sistema pode ser montado, como a rede triangular, kagomé, quadrada, entre outras. Deixamos como exemplo o modelo de Ising bidimensional em uma rede quadrada, figura 1, utilizada durante o trabalho e nos exemplos que daremos mais a frente.

A hamiltoniana do sistema é dada pela equação,

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \cdot \sigma_j + B \sum_i \sigma_i, \quad (2.1)$$

onde o somatório é realizado apenas entre os primeiros vizinhos $\langle i, j \rangle$, sendo J a constante de troca, $\vec{\sigma}_i = (\sigma_i^x, \sigma_i^y)$ a direção do momento magnético no sítio i e B o campo externo aplicado. Existem diferentes estados fundamentais para diferentes valores de J e B .

Com $J > 0$ o sistema possui um comportamento ferromagnético em seu estado fundamental, ou seja, os momentos magnéticos tendem a se alinhar em uma única direção. Na presença de um campo magnético B , essa direção é a mesma apresentada pelo campo. Desta forma, temos uma quebra de simetria do sistema, em altas temperaturas as excitações térmicas conseguem desordenar o sistema, fazendo com que os momentos estejam aleatoriamente apontando em uma das duas possíveis direções, resultando em uma magnetização total nula. Em baixas temperaturas, temos um sistema ordenado com a

maior parte dos momentos apontando na mesma direção e uma magnetização diferente de zero. Dizemos que a magnetização é o parâmetro de ordem do sistema. Podemos observar a transição entre a fase ordenada e a desordenada, observando a mudança no valor da magnetização.

Para $J < 0$ e $B = 0$ os momentos possuem comportamento antiferromagnético, estando antiparalelos aos seus vizinhos em seu estado de menor energia. Chamamos este estado fundamental de estado de Néel, onde ainda temos um comportamento de ordem, apesar de um pouco diferente do encontrado acima. Temos uma ordem no sentido de que todos os momentos estarão antiparalelos, como em um tabuleiro de xadrez, se considerarmos o momento $+1$ sendo a cor preta e o momento -1 sendo a cor branca. Neste caso, a magnetização é nula em baixas e altas temperaturas, sendo definido o parâmetro de ordem como a magnetização por cadeia, $m_i = (-1)^i \sigma_i$, onde os valores pares de i são os momentos da rede preta e i ímpar são os momentos da rede branca. Desta forma, ainda temos uma transição de fase do tipo ordem e desordem.

Apesar do modelo de Ising ter sido desenvolvido para estudo de sistemas magnéticos, ele também é usado em sistemas nos quais as variáveis assumem dois valores, como no gás de rede, onde encontramos um sítio da rede com ou sem gás [13].

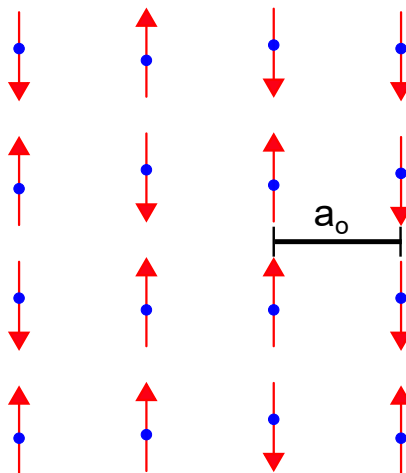


Figura 1 – Exemplo de uma rede quadrada do modelo de Ising bidimensional.

2.2 Rotor planar

O modelo XY bidimensional ou modelo de rotor planar, também é um modelo magnético similar ao modelo de Ising, porém os momentos possuem liberdade para executarem rotações no plano onde estão fixos, figura 2.

A hamiltoniana do sistema é dada por,

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{\sigma}_i \cdot \vec{\sigma}_j = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \cos(\theta_i - \theta_j) , \quad (2.2)$$

onde o somatório é realizado apenas entre os primeiros vizinhos $\langle i, j \rangle$, J é a constante de troca e o vetor bidimensional $\vec{\sigma}_i = (\sigma_i^x, \sigma_i^y)$ é o momento magnético do sítio i , com $\vec{\sigma}_i^2 = 1$.

Como a Hamiltoniana é parecida com a do modelo de Ising era de se esperar que teríamos uma ordem no sistema em baixas temperaturas, com os momentos magnéticos se alinhando em qualquer direção no plano. Porém este tipo de ordem não é observada, sendo assim o sistema não sofre uma transição de fase do tipo ordem-desordem. Já foi demonstrado por Mermin-Wagner [21], que sistema com simetria global contínua, como é o caso do rotor planar, não possuem ordem de longo alcance em temperaturas diferente de zero para $d < 3$. Não sendo possível definir um parâmetro de ordem como é o caso da magnetização para o modelo de Ising.

Mesmo com todos os indícios de que não é possível a ocorrência de uma transição de fase, o sistema possui uma em temperatura diferente de zero. Esta transição não pertence à classe de ordem-desordem, é um tipo diferente, onde defeitos topológicos tem papel fundamental. Chamamos de transição KT , após a descoberta e análise por Michael Kosterlitz e David J. Thouless [22]. Neste tipo de transição, temos defeitos tópicos do tipo vórtices que suprimem a ordem de longo alcance do sistema, fazendo com que o sistema não tenha um estado fundamental com momentos alinhados, como era de se esperar. No próximo capítulo dedicamos uma sessão para nos aprofundarmos um pouco no assunto.

O modelo XY bidimensional além de possuir uma transição de fase topológica, é utilizado para estudar outros sistemas, como filmes de superfluidos, supercondutores entre outros [23] [24][25].

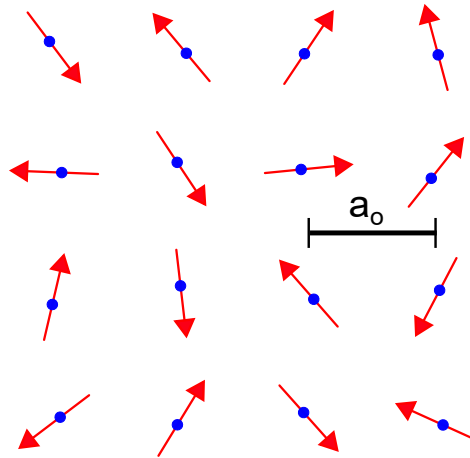


Figura 2 – Exemplo de uma rede quadrada do modelo de rotor planar.

3 Transições de fase

Neste capítulo iremos rever de forma breve alguns conceitos que foram peças chave para o desenvolvimento dos estudos atuais sobre transições de fase. Discutiremos a Fenomenologia de Landau, que é uma generalização dos modelos fenomenológicos da época, como o gás de Van der Waals e o ferromagneto de Curie-Weiss. Introduziremos os conceitos de expoentes críticos, classe de universalidade e leis de escala. Encerraremos com as ideias introduzidas por Kadanoff, que justificam o comportamento de escala do sistema.

3.1 Fenomenologia de Landau

A primeira classificação sobre transições de fase se deu por Ehrenfest em 1932, onde uma transição dita de ordem n , possui uma descontinuidade na n -ésima derivada do potencial termodinâmico. Após sua morte em 1933, foram feitas mudanças por Fisher, com o intuito de atualizar a classificação, acomodando resultados mais novos. Nesta classificação uma transição de primeira ordem, apresenta uma descontinuidade na primeira derivada da energia livre. Um exemplo é a transição líquido-sólido sofrida pela água, onde existe coexistência de fases e a energia interna apresenta uma divergência. Transições contínuas, ou de segunda ordem, apresentam a primeira derivada da energia livre contínua e sua segunda derivada descontínua ou infinita. Alguns sistemas magnéticos são bons exemplos para esse tipo de transição, onde a magnetização é contínua e a susceptibilidade magnética apresenta uma descontinuidade. Estudar sistemas que apresentam transições de fase mostrou-se ao mesmo tempo interessante e complicado, sendo necessárias várias décadas e o desenvolvimento de muitas teorias para começarmos a entender seu comportamento.

A primeira teoria fenomenológica geral, capaz de descrever o comportamento de modelos da época, como o gás de Van der Waals e o ferromagneto de Curie-Weiss, foi introduzida por Lev Landau. Todas essas teorias são chamadas de teorias clássicas de transições de fase, pois exigem aproximações que escondem o verdadeiro comportamento do sistema. Como será visto mais a frente, todos esses modelos compartilham a mesma classe de universalidade e não são condizentes com resultados experimentais.

O primeiro conceito introduzido por Landau é o de parâmetro de ordem, definido como uma grandeza que possui valor diferente de zero abaixo da temperatura crítica e se torna zero acima da mesma. Esta grandeza pode ser um escalar, vetor, tensor ou mesmo um número complexo, por isso encontrar o parâmetro de ordem do sistema pode ser muito trabalhoso. Um exemplo simples de um parâmetro de ordem é a magnetização do modelo de Ising, que possui um valor diferente de zero para baixas temperaturas $m = \pm 1$ e em altas temperaturas assume o valor $m = 0$.

Na teoria de Landau, assumimos que a energia livre é uma função analítica no ponto de transição de fase, dada por,

$$F(T, m) = U(S, m) - TS, \quad (3.1)$$

onde T é temperatura, S a entropia e U a energia interna definida pela primeira lei da termodinâmica ($dU = TdS - \delta W$). Temos uma certa ambiguidade em U , o trabalho δW pode ser escrito de duas formas, $\delta W = Hdm$ ou $\delta W = mdH$, no primeiro caso os momentos magnéticos executam um trabalho no campo H ao rotacionar, no segundo caso o campo H executa um trabalho nos momentos magnéticos fazendo com que sofram uma rotação. Independente da escolha os resultados são os mesmos, optamos por escrever a energia em função do momento magnético como na equação 3.1.

Por ser uma teoria fenomenológica, temos que reescrever a energia livre em função de variáveis de fácil acesso experimental, isso é feito por meio de mais uma transformada de Legendre, obtendo então a energia livre de Gibbs,

$$G(T, H) = F(T, m) - Hm. \quad (3.2)$$

Desta forma, ao fazemos uma expansão de $F(T, m)$ em série de potências, em função do parâmetro de ordem (m), encontramos a equação 3.3 para um sistema ferromagnético, sendo H o campo magnético e T a temperatura.

$$G(T, H; m) = a(T, H) - Hm + a'(T, H)m + b(T, H)m^2 + \\ + b'(T, H)m^3 + c(T, H)m^4 + \dots \quad (3.3)$$

Considerando uma expansão do tipo 3.3 para o modelo de Ising, levando em conta a simetria do parâmetro de ordem, onde $G(T, H; m) = G(T, H; -m)$, a campo nulo, encontramos a equação,

$$G(T; m) = a(T) + b(T)m^2 + c(T)m^4 + \dots \quad (3.4)$$

onde os termos ímpares foram eliminados.

Essa equação nos permite uma análise qualitativa do que ocorre na transição de fase. Tomando os coeficientes como $b(T) = b_o(T - T_c)$ e $a(T), c(T) > 0$, encontramos a energia livre do sistema para qualquer temperatura. Na figura 3, mostramos o que ocorre com a energia livre à medida que a temperatura se aproxima da temperatura crítica. Note que a função apresenta um único mínimo em $m = 0$ para $T > T_c$ e à medida que vamos nos aproximando da temperatura crítica, surgem dois mínimos em $m = \pm 1$. Essa é uma transição do tipo ordem e desordem, o sistema passa de um estado desordenado pela agitação térmica onde $m = 0$ para um estado ordenado com $m = \pm 1$.

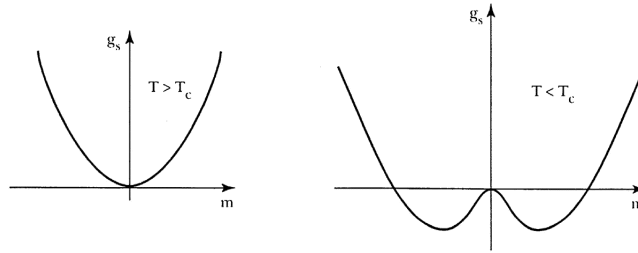


Figura 3 – Parte singular do potencial termodinâmico, encontrado pela teoria de Landau, em função da magnetização. Abaixo da temperatura crítica temos dois mínimos simétricos. Figura retira de [2].

Um comentário deve ser feito antes de prosseguirmos. O fato de assumirmos que a energia livre é analítica na transição, está errado. Quando Onsager chegou à solução exata para o modelo de Ising isso se tornou bem claro. O que Landau supôs foi que os termos de ordem maiores da expansão carregariam esse comportamento divergente, então procurou analisar os termos de ordem inferior para fazer previsões sobre a região do ponto crítico [26]. Dito isso, devemos destacar que essa teoria tem uma grande importância para a teoria de transições como uma ferramenta de caráter qualitativo, também possui papel importante na teoria de renormalização. Hoje em dia sabemos que as transições são caracterizadas não somente por descontinuidades, mas também por divergências na energia livre, como é o caso do modelo de Ising bidimensional. Então, de forma mais geral, dizemos que a energia livre desenvolve uma não analiticidade no ponto de transição de fase.

3.2 Expoentes críticos e classe de universalidade

Com base na teoria fenomenológica de Landau, na solução exata para o modelo de Ising bidimensional encontrada por Onsager [20][26], dados experimentais e expansões para baixas e altas temperaturas, foi observado que as grandezas termodinâmicas possuíam singularidades que seguiam uma lei de potência do tipo,

$$\begin{aligned}
 m(t, 0) &\sim B(-t)^\beta, \\
 \chi(t, 0) &\sim A_\pm |t|^{-\gamma}, \\
 C_h(t, 0) &\sim E_\pm |t|^{-\alpha}, \\
 m(0, h) &\sim D_\pm H^{-1/\delta}, \\
 \xi(t, 0) &\sim F_\pm |t|^{-\nu}, \\
 \Gamma(0, 0, r) &\sim K_\pm |t|^{-\eta},
 \end{aligned} \tag{3.5}$$

onde t é a temperatura reduzida $t = T - T_c$ e os expoentes em cada equação são chamados de expoentes críticos. O motivo para esse comportamento só ficou claro com a teoria de escala, discutida mais adiante.

Os expoentes críticos dependem de poucas características do sistema, como (i) a dimensão espacial d , (ii) a simetria e dimensionalidade do parâmetro de ordem e (iii) o alcance das interações. Com poucas características definindo o tipo de transição de fase, foram criadas classes de universalidades, onde sistemas com expoentes iguais são agrupados. O nome da classe de universalidade é dado de acordo com o sistema mais simples presente no conjunto. Apresentamos alguns valores para os expoentes de algumas classes de universalidade na tabela 1.

Universalidade	d	n	α	β	γ	δ	ν	η
Campo Médio	todas	todas	0	1/2	1	3	1/2	0
Ising	2	1	0(ln)	1/8	7/4	15	1	1/4
Ising	3	1	0.110(5)	0.325(2)	1.241(2)		0.630(2)	0.031(4)
XY	3	2	-0.007(6)	0.3455(20)	1.316(3)		0.669(2)	0.033(4)
Heisenberg	3	3	-0.115(9)	0.3645(25)	1.386(4)		0.705(3)	0.033(4)

Tabela 1 – Valores dos expoentes críticos para algumas classes de Universalidade, retirado de [6]. d é a dimensão do sistema e n é a dimensionalidade do parâmetro de ordem.

Podemos encontrar o expoente β do modelo Ising, previsto pela teoria de Landau. Para isso tomamos a derivada da energia livre em relação a magnetização,

$$H = \left(\frac{\partial G}{\partial m} \right)_T = 0 = 2bm + 4c(T)m^3 \quad , \quad (3.6)$$

e isolamos o termo da magnetização, obtendo,

$$m \approx \pm \sqrt{\frac{b_0}{2c(T)}} (-t)^{1/2} \quad . \quad (3.7)$$

O coeficiente encontrado é $\beta = 1/2$, muito diferente do que foi previsto pela solução exata do modelo de Ising, $\beta = 1/8$. A teoria de Landau, assim como a de Van der Waals e Currie-Weiss, são classificadas como teorias de campo médio, devido ao fato das aproximações feitas não conseguirem descrever de forma quantitativa o comportamento do sistema, tendo todas os mesmos expoentes críticos independentes da dimensão.

3.3 Escala

Transições de fase são fenômenos altamente correlacionados, um efeito de grupo, onde o todo assume um caráter mais importante do que um único componente. Neste

regime as teorias de campo médio falham, pois não levam em consideração a correlação do sistema, dada por,

$$\Gamma(|\vec{r}_j - \vec{r}_i|) = \langle \sigma_j \sigma_i \rangle - \langle \sigma_j \rangle \langle \sigma_i \rangle \quad , \quad (3.8)$$

em geral utilizam a aproximação de Bragg-Williams, onde $\langle \sigma_i \sigma_j \rangle \approx \langle \sigma_i \rangle \langle \sigma_j \rangle = m^2$, suprimindo as flutuações na correlação.

A teoria fenomenológica de Landau foi estendida para incorporar flutuações, chamamos de teoria de Landau-Ginzburg [26]. Onde encontramos um comportamento para a função de correlação do tipo,

$$\Gamma \sim \frac{e^{-r/\xi}}{r}, \quad (3.9)$$

$$\xi(T) = \sqrt{\frac{f}{b'(T - T_c)}} \quad \text{para } T > T_c, \quad (3.10)$$

$$\xi(T) = \sqrt{-\frac{f}{2b'(T - T_c)}} \quad \text{para } T < T_c \quad , \quad (3.11)$$

com r sendo a distância entre os vizinhos i, j e ξ o comprimento de correlação do sistema. Essa teoria mostrou-se válida para sistemas com dimensões $d \geq 3$. Apesar de permitir que flutuações ocorram, ainda continua sendo uma teoria de campo médio, gerando os expoentes clássicos, porém serve para uma análise qualitativa mais apurada do sistema. Um comportamento parecido para a correlação também foi encontrado por Ornstein-Zernike [27] [26], onde temos,

$$\Gamma(r) \sim r^{-p} e^{-r/\xi}. \quad (3.12)$$

As equações acima são de extrema importância para o desenvolvimento da teoria de escala. A ideia proposta por Kadanoff, é que o único comprimento importante para o sistema próximo à transição, é o comprimento de correlação. À medida que nos aproximamos da transição, ξ diverge, fazendo com que a função de correlação se torne uma lei de potência em r . Assim, perto da transição e para distâncias pequenas, o sistema se torna altamente correlacionado.

Para exemplificar as ideias de Kadanoff, tomamos como exemplo o modelo de Ising na rede quadrada. A correlação na criticalidade faz com que alguns estados do sistema sejam suprimidos. Por exemplo, se temos um sistema altamente correlacionado, onde vários sítios possuem momentos magnéticos apontando para cima e alguns poucos sítios apontando para baixo, a tendência é de que esses momentos próximos se alinhem para cima, desfavorecendo outros estados diferentes. Com isso em mente, podemos construir blocos de largura b , contendo b^d momentos magnéticos altamente correlacionados, como

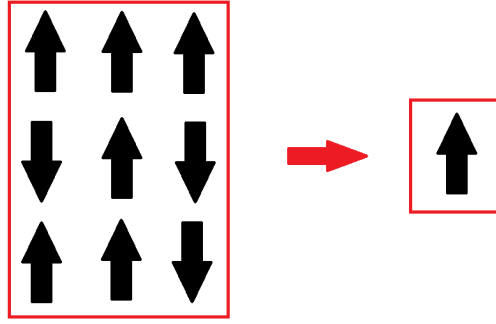


Figura 4 – Processo de reescala, definindo novos blocos de momentos magnéticos para a rede.

na figura 4 a esquerda, e substituí-los por um único momento magnético médio, figura 4 a direita.

Com base nessas ideias e assumindo que, (i) o sistema reduzido possui uma hamiltoniana com a mesma forma do sistema normal e (ii) que parâmetros que indicam a proximidade com a criticalidade tem um comportamento de escala da seguinte forma $t_b = tb^y$ e $h_b = hb^x$, onde t é a temperatura reduzida $t = T - T_c$ e h é o campo magnético reduzido. Como a energia livre de Gibbs é uma função homogênea, temos que,

$$G(t, h) = b^{-d}G(b^y t, b^x h), \quad (3.13)$$

ao tomarmos as derivadas da energia livre,

$$\begin{aligned} m(t, h) &= b^{(-d+x)}m(b^y t, b^x h), \\ \chi(t, h) &= b^{(2x-d)}\chi(b^y t, b^x h), \\ C_h(t, h) &= b^{(2y-d)}C_h(b^y t, b^x h), \end{aligned} \quad (3.14)$$

encontramos as leis de escalas apresentadas em 3.5. Considerando o caso especial em que $h = 0$, $b = |t|^{-1/y}$, temos que,

$$\begin{aligned} m(t, 0) &= |t|^{-(d-x)/y}m(-1, 0), \\ \chi(t, 0) &= |t|^{-(2x-d)/y}\chi(\pm 1, 0), \\ C_h(t, 0) &= |t|^{-(2y-d)/y}C_h(\pm 1, 0). \end{aligned} \quad (3.15)$$

Comprando os expoentes de 3.5 com 3.15, obtemos as relações

$$\begin{aligned} \beta &= \frac{d-x}{y}, \\ \gamma &= \frac{2x-d}{y}, \\ \alpha &= \frac{2y-d}{y}, \end{aligned} \quad (3.16)$$

Note que todos os expoentes dependem apenas das variáveis x e y , logo ao encontrarmos dois expoentes críticos quaisquer todos os outros também podem ser encontrados. Ainda é possível retirar relações de escalas dos expoentes, ao combinarmos 3.16, obtendo,

$$\alpha + 2\beta + \gamma = 2 \quad . \quad (3.17)$$

Existem várias relações entre os expoentes [27], assim como outros expoentes, os discutidos neste trabalho são os mais importantes para transições em modelos magnéticos.

Esperamos que o comprimento de correlação tenha um comportamento de escala do tipo $\xi_b = \xi/b$, onde ξ_b é a correlação após a reescala. Temos então a relação,

$$\xi(t, h) = b\xi(b^y t, b^x h), \quad (3.18)$$

com $h = 0$ e $b = |t|^{-1/y}$, a divergência do comprimento de correlação, é dada por,

$$\xi(t, 0) = |t|^{-\nu} \xi(\pm 1, 0), \quad (3.19)$$

com $1/y = \nu$. Também conseguimos encontrar a relação para a função de correlação, do tipo,

$$\Gamma(r, t, h) = b^{2(x-d)} \Gamma\left(\frac{r}{b}, b^y t, b^x h\right), \quad (3.20)$$

no ponto crítico onde $t = 0$, $h = 0$ e tomando $b = r$, temos,

$$\Gamma(r, 0, 0) = r^{-(d-2+\eta)} \Gamma(1, 0, 0). \quad (3.21)$$

As previsões feitas usando as leis de escala 3.15, foram confirmadas experimentalmente, como pode ser visto na figura 5 [3]. Neste gráfico, o sistema se encontra perto do ponto de transição $T_c = 32.844\text{K}$, seguindo a lei de escala,

$$m(t, h) = |t|^\beta m\left(\pm 1, \frac{h}{|t|^{\beta+\gamma}}\right) \quad . \quad (3.22)$$

Reescrevendo as variáveis em sua forma de escala, $m' = m|t|^{-\beta}$ e $h' = h|t|^{-(\gamma+\beta)}$, temos,

$$m'(h') = m(\pm 1, h') \quad , \quad (3.23)$$

onde o termo da direita é constante perto da transição. Então, como 3.23 não depende da temperatura e $m(\pm 1, h')$ é constante, ao fazermos um gráfico das funções reescaladas, todas as curvas independentes da temperatura, devem coincidir, como mostrado na figura 5.

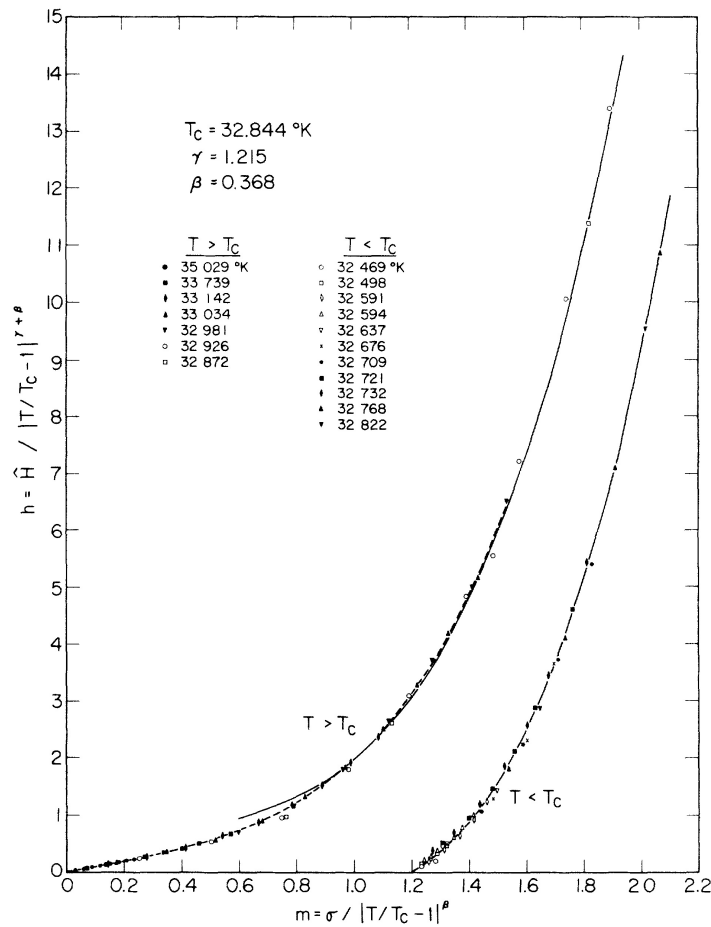


Figura 5 – Gráfico das funções reescaladas h' por m' , retirada de [3]. As medidas da magnetização pelo campo aplicado, foram feitas em um sistema ferromagnético de $CrBr_3$ para isotermas com temperaturas entre $T_c - 0.9K < T < T_c + 6.7K$, onde $T_c = 32.844K$.

3.4 Escala da tamanho finito

Em um sistema de tamanho finito não ocorrem transições de fase, todas as grandezas termodinâmicas são analíticas, não conseguimos reproduzir nenhum comportamento de divergência observado em transições de fase. Afim de superar essa dificuldade utilizamos o método de teoria de tamanho de escala finito, onde extrapolamos os resultados de diversas redes de tamanho finito, para uma rede de tamanho infinito.

A seguir, aplicaremos os conceitos de escala discutidos anteriormente para encontrarmos os expoentes críticos e a temperatura crítica. Utilizamos a susceptibilidade magnética como exemplo, mas o mesmo raciocínio pode ser utilizado para as outras grandezas termodinâmicas.

No ponto crítico o comprimento de correlação tende ao infinito, porém muitas vezes

não temos acesso a sistemas grandes, por limitações diversas. Então, o comprimento de correlação vai ser invariavelmente truncado em algum momento pela dimensão do sistema, esperamos que na temperatura crítica o comprimento de correlação chegue ao seu máximo, sendo $\xi \approx L$, onde L é o comprimento da rede.

Para descrever o que ocorre com grandezas como a susceptibilidade magnética em sistemas finitos, reescrevemos χ em função do comprimento de correlação, utilizando $b = |t|^{-\nu}$, $\xi \sim |t|^{-\nu}$ e $\chi \sim |t|^{-\gamma}$, disso temos que,

$$\chi \sim \xi^{\gamma/\nu}. \quad (3.24)$$

Esperamos que haja um corte em χ , assim como ocorre em ξ , para sistemas finitos. Escrevemos esse comportamento com a equação,

$$\chi = \xi^{\gamma/\nu} \chi_o(L/\xi), \quad (3.25)$$

onde χ_o é um função adimensional dada por,

$$\begin{aligned} \chi_o &= \text{cte para } \frac{L}{\xi} \rightarrow \infty \\ \chi_o &\sim \left(\frac{L}{\xi}\right)^{\gamma/\nu} \text{ para } \frac{L}{\xi} \rightarrow 0 \end{aligned} \quad (3.26)$$

Para encontrarmos os expoentes e a temperatura crítica, temos que reescrever 3.26 em função de variáveis conhecidas e de fácil acesso, substituindo $\xi = |t|^{-\nu}$, temos,

$$\chi = |t|^{-\gamma} \chi(L|t|^\nu). \quad (3.27)$$

A priori, não conhecemos a temperatura crítica ($t = T - T_c$), então fazemos mais uma substituição $x^\nu = L|t|^\nu$, para trocarmos a dependência em t por uma em L , como pode ser visto,

$$\chi = L^{\gamma/\nu} \tilde{\chi}_o(L^{1/\nu}|t|), \quad (3.28)$$

onde $\tilde{\chi}_o = x^{-\gamma} \chi(x^\nu)$. Note que à medida que nos aproximamos da temperatura crítica $|t| \rightarrow 0$, $\tilde{\chi}_o(0)$ tende a uma constante.

Perto da temperatura crítica, onde χ é máximo, a função só depende da dimensão do sistema, pois χ_o é constante, fazendo um gráfico da equação 3.29 e obtendo a inclinação da reta, encontramos a razão γ/ν .

$$\ln(\chi_L) = \frac{\gamma}{\nu} \ln(L) + \ln(\tilde{\chi}_o) \quad (3.29)$$

Para a temperatura crítica, utilizamos a relação $x_o^\nu = L|t|^\nu$, com $t = T_o - T_c$ e obtemos,

$$T_o = T_c + x_o L^{-1/\nu} \quad (3.30)$$

onde T_o é a temperatura pseudo crítica, a temperatura na qual, para um dado L , o χ é máximo.

3.5 Transição Kosterlitz-Thouless

Até agora falamos sobre transições de fase do tipo ordem e desordem, onde o sistema apresenta uma quebra de simetria espontânea após uma certa temperatura. Porém, existem sistemas de dimensões mais baixas, onde as flutuações térmicas se mostram mais importantes e são capazes de prevenir a ordem de longa distância [21]. Nestes sistemas as transições de ordem e desordem não ocorrem, mesmo a temperatura nula, sendo complicado até a definição de um parâmetro de ordem.

Apesar do modelo do rotor planar apresentar as características acima, o mesmo ainda passa por uma transição de fase, porém de um tipo diferente. Descoberta por Michael Kosterlitz e David J. Thouless [22], a transição de fase ocorre devido a defeitos topológicos do tipo vórtice. Em baixas temperaturas as excitações existem aos pares, vórtice e anti-vórtice ligados, como na figura 6, prevenindo o ordenamento do sistema. Em altas temperaturas esses pares tendem a se dissociar, o centro dos vórtices (Círculo e Triângulo) ficam livres, podendo se deslocar pela rede.

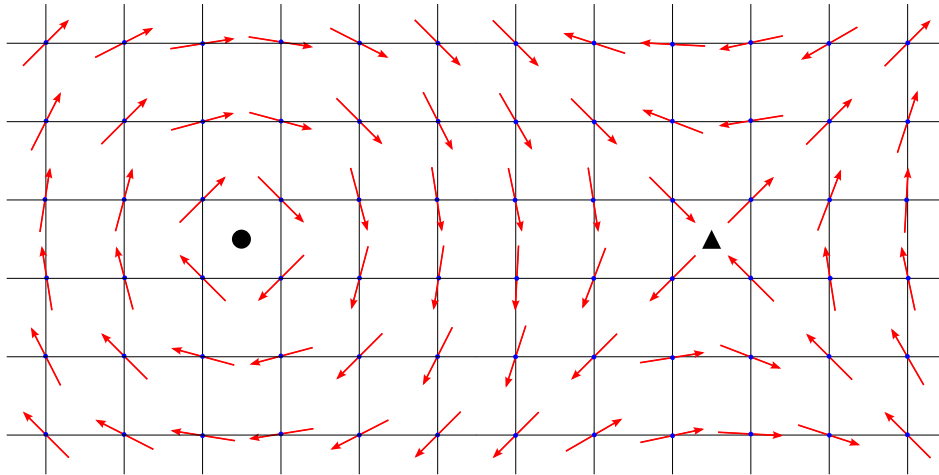


Figura 6 – Par de vórtice e anti-vórtice ligados.

A natureza da transição é completamente diferente das transições de primeira e segunda ordem, a função de correlação segue uma lei de potências para $T < T_{KT}$ e tem um decaimento exponencial para $T > T_{KT}$, como na relação,

$$\begin{aligned} \Gamma(r) &\propto r^{-\eta(t)} \text{ para } T < T_{KT} \text{ ,} \\ \Gamma(r) &\propto e^{-r/\xi(t)} \text{ para } T > T_{KT} \text{ ,} \end{aligned} \quad (3.31)$$

onde o expoente crítico η possui uma dependência em t que é a temperatura reduzida $t = \frac{T}{T_{KT}} - 1$. Sistemas que passam por uma transição de fase topológica, possuem uma linha de transições para $T < T_{KT}$. Então, a função de correlação diverge para todos os

pontos em baixas temperaturas e possui um comportamento exponencial em temperaturas altas, dado por,

$$\begin{aligned} \xi &\propto \infty && \text{para } T < T_{KT} \\ \xi &\propto e^{bt^{-\nu}} && \text{para } T > T_{KT} . \end{aligned} \quad (3.32)$$

O comportamento de escala é completamente diferente do encontrado para a transição do tipo ordem e desordem, como foi visto na tabela 3.5. Esse novo comportamento é chamado de escala essencial, abaixo vemos a escala para o calor específico e a susceptibilidade,

$$\begin{aligned} C_h(t) &\sim \xi^{-2} , \\ \chi(t) &\sim \xi^{2-\eta(t)} . \end{aligned} \quad (3.33)$$

Apesar do calor específico não divergir a medida que $|t| \sim 0$, em redes pequenas é observado um pico a uma temperatura um pouco maior do que T_{KT} [28]. Fazendo com que o sistema pareça passar por uma transição de segunda ordem. É comum utilizarmos a susceptibilidade magnética para encontrarmos a temperatura crítica ou, fazendo uma analogia com a densidade de um superfluido, utilizarmos a helicidade na direção de \hat{x} , dada por,

$$\Upsilon_x = -\frac{1}{2}\langle E \rangle - \beta \left\langle \left(-J \sum_{i \neq j} (\vec{r}_{ij} \cdot \hat{x}) (\sigma_i^x \sigma_j^y - \sigma_i^y \sigma_j^x) \right)^2 \right\rangle , \quad (3.34)$$

onde $\langle E \rangle$ é a energia média por spin (a média do segundo termo também é feita por spin), L é o tamanho da rede e $\sigma_i^{\hat{u}}$ é momento magnético do i -ésimo spin na direção de \hat{u} . O módulo da helicidade mede a resposta do sistema a uma torção. No limite termodinâmico a interseção de Υ com a reta $\Upsilon = 2T/\pi$ nos dá a temperatura de transição T_{KT} . Uma análise do comportamento dos vórtices se faz necessária para compreender o processo de transição de fase. A energia necessária para criar um único vórtice, é dada por,

$$E_{uni} = J\pi \ln \frac{L}{a} \quad (3.35)$$

com L sendo o tamanho do sistema e a o espaçamento de rede. Note que para um sistema de tamanho infinito, onde a transição de fase ocorre de fato, o custo energético para criar um vórtice é muito grande devido à dependência em L , sendo impossível ser excitado por flutuações térmicas.

Aparentemente poderíamos descartar qualquer contribuição dada pelos vórtices ao sistema, já que não seriam relevantes no processo de transição de fase. Porém, ao levarmos em conta pares de vórtices e antivórtices, sendo criados juntos, encontramos uma equação para energia, dada por,

$$E_{par} = J2\pi \ln \frac{r}{a} , \quad (3.36)$$

onde r é a distância entre os centros dos vórtices. Desta forma, os pares podem ser excitados pelas flutuações térmicas, em sistemas grandes, ao contrário de um único vórtice. O mecanismo encontrado durante a transição de fase, é o processo de dissociação desses pares. Em baixas temperaturas $T < T_{KT}$, temos pares ligados que desordenam o sistema apenas localmente e acima de $T > T_{KT}$, os pares se desconectam, estando completamente livres na rede e provocando uma desordem, indicando a transição de fase.

Fazendo uma analogia com o gás de Coulomb neutro [25], consideramos os vórtices e os antivórtices, como cargas de sinais opostos. Com isso, podemos montar a energia livre para um único vórtice,

$$F = E - TS = J\pi \ln \frac{L}{a} - Tk_b \ln \frac{L^2}{a^2} \quad , \quad (3.37)$$

onde k_b é a constante de Boltzmann, a entropia é dada pelas possíveis posições que um vórtice poderia ocupar na rede. Então, no ponto de transição de fase, temos um balanço entre a energia e a entropia, onde esperamos que a energia livre seja zero. Disso encontramos como temperatura crítica $T_{KT} = J\pi/2k_b$.

Esta é uma visão fenomenológica simplificada do comportamento do sistema nas imediações da temperatura de transição e contém os ingredientes básicos para seu entendimento. Ressalta-se nesse ponto o caráter topológico conferido à essa transição. O que difere as duas fases é a ordem topológica e não o ordenamento macroscópico do sistema! Por esta visão e outras contribuições envolvendo o papel da topologia no entendimento dos estados da matéria, David Thouless, Michael Kosterlitz e Duncan Haldane foram agraciados com o prêmio Nobel de 2016 [11].

4 Métodos de Simulação

4.1 Monte Carlo

Para o ensemble canônico, onde o sistema se encontra em um banho térmico a uma temperatura T , a média de uma grandeza A qualquer é dada pela equação,

$$\langle A \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\{\sigma\}} A_{\sigma} e^{-\beta E_{\sigma}}, \quad (4.1)$$

onde Z é a função de partição, A_{σ} o valor de A no estado σ , k_b é a constante de Boltzmann e $\beta = 1/k_b T$ é a temperatura inversa. Note que na equação 4.1, temos um termo que identificamos como a probabilidade de encontrarmos o sistema em um estado σ , dada por,

$$p_{\sigma} = \frac{1}{Z} e^{(-\beta E_{\sigma})}, \quad (4.2)$$

mais conhecida como distribuição de Boltzmann.

Ao gerarmos uma sequência de estados que seguem esta probabilidade, as médias termodinâmicas tornam-se médias simples, dadas por,

$$\langle A \rangle = \frac{1}{N} \sum_i^N A_i, \quad (4.3)$$

pois já estaríamos sorteando os estados com os pesos corretos. Abaixo discutimos como devemos gerar esses estados de forma a garantir que sigam a probabilidade de Boltzmann.

Para gerar uma sequência de estados, usamos um processo de Markov, onde cada novo estado é gerado dependendo apenas do estado anterior, não levando em conta os estados pelos quais o sistema passou antes. Criamos assim uma **Cadeia de Markov**. Para um processo de Markov a taxa de transição de um estado ν para o estado μ , dada por $P(\mu \rightarrow \nu)$, deve possuir as características abaixo.

- 1) A taxa de transição $P(\mu \rightarrow \nu)$ não deve variar com o tempo.
- 2) O estado gerado ν , só depende do estado anterior μ .
- 3) Deve obedecer à equação,

$$\sum P(\mu \rightarrow \nu) = 1. \quad (4.4)$$

Para garantir que o sistema siga a distribuição de probabilidade escolhida, p_σ , a cadeia de Markov tem que atender algumas condições além das já citadas. Devemos assegurar também a condição de **Ergodicidade**, fazendo com que todos os estados possíveis do sistema possam ser acessados, desde que o sistema tenha tempo suficiente para isso. Por último a condição de **Balanco Detalhado**, onde nos certificamos de que o sistema tenha a mesma probabilidade de transição do estado $(\mu \rightarrow \nu)$, como para a transição $(\nu \rightarrow \mu)$. Considerando a probabilidade do sistema se encontrar em um estado μ com sendo p_μ , escrevemos em termos matemáticos a condição de balanço detalhado,

$$p_\mu P(\mu \rightarrow \nu) = p_\nu P(\nu \rightarrow \mu) \quad . \quad (4.5)$$

Seguindo essas restrições garantimos a convergência para a distribuição de probabilidade, p_σ escolhida, neste caso a distribuição de Boltzmann 4.2. Existem várias formas de escolhermos os estados do sistema gerando uma cadeia de Markov e respeitando a distribuição de Boltzmann. O algoritmo mais utilizado para isso é o Algoritmo de Metropolis, descrevemos os passos utilizados para o modelo de Ising [29][30].

- 1) Gerar uma configuração aleatória da rede.
- 2) Sortear um único Spin.
- 3) Inverter a direção deste Spin.
- 4) Calcular a diferença de energia da rede antes e depois da inversão ($\Delta E = E_f - E_i$).
- 5) Gerar um número aleatório no intervalo de $[0,1)$.
- 6) Calcular $\exp(-\Delta E/K_bT)$, comparar este resultado com o número aleatório gerado e:
 - Se o número aleatório for menor que $\exp(-\Delta E/K_bT)$, a configuração é aceita e o Spin permanece invertido.
 - Se o número aleatório for maior que $\exp(-\Delta E/K_bT)$, a configuração não é aceita e o Spin não é invertido.
- 7) Escolher um novo sítio e seguir o algoritmo a partir de 2).

Após repetirmos esse processo N vezes, dizemos que um passo de Monte Carlo foi dado, onde N é o número de sítios na rede. Durante os primeiros passos temos um transiente, chamado de tempo de termalização, onde os estados ainda não seguem a distribuição de probabilidade desejada. Sendo assim, devemos descartar esses passos, garantindo que as medidas serão feitas com o sistema em equilíbrio.

4.2 Histograma Múltiplo

O método de Monte Carlo possui algumas desvantagens, as simulações são feitas em uma temperatura única e temos que esperar o sistema termalizar antes de fazermos as medidas termodinâmicas, o que é um processo lento se for feito várias vezes. Imagine que uma simulação é feita em uma temperatura T_1 , se quisermos obter alguma informação sobre $T_1 + \delta$, seria necessário refazer todo o processo de termalização e amostragem novamente, mesmo para uma temperatura próxima. As técnicas de repesagem contornam esse problema, utilizando as informações que obtemos na simulação em T_1 , estendemos esses resultados para uma temperatura próxima $T_1 + \delta$.

O método apresentado a seguir combina vários histogramas de energia [30][31] obtidos em temperaturas diferentes, como os da figura 7, onde $N(E)$ é o número de estados acessados com energia E . A sobreposição dos histogramas é essencial para o método. Considere o histograma da temperatura T_2 , a amostragem diminui à medida que nos afastamos do centro, temos pouca informação sobre o sistema nas bordas. Porém, a falta de informação no histograma de T_2 é compensada pelos outros dois histogramas nas temperaturas T_1 e T_3 .

Combinando os três histogramas, conseguimos extrair informações de um intervalo de temperatura, muito além das que foram amostradas. A figura 8, compara o calor específico obtido em simulações de Monte Carlo para várias temperaturas e as obtidas pelo método do histograma múltiplo utilizando três temperaturas. A precisão do método começa a falhar à medida que nos afastamos muito das temperaturas simuladas, devido à falta de informação. A figura 9 mostra os histogramas repesados gerados para diversas temperaturas, quando nos afastamos muito o histograma é destruído, indicando que naquela região não temos uma amostragem boa e os resultados não são confiáveis, limitando assim a aplicação do método.

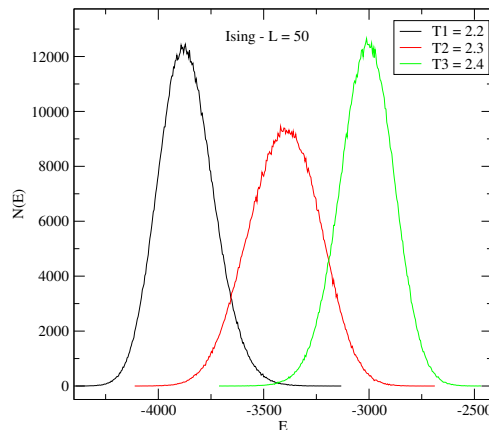


Figura 7 – Histogramas para o modelo de Ising, rede de tamanho $L = 50$, para as temperaturas $T_1 = 2.25, T_2 = 2.30$ e $T_3 = 2.35$

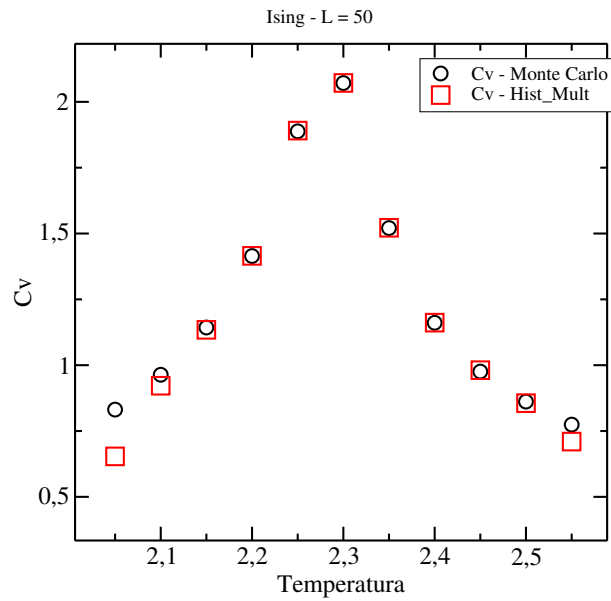


Figura 8 – Valores para o calor específico utilizando o método do histograma múltiplo (quadrados) e o método de Monte Carlo (círculos), para o modelo de Ising em rede de tamanho $L = 50$

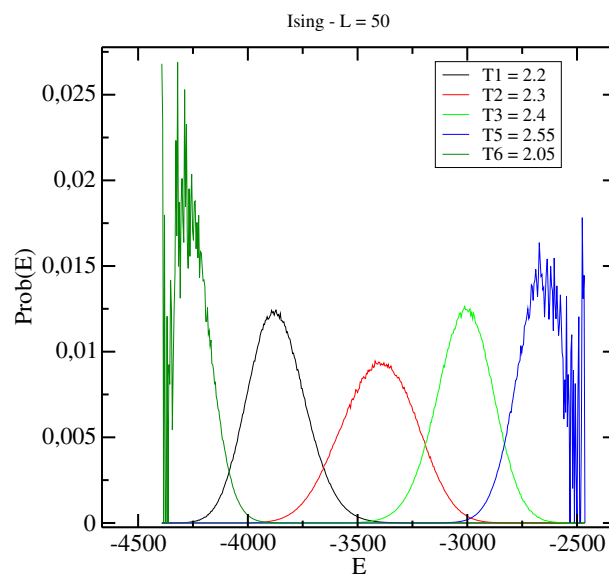


Figura 9 – Distribuição de probabilidade obtidas utilizando o método do histograma múltiplo. A simulações originais foram feitas nas temperaturas $T_1 = 2.25, T_2 = 2.30$ e $T_3 = 2.35$.

Passemos agora ao detalhamento do método. A probabilidade de acessarmos um estado com energia E , é dado por,

$$P(E) = \frac{g(E)e^{(-\beta E)}}{Z}, \quad (4.6)$$

onde $g(E)$ é o número de estados com energia E do sistema, mais conhecida como densidade de estados. Uma estimativa dessa probabilidade após n medidas é,

$$P(E) = \frac{N(E)}{n} , \quad (4.7)$$

onde $N(E)$ é o número de vezes que o estado com energia E foi acessado e n é o número de amostras. Ao combinarmos 4.6 com 4.7, obtemos a densidade de estados em função do histograma da energia. Fazendo várias simulações em diferentes temperaturas, obtemos um conjunto de densidades de estado,

$$g_i(E) = \frac{N_i(E)Z_i}{n_i e^{-\beta_i E}} . \quad (4.8)$$

A ideia agora é combinar essas densidades de estados, fazendo com que os histogramas com uma amostragem melhor em determinadas regiões, tenham um peso maior. A média por peso é dada pela equação,

$$\bar{x} = \frac{\sum_i x_i w_i}{\sum_j w_j} = \frac{\sum_i x_i / \sigma_i^2}{\sum_j 1 / \sigma_j^2} , \quad (4.9)$$

onde w é o peso associado a cada medida i . Escolhendo $w_i = 1/\sigma_i^2$, onde σ_i é o desvio associado a cada medida, estamos tomando a média de x dando maior importância para os valores com o menor desvio.

Ao escrevermos a densidade de estados exata para uma temperatura T_i , levando em consideração todos os histogramas possíveis, obtemos,

$$g(E) = \frac{\overline{N_i(E)}Z_i}{n_i e^{-\beta_i E}} , \quad (4.10)$$

onde $\overline{N_i(E)}$ é a média dos histogramas a uma temperatura T_i . Note que a única fonte de erro nessa equação é baseada na amostragem do nosso histograma, se fosse possível fazer infinitas simulações em β_i , teríamos a densidade de estados exata. Logo, o erro na medida de $g_i(E)$ é dado por,

$$\sigma_i = \frac{\Delta N_i(E)}{n_i} \frac{Z_i}{e^{-\beta_i E}} = \frac{\sqrt{\overline{N_i(E)}}}{n_i} \frac{Z_i}{e^{-\beta_i E}} , \quad (4.11)$$

elevando σ ao quadrado e utilizando 4.10, encontramos,

$$\sigma_i^2 = \frac{\overline{N_i(E)}}{n_i^2} \left[\frac{Z_i}{e^{-\beta_i E}} \right]^2 = \frac{g(E)^2}{\overline{N_i(E)}} , \quad (4.12)$$

onde supõem-se que as medidas são descorrelacionadas e independentes e que, portanto seguem uma distribuição normal. Dado o desvio de cada medida i , podemos voltar à equação 4.9 e calcular a melhor aproximação para densidade de estados $g(E)$,

$$\overline{g(E)} = \frac{\sum_i g(E)_i / \sigma_i^2}{\sum_j 1 / \sigma_j^2} = \frac{\sum_i N_i(E)}{\sum_j n_j Z_j^{-1} e^{-\beta_j E}} . \quad (4.13)$$

A densidade de estados ainda depende da função de partição Z_j de cada uma das temperaturas β_j , podemos encontrá-la utilizando a própria função de partição,

$$Z_k = \sum_E g(E) e^{-\beta_k E} = \sum_E \frac{\sum_i N_i(E)}{\sum_j n_j Z_j^{-1} e^{\beta_k - \beta_j E}} , \quad (4.14)$$

que é uma equação transcendental. Resolvemos a equação acima de forma iterativa [30], escolhemos um valor inicial para Z_j , obtemos um Z_k , que será o nosso próximo Z_j , a cada vez que fazemos isso, nos aproximamos do valor real de Z_k , tendendo a um valor fixo.

Ao calcularmos a função de partição $Z(\beta)$, equação,

$$Z(\beta) = \sum_E \frac{\sum_i N_i(E)}{\sum_j n_j Z_j^{-1} e^{\beta_k - \beta_j E}} \quad (4.15)$$

conseguimos obter qualquer grandeza termodinâmica. Deixamos como exemplo as equações para a energia e magnetização,

$$U(\beta) = \sum_E E g(E) \frac{e^{-\beta E}}{Z(\beta)} = \frac{1}{Z(\beta)} \sum_E E \frac{\sum_i N_i(E)}{\sum_j n_j Z_j^{-1} e^{\beta_k - \beta_j E}} \quad (4.16)$$

$$m(\beta) = \sum_E \bar{m}(E) g(E) \frac{e^{-\beta E}}{Z(\beta)} \quad (4.17)$$

onde a magnetização média para cada energia $m(E)$, é dada por

$$m(E) = \frac{\sum_i^n m_i \delta_{E, E_i}}{\sum_i^n \delta_{E, E_i}} . \quad (4.18)$$

Em termos de simulação, temos que montar um histograma com a média da magnetização para cada energia amostrada, o mesmo se aplica se quisermos calcular a magnetização quadrada m^2 , assim obtemos estimativas para a média microcanônica da equação 4.18.

5 Zeros da função de partição

Discutiremos como as primeiras ideias sobre os zeros da função de partição surgiram, tendo como base a análise dos zeros da grande função de partição, feitas por Yang e Lee. A partir disso, abriremos a discussão sobre os zeros de Fisher, onde estendemos os conceitos para o ensemble canônico, mostrando seus problemas com o tratamento analítico e numérico. Ao final do capítulo, descrevemos um algoritmo capaz de contornar os principais problemas encontrados pelos zeros de Fisher, facilitando muito a análise numérica de qualquer sistema

5.1 Zeros de Yang e Lee

A teoria de escala e o grupo de renormalização foram um sucesso para a teoria de transições de fase, porém não era claro como a energia livre desenvolvia uma singularidade a medida que se aproximava do ponto de transição. Yang e Lee resolveram essa questão utilizando a grande função de partição canônica, dada por,

$$\Theta = \sum_N^M Z(\beta, N)z^N, \quad (5.1)$$

onde a fugacidade é dada por $z = e^{\beta\mu}$ e Z é a função de partição canônica. Propuseram que a grande função de partição assumiria o valor zero no ponto de transição, fazendo com que a energia livre,

$$\phi = -\frac{1}{\beta} \ln \Theta. \quad (5.2)$$

desenvolvesse uma singularidade.

Para entender como a grande função de partição assume o valor zero, note que Θ possui a forma de um polinômio de grau M em z , com os coeficientes dados por $Z(\beta, N)$. Desta forma, podemos reescrever Θ em função de suas raízes,

$$\Theta = \zeta \prod_i^M \left(1 - \frac{z}{z_i}\right), \quad (5.3)$$

onde z_i é a i -ésima raiz do polinômio e ζ é uma constante que pode ser ignorada quando $\Theta = 0$. Como esse polinômio possui coeficientes reais positivos, suas raízes são pares conjugados complexos e não são encontradas no eixo real positivo. Então, somos levados a considerar a fugacidade como uma grandeza complexa, que no limite termodinâmico, $V \rightarrow \infty$, assume um valor real. Para isso ocorrer é necessário que uma das raízes toque o eixo real positivo, indicando que no limite termodinâmico aquele ponto é um ponto de transição de fase.

Segundo Yang e Lee [12][13], uma transição de fase ocorre quando no limite termodinâmico, temos um acumulo de raízes em algum ponto do eixo real positivo. Isto é descrito em forma de dois teoremas matemáticos,

Teorema I: Para qualquer $z > 0$, o limite,

$$F = \lim_{V \rightarrow \infty} \frac{1}{V} \ln \Theta, \quad (5.4)$$

existe, é contínuo, monotonicamente crescente em z e independente da forma de V .

Teorema II: Se em uma região R do plano complexo z , contendo um segmento do eixo real positivo livre de raízes, então $V^{-1} \ln \Theta$ e suas derivadas são analíticas em respeito a z . Além disso, a operação de derivada e limite comutam,

$$\lim_{V \rightarrow \infty} \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{V} \ln \Theta = \frac{\partial}{\partial z} \lim_{V \rightarrow \infty} \frac{1}{V} \ln \Theta. \quad (5.5)$$

Suponha que a região R não possua nenhuma raiz real no eixo positivo de z , figura 10. Neste caso não ocorre transição de fase, as funções P e v , são contínuas em z , assim como $P(v)$, figura 11.

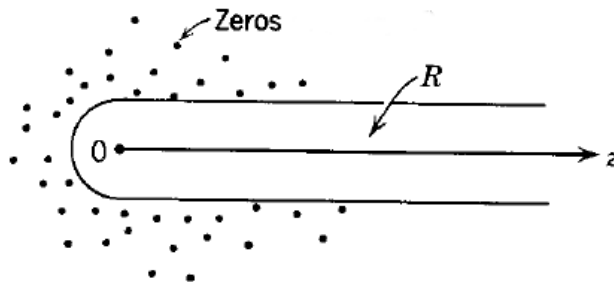


Figura 10 – Mapa dos zeros da função de partição grande canônica, contendo uma região livre de zeros, ou seja, o sistema só possui uma única fase. Figura retirada de [4]

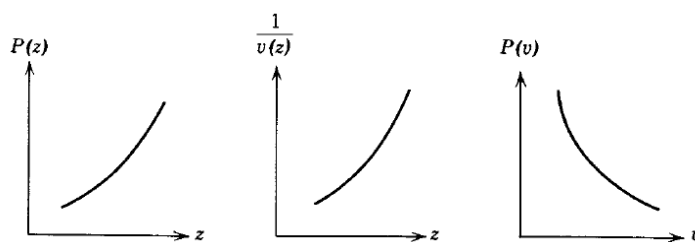


Figura 11 – **Esquerda e Centro:** Gráficos das funções P e $1/v$ em função da fugacidade, onde podemos observar que as funções são analíticas para todo z . **Direita:** Gráfico de P por v onde só temos a existência de uma única fase. Figura retirada de [4]

Agora imagine que algum zero da função de partição grande canônica se aproxima do eixo real em z_0 , conseguimos definir duas regiões R_1 e R_2 , livre de zeros, figura 12. Nesta situação, P é contínuo como indicado pelo Teorema I, porém, sua derivada é descontínua em z_0 , v sofre um salto neste ponto, figura 13 no centro, com $P(v)$ exibindo um platô, indicando uma coexistência de fases, figura 13 a direita.

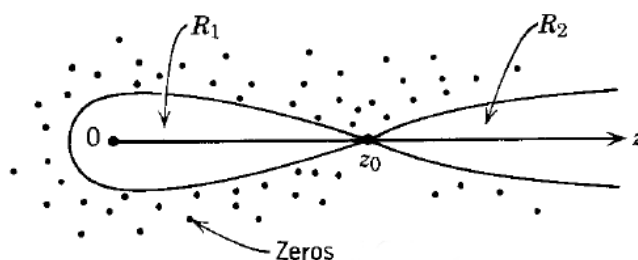


Figura 12 – Mapa dos zeros da função de partição grande canônica, contendo duas regiões livres de zeros, logo o sistema passa por uma transição de fase no ponto z_0 . Figura retirada de [4]

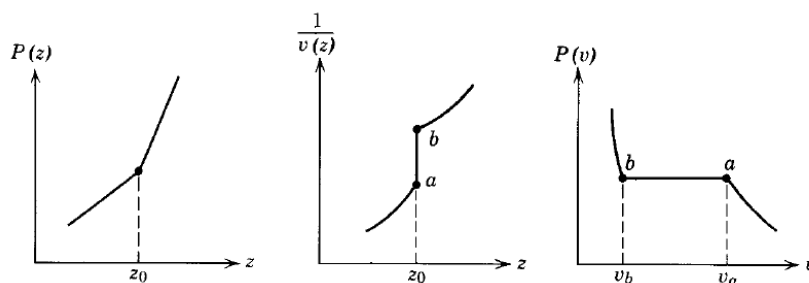


Figura 13 – **Esquerda e Centro:** Gráficos das funções P e $1/v$ em função da fugacidade, onde podemos observar uma descontinuidade no ponto z_0 , indicando uma transição de fase de primeira ordem. **Direita:** Gráfico de P por v , apresentando um platô, onde temos a coexistência de duas fases. Figura retirada de [4]

Abordando o problema utilizando os zeros da função de partição, Yang e Lee demonstraram de forma rigorosa, como a energia livre desenvolve uma singularidade no limite termodinâmico. Previram que os zeros da grande função de partição iriam se acumular próximo ao eixo real positivo, tocando-o no ponto transição de fase. Essa teoria foi aplicada pelos autores no modelo do gás de rede e no modelo de Ising [13], posteriormente foi expandida para o ensemble canônico por Fisher, que é o tema da próxima sessão.

5.2 Zeros de Fisher

Com a equivalência entre os ensembles estatísticos, é de se esperar que os zeros da função de partição compartilhem da mesma característica. Com isso em mente, Fisher propôs o estudo dos zeros utilizando o ensemble canônico. O desenvolvimento da função de partição em um polinômio é semelhante aos de Yang-Lee, porém, temos uma temperatura complexa em vez de um potencial químico complexo. O comportamento dos zeros são semelhantes em alguns pontos. Estão distribuídos em um plano complexo, ausentes no eixo real positivo, exceto em sistemas onde ocorrem transições de fase. Neste caso, no limite termodinâmico, algumas raízes tocam o eixo real positivo, indicando as temperaturas onde ocorrem as transições de fase.

Dada a função de partição canônica, discretizamos a energia como feito em [32], onde $E_n = \varepsilon_0 + n\varepsilon$, disso encontramos que,

$$Z = \sum_E g(E)e^{-\beta E} = e^{-\beta\varepsilon_0} \sum_n g_n e^{-\beta n\varepsilon} \quad \text{com } n = 0, 1, 2, \dots, M, \quad (5.6)$$

onde $\beta = 1/k_b T$ é o inverso da temperatura e g_n é a densidade de estados. Tomando $z = e^{-\beta\varepsilon}$, encontramos o polinômio,

$$Z = e^{-\beta\varepsilon_0} \sum_n g_n z^n. \quad (5.7)$$

Ao resolvermos a equação $Z = 0$, encontramos suas raízes, mais conhecidas como zeros de Fisher.

Cada raiz z_i , possui uma temperatura associada, dada pela relação,

$$\beta_i = -\frac{\varepsilon}{\ln z_i}. \quad (5.8)$$

Com isso, podemos montar tanto um mapa de zeros no plano complexo de z , ou em um plano complexo de β , sem que percamos informação. A temperatura crítica está relacionada com o zero mais próximo do semi-eixo real, chamado de zero principal ou zero líder, o qual, no limite termodinâmico toca o eixo real positivo. Assim como nos zeros de Yang-Lee, isso indica um ponto de transição de fase, mas neste caso encontramos uma temperatura relacionada a esse ponto.

Apesar da semelhança entre os zeros de Fisher e os de Yang-Lee, o tratamento analítico dos zeros no ensemble canônico é complicado, muitas vezes impossível. Pois são extremamente sensíveis a várias características dos sistemas, como a dimensão, tipo de interação, temperatura crítica, condições de contorno e etc. Deixamos como exemplo o mapa dos zeros de Fisher, figura 14, onde o sistema estudado foi, o modelo de Ising em uma rede quadrada com segundos vizinhos. Não existe uma regra para a disposição dos zeros canônicos. A localização das raízes, assim como a densidade delas, variam à medida que aumentamos o sistema, ou seja, o zero principal muda sua localização no limite termodinâmico e o contorno de zeros tende a se deformar em direção ao eixo real, sendo guiado pelo zero principal.

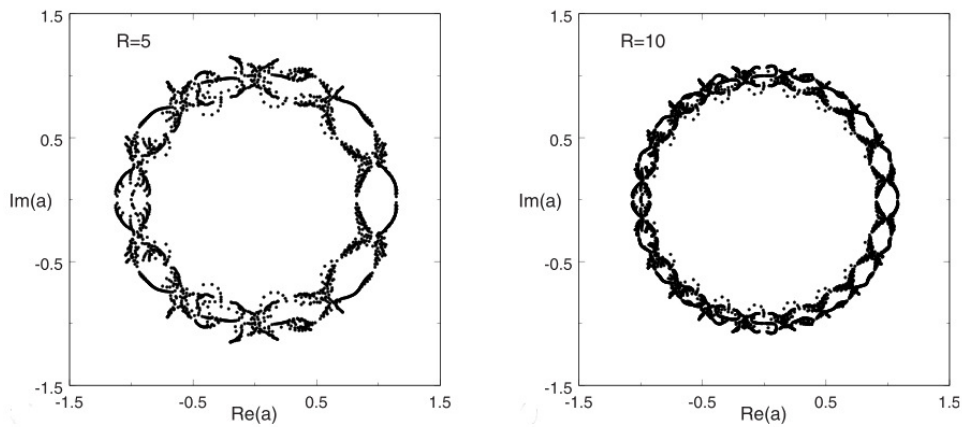


Figura 14 – Mapa dos zeros para o modelo de Ising com segundos vizinhos. As figuras possuem diferentes valores para as interações $R = J_1/J_2$, onde J_1 é a constante de acoplamento entre os primeiros vizinhos e J_2 é a constante de acoplamento para os segundos vizinhos [5].

Devido ao mal comportamento dos zeros e sua sensibilidade à características do sistema, os trabalhos encontrados na literatura são predominante numéricos [32] [33][5]. Porém, até mesmo com os computadores atuais, temos certas dificuldades para analisar os zeros da função de partição canônica. O grau do polinômio cresce com o tamanho do sistema, podendo chegar facilmente a 30.000, isso para redes consideradas pequenas, como a rede 100x100 em um modelo XY. Mesmo utilizando programas como o Mathematica e o Matlab, pode levar dias para encontrar todas as raízes.

O segundo maior empecilho para análise numérica vem dos coeficientes, dados pela densidade de estados, como pode ser visto na equação 5.7. Encontrar a forma exata da densidade de estados é uma tarefa árdua, sendo conhecida apenas para poucos sistemas. Existem alguns algoritmos que conseguem obter uma boa estimativa dela, como o Replica Exchange Wang-Landau [29][19][18]. Mesmo assim, quando encontrada, temos que lidar com valores que variam de extremamente altos ($g(E) = 10^{440}$), excedendo facilmente a precisão quadrupla do computador, a valores muito pequenos ($g(E) = 2$), gerando

imprecisões mesmo para operações simples como subtração e divisão, isso torna o valor encontrado para algumas raízes questionável [1].

5.3 Uma nova abordagem

O método proposto, visa resolver todas as dificuldades encontradas com os zeros de Fisher, contornando o problema do grau elevado do polinômio e as complicações geradas pela densidade de estados. Para isso, basta multiplicarmos a equação 5.6 por $1 = e^{-\beta_o E} e^{\beta_o E}$, encontrando,

$$Z = \sum_E h(E, \beta_o) e^{-E(\beta - \beta_o)} , \quad (5.9)$$

onde o termo $h(E, \beta_o) = g(E) e^{-\beta_o E}$ é identificado como a distribuição de probabilidade de Boltzmann não normalizada.

Para encontrar a forma polinomial, discretizamos a energia $E_n = \varepsilon_o + n\varepsilon$ e definimos as variáveis $h(n, \beta_o) = h(E_n, \beta_o)$ e $x = e^{-\varepsilon(\beta - \beta_o)}$, temos então a equação,

$$Z_{\beta_o} = e^{-\varepsilon_o \beta} \sum_n h(n, \beta_o) x^n . \quad (5.10)$$

Os zeros encontrados por esse polinômio são simplesmente os zeros de Fisher reescalados, $x_n = e^{-\varepsilon \beta_o} z_n$, sendo assim as características dos zeros são as mesmas, continuam espalhados pelo plano complexo e no limite termodinâmico um dos zeros toca o eixo real.

Iremos reproduzir as discussões presente em [1], onde é proposto um algoritmo para encontrar a temperatura de transição utilizando o polinômio 5.10. Considere o histograma na temperatura crítica, onde $\beta_o = \beta_c$, o zero mais próximo do eixo real será dado por $x_c = e^{-\varepsilon(\beta_c - \beta_c)} = 1$, no limite termodinâmico. Com isso, temos um critério que indica a aproximação da temperatura crítica, perto de β_c , o zero principal vai se aproximar do ponto $(1, 0)$. Para sistemas finitos, esperamos que exista uma pequena parte imaginária, que decresce à medida que o tamanho do sistema aumenta. Os zeros do polinômio 5.10, serão chamados a partir de agora de zeros reduzidos.

Além de termos um critério claro para a proximidade do ponto de transição ($x_c \sim 1$), podemos utilizar o histograma em β_c para reduzir o grau do polinômio. Estados de energia menos relevantes na transição de fase, serão descartados ao introduzirmos um corte em $h(n, \beta_c)$, desprezando termos pequenos. Desta forma, reduzimos o grau do polinômio drasticamente, sem introduzir um desvio relevante no zero principal. Ressalta-se que para temperaturas distantes de β_c , já não podemos supor que não haverá desvios significativos do zero principal. Esta premissa é o que nos permite fazer aproximações sucessivas neste método, levando à determinação da temperatura crítica sem o conhecimento da densidade de estados completa.

Deixamos o pseudo código do algoritmo proposto abaixo. Os critérios para o ponto de corte do histograma e para a finalização do algoritmo serão discutidos no próximo capítulo.

O algoritmo de convergência é dado por:

- 1) Escolha um β_o^j inicial.
- 2) Faça um histograma $h(n, \beta_o^j)$ em β_o^j .
- 3) Ache os n zeros do polinômio com os coeficientes $h(n, \beta_o^j)$.
- 4) Encontre o zero x_c mais próximo do ponto $(1, 0)$ e:
 - Se x_c está perto o suficiente de $(1, 0)$, pare o algoritmo.
 - Se não, faça $\beta_o^{j+1} = -\frac{\ln \Re\{x_c\}}{\varepsilon} + \beta_o^j$ e volte ao item 1).

6 Resultados e Discussões

6.1 Características do algoritmo

Nesta sessão, iremos demonstrar o funcionamento do algoritmo de convergência e explicitar os pontos que não foram bem definidos anteriormente. Tomamos como exemplo a rede quadrada do modelo de Ising de tamanho $L = 20$, fazemos o processo de termalização em cada temperatura, isto é, são feitos $100L^2$ passos de Monte Carlo antes de se realizar qualquer medida, como foi descrito ao final da seção 4.1. Em seguida são feitos mais 10^6 passo de Monte Carlo para obtermos os valores da energia e montarmos o histograma $h(E)$. Iniciamos a simulação na temperatura $T_i = 3.0$, onde após um passo do algoritmo descrito na sessão 5.3, obtemos uma nova temperatura T_{i+1} . O algoritmo procede dessa maneira de forma indefinida, portanto precisamos escolher um critério de finalização, optamos pela escolha da condição $|T_{i+1} - T_i| < 10^{-3}$. Temos de escolher também o ponto de corte no histograma, para este exemplo escolhemos 10^{-1} , mas à frente iremos discutir as consequência desta escolha nos resultados obtidos.

Em cada passo de temperatura é necessário encontrar as raízes de um polinômio, para isso utilizamos o algoritmo QZ [17], o qual faz uso do formalismo de autovalores [34]. Deixamos uma breve demonstração no apêndice A, de como encontrar as raízes de um polinômio usando os autovalores da matriz companheira. Este algoritmo pode ser encontrado no pacote LAPACK [35], uma biblioteca de álgebra linear amplamente utilizada na comunidade científica, ou no Mathematica [36]. Optamos por utilizar o LAPACK, pois este é um software livre e de fácil instalação.

O processo de convergência para a temperatura pseudo crítica pode ser visto na 15 a esquerda, onde foi utilizado o critério $|T_{i+1} - T_i| < 10^{-3}$ e o algoritmo é finalizado após 10 passos, encontramos uma temperatura $T = 2.300$. Na figura 15 a direita, deixamos o algoritmo ir até 23 passos, note que o mesmo começa a oscilar em torno de uma temperatura média, neste caso $T = 2.301$. A diferença entre as temperaturas dos dois casos é da ordem de 10^{-3} , o que válida a escolha do nosso critério de finalização do algoritmo. Apesar de termos escolhido a diferença de temperatura como critério, poderíamos ter usado a diferença da parte real ou da parte imaginária, como pode ser visto na figura 16, ambas convergem após 10 passos.

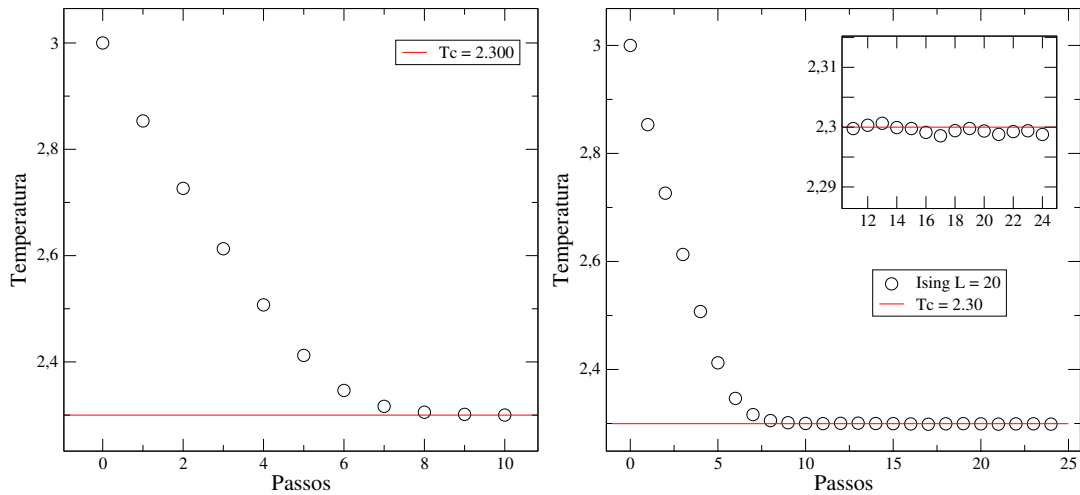


Figura 15 – Convergência para a temperatura pseudo crítica em rede de tamanho $L = 20$. Escolhemos como ponto de corte no histograma 10^{-1} . Na figura da **esquerda** foi utilizando o critério de $|T_{i+1} - T_i| < 10^{-3}$ e o algoritmo para após 10 passos, enquanto na figura da **direita** finalizamos o algoritmo após 23 passos.

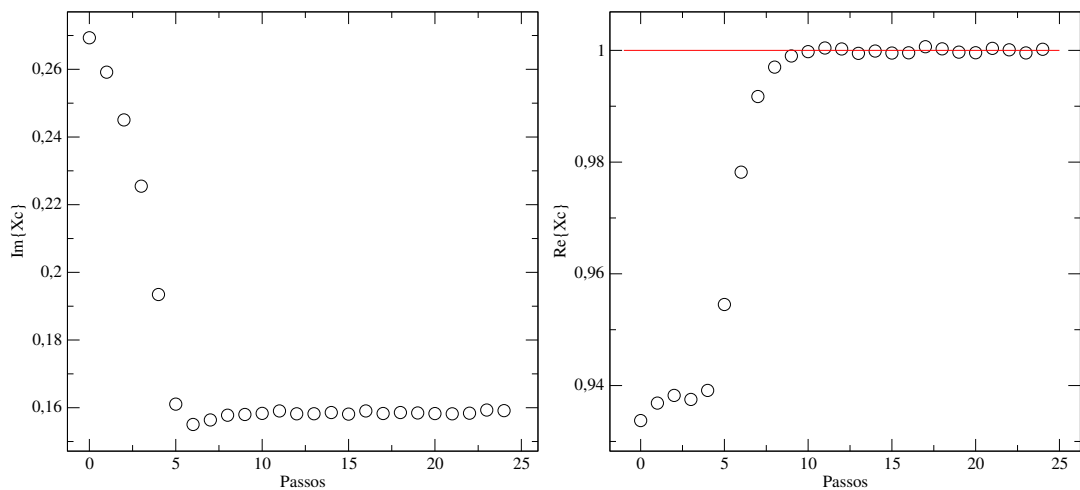


Figura 16 – **Esquerda:** Parte imaginária do zero principal em função do número de passos. Não existe um valor fixo para a parte imaginária quando nos aproximamos da temperatura pseudo crítica, porém esperamos que está se encontre próxima de zero. **Direita:** Parte real do zero principal em função do número de passos. A medida que nos aproximamos da temperatura pseudo crítica, $\Re\{x_c\}$ tende a um.

Uma das propriedades mais importantes dos zeros reduzidos é a liberdade que temos para desprezar alguns termos do polinômio, alterando assim o número de raízes a serem encontradas. Porém, é necessário estudar os efeitos dessas alterações para que possamos entender até que ponto conseguimos reduzir o polinômio, sem que percamos informações relevantes. Montamos o mapa de zeros na temperatura de transição, para os pontos de corte de 10^{-1} , 10^{-2} e 10^{-4} , figuras 17, 18 e 19. Perceba que o número de raízes aumenta consideravelmente e se espalham sem uma forma específica no plano complexo, porém o zero principal, destacado por um círculo preto, possui uma certa estabilidade independente do ponto de corte. Na próxima sessão iremos estudar os efeitos causados por essa escolha nas grandezas do sistema.

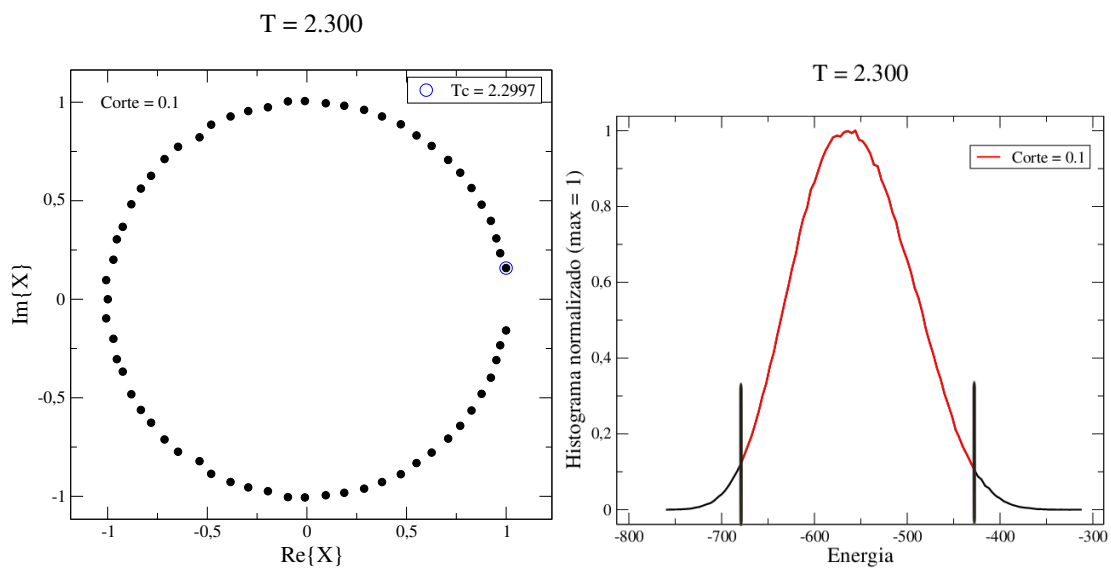


Figura 17 – Modelo de Ising com $L = 20$, onde foram feitas simulações a uma temperatura $T = 2.30$. **Esquerda:** Ao todo temos 63 raízes, com a raiz principal estando no ponto $x_c = (0.9998, 0.1583)$ **Direita:** Histograma normalizado de forma que seu ponto de valor máximo seja igual a um. Desprezamos valores do histograma menores que 10^{-1} .

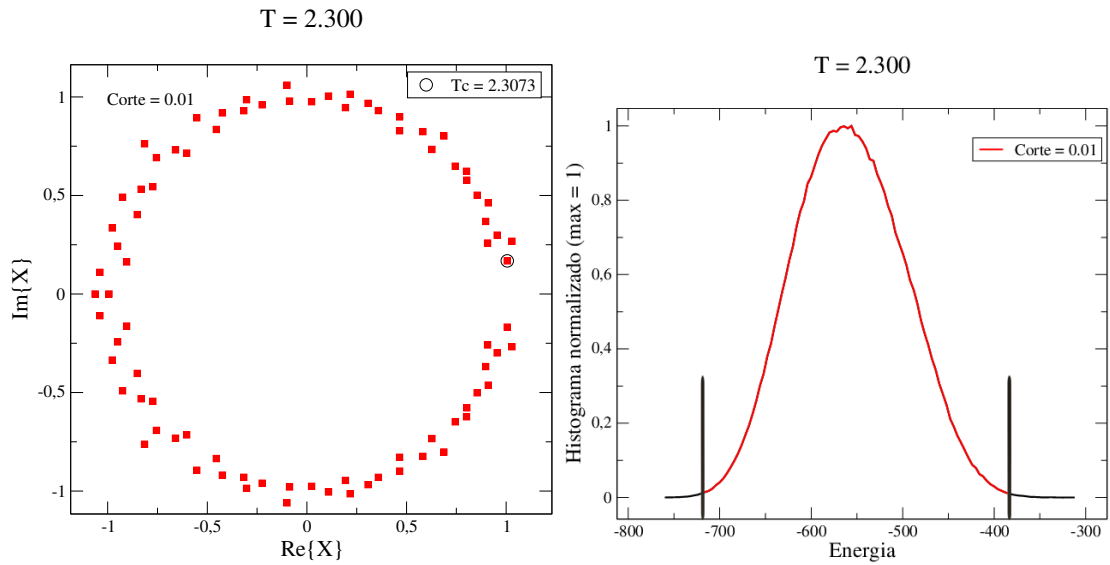


Figura 18 – Modelo de Ising com $L = 20$, onde foram feitas simulações a uma temperatura $T = 2.30$. **Esquerda:** Ao todo temos 84 raízes, com a raiz principal estando no ponto $x_c = (1.0056, 0.1681)$ **Direita:** Histograma normalizado de forma que seu ponto de valor máximo seja igual a um. Desprezamos valores do histograma menores que 10^{-2} .

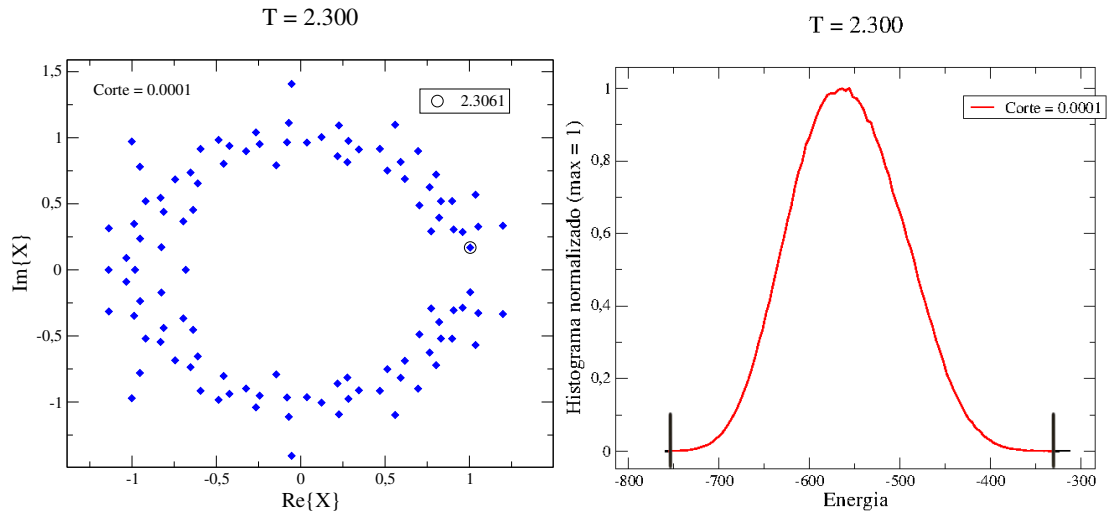


Figura 19 – Modelo de Ising com $L = 20$, onde foram feitas simulações a uma temperatura $T = 2.30$. **Esquerda:** Ao todo temos 104 raízes, com a raiz principal estando no ponto $x_c = (1.0046, 0.1689)$ **Direita:** Histograma normalizado de forma que seu ponto de valor máximo seja igual a um. Desprezamos valores do histograma menores que 10^{-4} .

6.2 Modelo de Ising

Os resultados a seguir foram obtidos por simulações de Monte Carlo, utilizando o algoritmo descrito na seção 4.1. Foram executados $100L^2$ passos de Monte Carlo para a temarlização a cada temperatura e 10^6 passos para as medidas de calor específico, susceptibilidade e energia. Por uma questão de eficiência, executamos as simulações da seguinte forma: Escolhemos uma rede pequena, por exemplo $L = 20$, encontramos a temperatura pseudo crítica e fazemos mais duas simulações em temperaturas próximas, desta forma conseguimos obter os histogramas de energia para as temperaturas no intervalo $T_c^{20} - dt < T_c^{20} < T_c^{20} + dt$. Utilizando o algoritmo de histogramas múltiplos, encontramos a temperatura pseudo crítica indicada pelos máximos do calor específico C_v^{20} e da susceptibilidade magnética χ^{20} . Seguindo para a próxima rede de tamanho $L = 30$, esperamos que a temperatura pseudo crítica não seja muito diferente da encontrada em T_c^{20} , pois as redes possuem tamanhos semelhantes. Sendo assim, fazemos simulações em três temperaturas, $T_c^{20} - dt$, T_c^{20} e $T_c^{20} + dt$, repetimos o processo encontrando a temperatura onde está o máximo de C_v^{30} e a utilizamos nas simulações da próxima rede.

Foram estudadas as redes de tamanho $L = 20, 30, 40, 50, 60, 70, 90, 120, 150, 170, 190$ e 220 , onde encontramos o máximo de $C_v(L)$ e $\chi(L)$. Utilizando as leis de escala discutidas anteriormente, montamos um gráfico log-log, da temperatura indicada pelo máximo de $\chi(L)$ em função de L , figura 20, a partir de um regressão linear, encontramos o expoente crítico $\gamma/\nu = 1.756(3)$. Para encontrar a temperatura crítica consideramos $\nu = 1.0$, fazemos os gráficos das temperaturas pseudo críticas indicadas por C_v e χ , em função de $1/L$, figura 21. Obtemos duas temperatura crítica, $T_c^{C_v} = 2.269(0)$ e $T_c^\chi = 2.269(4)$, ambas próximas do valor previsto pela solução exata $T_c = 2.2691$.

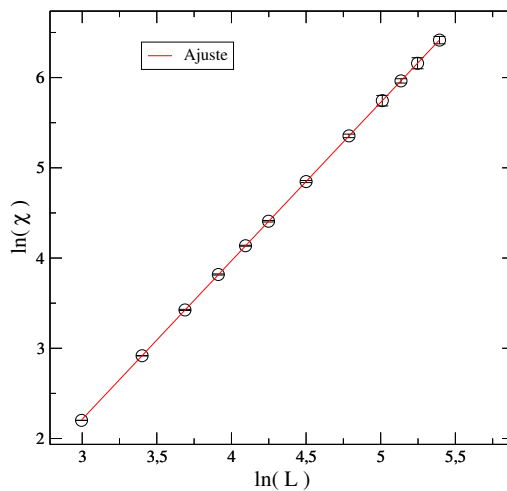


Figura 20 – Gráfico log-log da dependência da susceptibilidade magnética com o tamanho da rede. Obtemos do ajuste linear (linha sólida), a relação dos expoentes críticos $\gamma/\nu = 1.756(3)$.

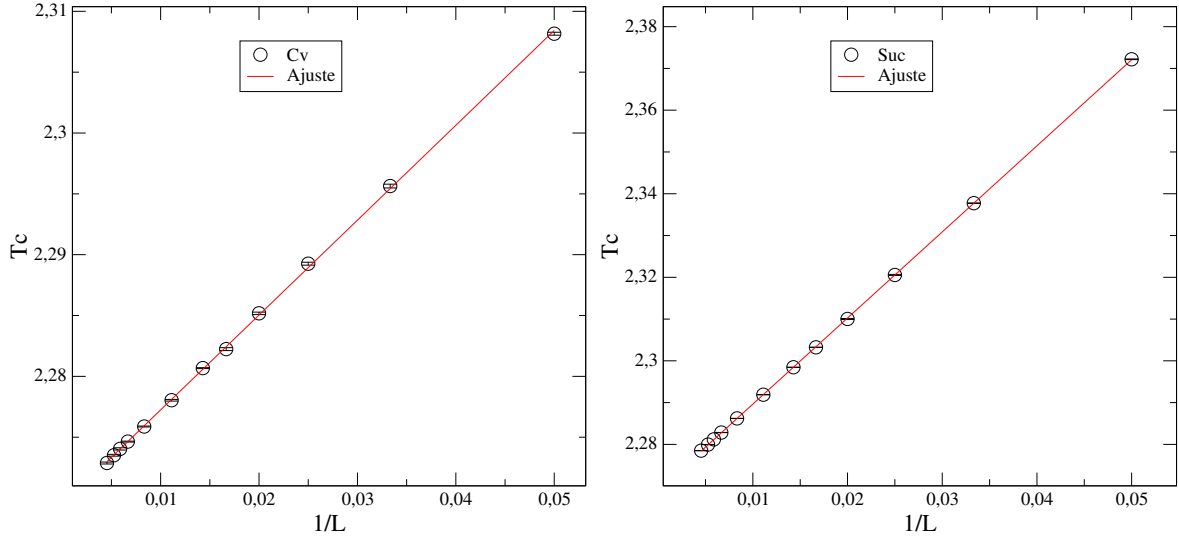


Figura 21 – Temperatura pseudo crítica de T_c^{Cv} (esquerda) e T_c^X (direita) em função de $1/L$. As linhas sólidas representam o ajuste linear de onde obtemos $T_c^{Cv} = 2.269(0)$ e $T_c^X = 2.269(4)$.

Utilizando os zeros reduzidos, conseguimos encontrar a temperatura crítica e o expoente ν do nosso modelo. A partir dos conceitos de escala de tamanho finito, sabemos que próximo a temperatura crítica o sistema segue a lei de escala $T_c(L) \sim T_c + aL^{-1/\nu}$, dada a relação dos zeros reduzidos com a temperatura, esperamos observar um comportamento semelhante como $x_c(L) \sim x_c + cL^{-1/\nu}$. Porém, a parte real do zero principal tende a um perto de T_c , logo, somente a parte imaginária poderia escalar como $Im\{x_c(L)\} \sim Im\{x_c\} + cL^{-1/\nu}$. Sendo assim, utilizando os zeros conseguimos obter o expoente ν e a temperatura crítica $T_c^{x_c}$.

Os resultados para os zeros reduzidos foram obtidos utilizando os histogramas gerados perto de T_c^{Cv} , em cada rede L . Esperamos que os zeros converjam para uma temperatura próxima as indicadas por T_c^{Cv} ou por T_c^X . Utilizamos uma combinação do algoritmo de convergência e do histograma múltiplo para obtermos os valores de $T_c^{x_c}(L)$. Iremos descrever de forma breve a execução do algoritmo. Para um tamanho de rede L , escolhemos uma temperatura inicial dentro do intervalo $T_c - dt < T < T_c + dt$, onde as simulações foram feitas, com isso geramos um histograma na temperatura inicial T^0 , utilizando o algoritmo de convergência encontramos uma nova temperatura T_c^1 relacionada com o zero principal x_c^0 . Refazemos todo o processo utilizando agora como temperatura inicial T_c^1 , até que o algoritmo atenda a condição de convergência $dT < 10^{-3}$. Um fato interessante foi observado ao utilizarmos o algoritmo de histograma múltiplo, algumas redes podem vir a convergir para um único ponto tendo $dT = 0$. Isso foi observado principalmente em redes pequenas, enquanto que, para algumas redes maiores utilizamos o critério $dT < 10^{-3}$, observamos também que o ponto de corte pode influenciar nesse

comportamento.

Estudamos os efeitos de três pontos de corte diferentes $c = 10^{-1}, 10^{-2}, 10^{-3}$, nas grandezas ν e $T_c^{x_c}$. Para encontrarmos o expoente crítico, fazemos um ajuste linear no gráfico log-log da parte imaginária de x_c pelo tamanho da rede L , figura 22, obtemos os resultados da tabela 2 para os diferentes pontos de corte. O resultado mais próximo do esperado $\nu = 1.0$, aparece quando escolhemos o ponto de corte 10^{-4} , onde praticamente não ocorre um corte do histograma.

$1/\nu$	Corte
1.0684 ± 0.0005	10^{-1}
1.06 ± 0.02	10^{-2}
1.000 ± 0.003	10^{-4}

Tabela 2 – Valores de $1/\nu$ para cada ponto de corte adotado.

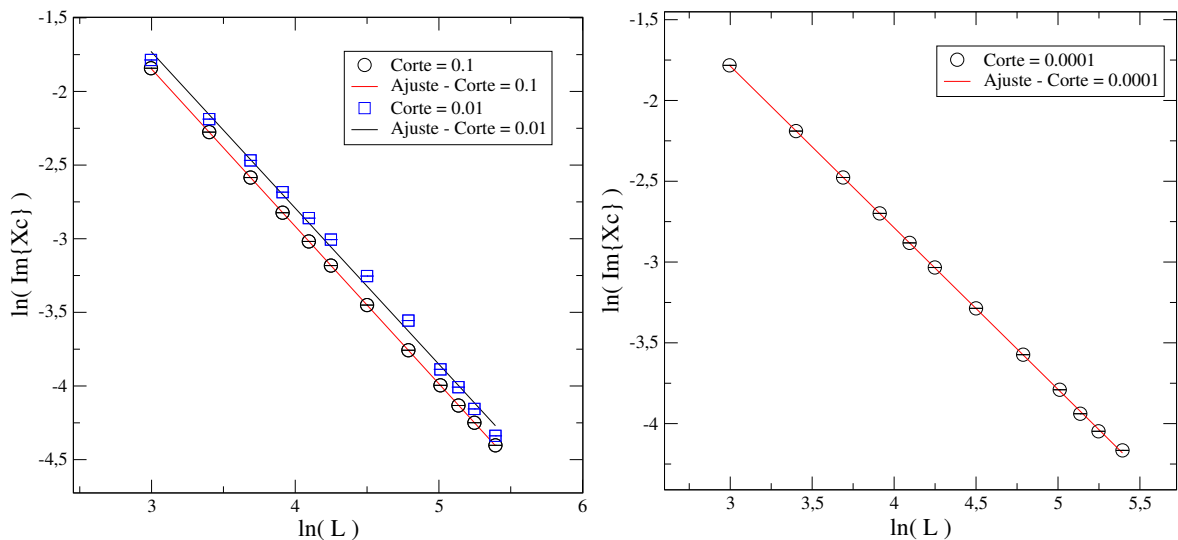


Figura 22 – Gráfico log-log de $Im\{x_c\}$ pelo tamanho da rede L em diferentes pontos de corte. Obtemos por meio de um ajuste linear os valores para o expoente $1/\nu_1 = 1.0684$, $1/\nu_2 = 1.0600$ e $1/\nu_3 = 1.0003$, com os pontos de corte 10^{-1} , 10^{-2} e 10^{-4} , respectivamente.

A temperatura crítica é obtida por meio do gráfico da temperatura pseudo crítica $T_c^{x_c}$, em função do inverso do tamanho da rede $1/L$, figura 23 e 24, onde desconsideramos as redes de tamanho $L = 20, 30$, para obter melhores resultados. A tabela 3, mostra os valores obtidos para T_c com diferentes pontos de corte. Note que alguns pontos possuem barras de erros maiores, isso é explicado quando olhamos para o mapa de zeros de diferentes amostras, destacando o zero principal escolhido, figura 24 a direita. Acreditamos que flutuações no histograma estão causando esse tipo de comportamento. Devido a presença de vários zeros próximos ao eixo real e com pequenas flutuações no histograma, esses zeros

podem ter suas posições ligeiramente alteradas, fazendo com que o algoritmo escolha um zero principal diferente em cada amostra. Note que, com o corte de 10^{-1} não temos esse problema, as barras de erro são desprezíveis e o resultado para a temperatura crítica é mais próximo do esperado.

O ponto de corte afeta diretamente os resultados da temperatura crítica e do expoente ν . É necessário um corte maior no histograma, para que o número de raízes não afete a estabilidade do zero principal, resultando em uma temperatura crítica com um valor mais preciso. O expoente ν , se favorece de um corte menor, indicando que é necessário uma quantidade maior de informação do sistema para obtermos resultados melhores.

T_c	Corte
2.2698 ± 0.0001	10^{-1}
2.2679 ± 0.0004	10^{-2}
2.2679 ± 0.0004	10^{-4}

Tabela 3 – Valores da temperatura crítica para cada ponto de corte adotado.

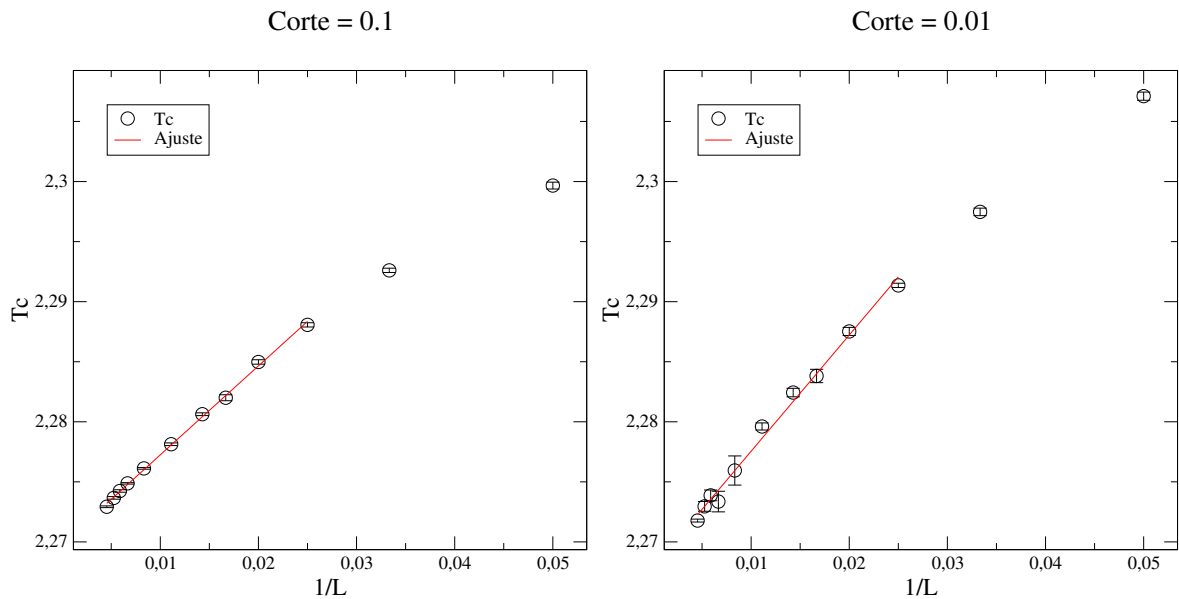


Figura 23 – Temperatura pseudo crítica em função de $1/L$, para os pontos de corte no histograma de 10^{-1} (esquerda) e 10^{-2} (direita). As linhas sólidas são os ajustes lineares de onde obtemos $T_c = 2.269(8)$ (esquerda) e $T_c = 2.267(9)$ (direita).

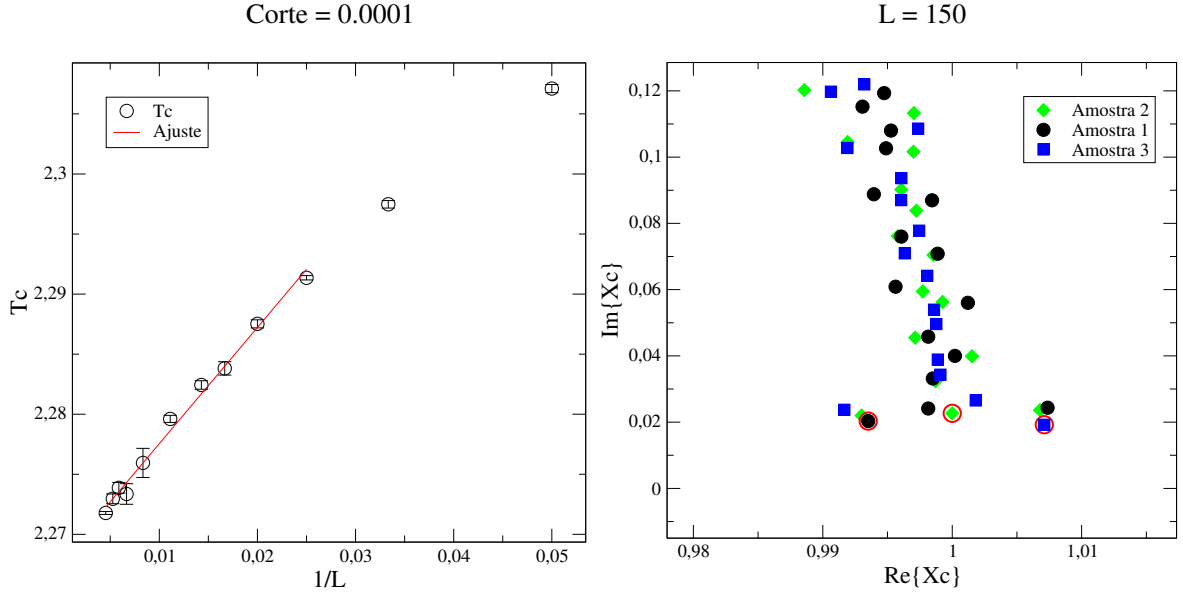


Figura 24 – **Esquerda:** Temperatura pseudo crítica em função de $1/L$, para o ponto de corte no histograma de 10^{-4} . A linha sólida é o ajuste linear de onde obtemos $T_c = 2.2679$. **Direita:** Para a rede de tamanho $L = 150$ e ponto de corte em 10^{-2} , temos os mapas de zeros de três amostras, os quais indicam zeros principais em diferentes posições, isso causa as flutuações indicadas pelas barras de erro no gráfico da figura 23 a direita. Com a posição dos zeros principais sendo de $x_c^1 = (0.9935, 2.0318 \times 10^{-2})$, $x_c^2 = (1.0071, 1.9214 \times 10^{-2})$ e $x_c^3 = (1.000, 2.2666 \times 10^{-2})$

6.3 Rotor planar

No modelo do rotor planar, grandezas como C_v e χ não indicam a temperatura de transição de fase correta, na verdade C_v não apresenta uma divergência [28], apesar de ter um pico em uma temperatura acima de T_{KT} . Sendo assim, temos que recorrer ao cálculo da helicidade Υ na direção \hat{x} , equação dada por,

$$\Upsilon_x = -\frac{1}{2} \langle E \rangle - \beta \left\langle \left(-J \sum_{i \neq j} (\vec{r}_{ij} \cdot \hat{x}) (\sigma_i^x \sigma_j^y - \sigma_i^y \sigma_j^x) \right)^2 \right\rangle, \quad (6.1)$$

onde E é a energia, σ_i^x é o i -ésimo momento magnético na direção x e r_{ij} é a distância entre o momento magnético i e seu vizinho j . Essa grandeza mede a resposta do sistema ao aplicarmos uma pequena torção em seus momentos magnéticos. No limite termodinâmico esperamos observar uma transição de fase universal em $\Upsilon = 2T_{KT}/\pi$, obtemos a temperatura pseudo crítica em cada tamanho de rede, tomando o ponto onde $\Upsilon_x(L)$ intercepta a linha $2T/\pi$. Para estimar a temperatura crítica T_{KT} , montamos o gráfico de $T_{KT}(L)$ em função de $\ln(L)^{-2}$, que é o comportamento de escala esperado [37], como pode ser visto na figura 25, obtemos $T_{KT} = 0.8964(6)$, valor condizente com o encontrado na literatura [38].

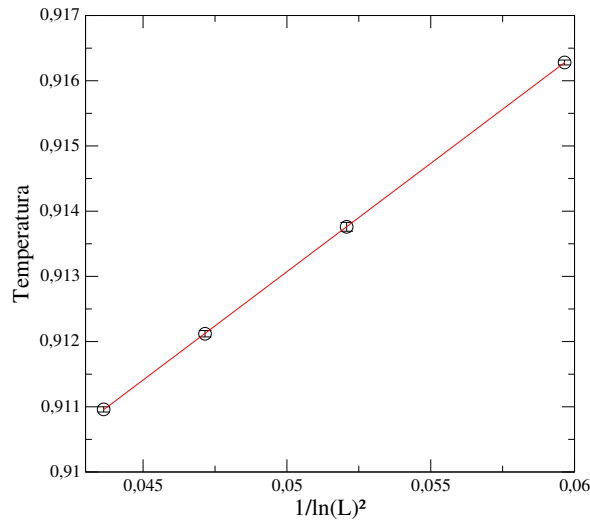


Figura 25 – Gráfico da temperatura pseudo crítica indicada pela helicidade em função de $\ln(L)^{-2}$, onde foram utilizados as redes de tamanho $L = 60, 80, 100$ e 120 . O ajuste linear indica a temperatura crítica $T_{KT} = 0.8964(6)$.

No modelo de Ising o algoritmo apresentava uma convergência clara para um único ponto, indicando uma transição do tipo ordem e desordem. Para o modelo do rotor planar, esperamos observar algumas peculiaridades por causa da linha crítica, característica das transições topológicas. Tomamos como exemplo uma rede de tamanho $L = 20$, utilizamos o algoritmo de convergência em temperaturas iniciais diferentes, para $T_i = 3.0, 0.9$ e 0.5 obtemos como ponto de convergência $T_f = 1.0930, 1.0930, 0.0$, figuras 26 e 27. Note que esse comportamento é condizente com o esperado, como temos uma linha de transições de fase, podemos em qualquer ponto abaixo de T_{KT} observar o algoritmo convergindo. Consideramos como temperatura pseudo crítica $T_{KT} = 1.0930$. A critério de curiosidade, deixamos os gráficos da parte real e imaginária dos zeros principais em função do número de passo, figura 28, ao contrário do modelo de Ising, a parte real não é um bom indicativo de convergência, já que está sempre perto de um.

Outro ponto interessante é o aumento do número de temperaturas de convergência, à medida que aumentamos o tamanho da rede. Em um pequeno intervalo de temperaturas $\Delta T = 6 \times 10^{-2}$, utilizamos o algoritmo de convergência para um rede de tamanho $L = 60$, observamos a existência de quatro pontos de convergência, ao escolhermos temperaturas iniciais diferentes, figura 29. Esperamos que no limite termodinâmico, esses pontos se tornem a linha contínua de transição de fase.

Como pode ser visto, o estudo desse modelo requer um pouco mais de cuidado, ainda estamos gerando dados para análise, afim de sanar algumas dúvidas e apresentar resultados mais concretos.

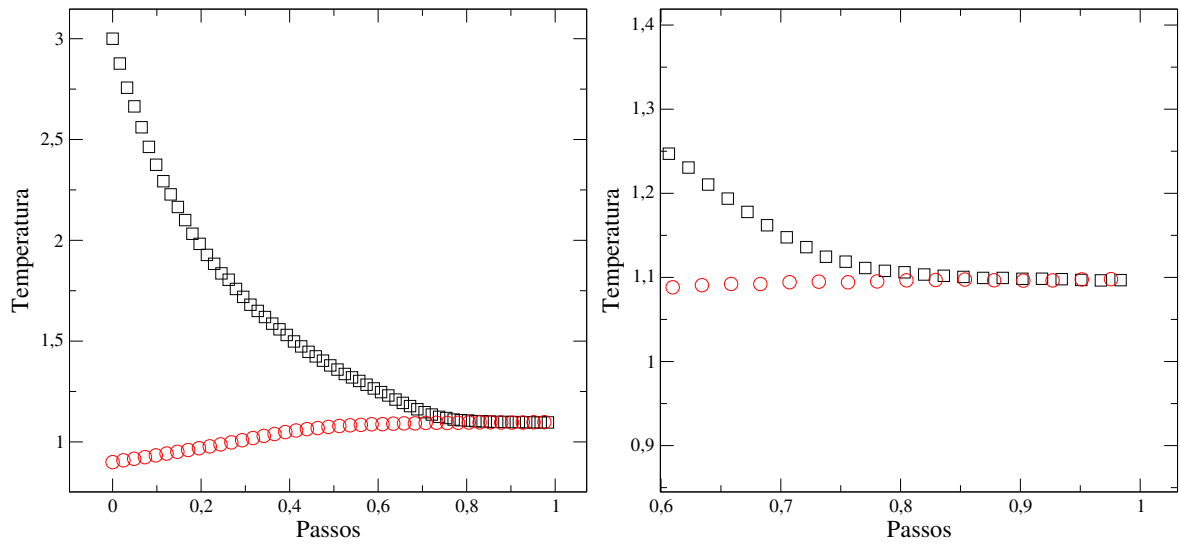


Figura 26 – Convergência do modelo de rotor planar em uma rede $L = 20$, onde escolhemos como ponto de corte no histograma 10^{-1} . **Esquerda:** Temperaturas iniciais $T_i = 0.9$ e $T_i = 3.0$, convergindo para $T_{KT} = 1.0963$. **Direita:** Parte do gráfico ampliada próximo ao ponto de convergência.

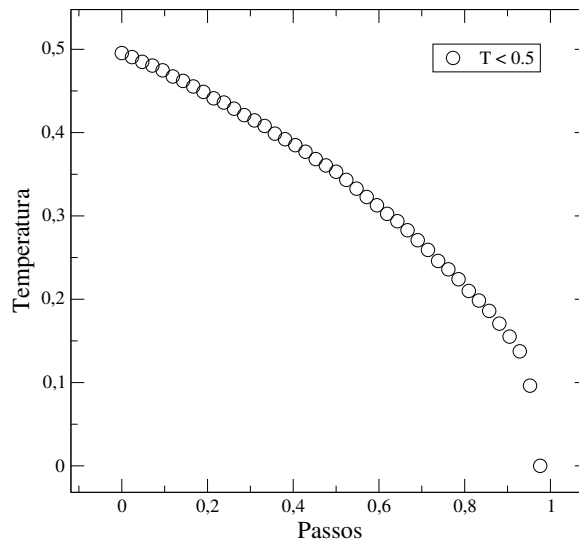


Figura 27 – Convergência do modelo de rotor planar em uma rede $L = 20$, onde escolhemos como ponto de corte no histograma 10^{-1} . Temperatura inicial $T_i = 0.5$, convergindo para $T_{KT} = 0.0$.

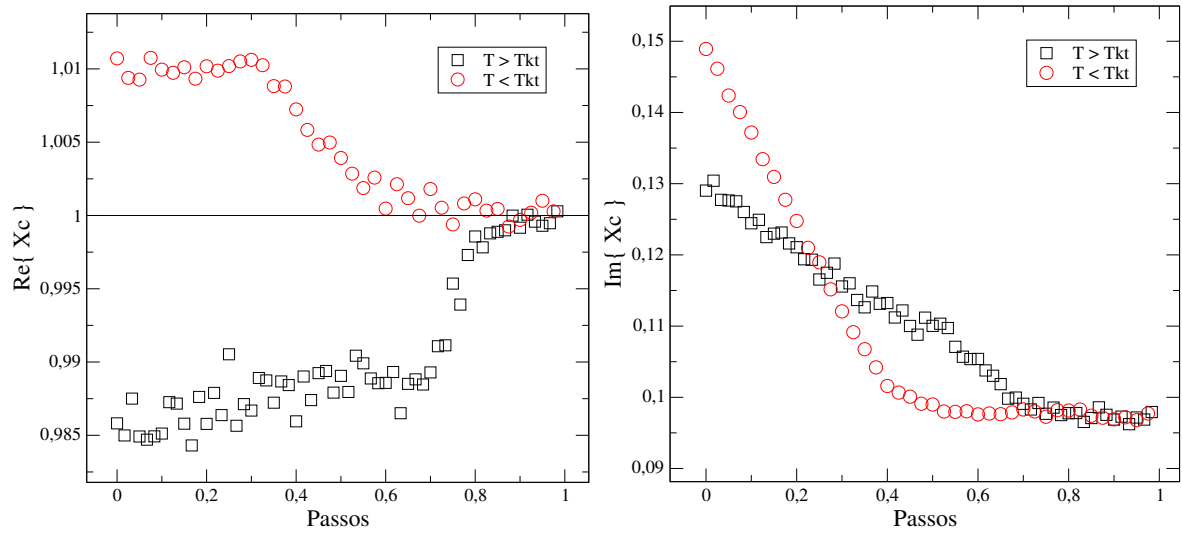


Figura 28 – Comportamento dos zeros para um rede de tamanho $L = 20$. **Esquerda:** Parte real do zero principal em função do número de passos. **Direita:** Parte imaginária do zero principal em função do número de passos.

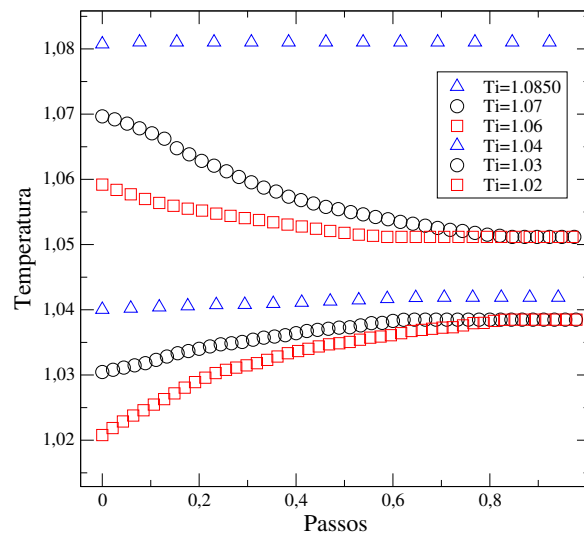


Figura 29 – Convergência do modelo de rotor planar em uma rede $L = 60$, onde escolhemos como ponto de corte no histograma 10^{-1} . Temperaturas iniciais $T_i = 1.085, 1.07, 1.06, 1.04, 1.03$ e 1.2 , convergindo para $T_f = 1.081, 1.05, 1.05, 1.041, 1.038$ e 1.038 .

7 Conclusões e perspectivas

Ao decorrer do texto citamos vários trabalhos renomados, ganhadores do prêmio Nobel e reconhecidos pelas suas descobertas sobre transições de fase. Vimos as primeiras tentativas de se criar uma base matemática que descrevesse transições de fase da matéria, como a teoria de Van der Waals, Curie-Weiss e a teoria fenomenológica de Landau. Sendo esta última a teoria mais bem sucedida entre as três, tendo papel importante como ferramenta qualitativa e para o desenvolvimento da teoria de renormalização. Tudo isso, junto a solução exata do modelo de Ising bidimensional, dados experimentais e as expansões para baixas e altas temperaturas, levaram a descoberta dos expoentes críticos e a classe de universalidade. Desta forma conseguimos agrupar vários sistemas que a princípio parecem descorrelacionados, mas compartilham os mesmos expoentes críticos. Um grande exemplo é o modelo do rotor planar, um sistema bem simples que compartilha a mesma classe de universalidade que um superfluido. Então, conseguimos estudar sistemas mais simples e ainda obter resultados gerais que serão usados em diversos outros sistemas.

Dedicamos um capítulo aos zeros da função de partição, começando pelos zeros de Yang-Lee no ensemble grande canônico e em seguida apresentamos a proposta de Fisher de extensão dos zeros para o ensemble canônico. Mostramos os problemas gerados por esta última abordagem, que são de forma resumida, o polinômio de grau elevado a ser resolvido da ordem de 30.000 e que possui como seus coeficientes valores entre 10^{440} e 2, isto para sistemas considerados pequenos. Estes problemas são resolvidos ao utilizarmos os zeros reduzidos [1], onde temos um método iterativo, onde a cada passo de temperatura temos que resolver um polinômio, cujo os coeficientes são dados pelo histograma da energia. Neste método, temos um polinômio de grau reduzido, comparando-o aos zeros de Fisher podemos encontrar uma redução de 90% em seu grau, o valor de seus coeficientes estão entre $(0, 1]$, após serem normalizados, o que facilita o tratamento numérico. Conseguimos encontrar a temperatura crítica e o expoente crítico ν , o último não pode ser encontrado utilizando os zeros de Fisher.

Como foi visto, é necessário definir previamente o critério de finalização do algoritmo e o ponto de corte do histograma. A premissa deste trabalho é a de descobrir o quanto o ponto de corte afeta a temperatura e o expoente crítico. Vimos que, para o modelo de Ising, o expoente ν se beneficia de um ponto de corte menor, obtemos um valor mais próximo da solução exata ao utilizarmos o ponto de corte 10^{-4} , onde encontramos $1/\nu = 1.000 \pm 0.003$. Para a temperatura crítica, o ponto de corte de 10^{-1} apresentou um resultado mais próximo do esperado, $T_c = 2.2698 \pm 0.0001$, a temperatura crítica exata é de $T_c = 2.2691$. Como foi dito no texto, ainda estamos em uma fase preliminar, aprendendo algumas características do algoritmo, acreditamos que os resultados para a temperatura crítica serão melhorados

obtendo um histograma mais suave, pois ao utilizarmos um ponto de corte menor, como o de 10^{-4} , estamos mais informação e também mais ruído ao nosso sistema, desta forma ao aumentarmos o número de passos de Monte Carlo é esperado uma melhora nos resultados.

Por fim apresentamos o início de um trabalho sobre a aplicação dos zeros reduzidos em um sistema que apresenta uma transição de fase topológica, onde pode ser visto alguns comportamentos interessantes e inesperados. Aparentemente existem vários pontos de transição abaixo da temperatura pseudo crítica, os quais aumentam em número a medida que a rede cresce. Relacionamos esse comportamento com a existência da linha crítica, observada no sistema quando o mesmo se encontra no limite termodinâmico.

Este trabalho ainda está em desenvolvimento, pretendemos fazer simulações mais precisas aumentando o número de passos de Monte Carlo e testaremos mais pontos de corte. Desta forma iremos obter respostas mais claras sobre os efeitos que essas escolhas geram nos resultados. Repetiremos este mesmo processo para o modelo do rotor planar e também iremos analisar as raízes que foram encontradas abaixo da temperatura crítica.

Referências

- 1 COSTA, B. V.; MÓL, L. A. S.; ROCHA, J. C. S. Energy Probability Distribution Zeros: A New Route to Study Phase Transitions. *arXiv*, p. 5, 2016. Disponível em: <http://arxiv.org/abs/1603.04928>. 3, 4, 11, 38, 52
- 2 SALINAS, S. *Introdução a Física Estatística Vol. 09*. EDUSP, 1997. ISBN 9788531403866. Disponível em: <https://books.google.com.br/books?id=cAlP3sc0K44C>. 5, 17
- 3 HO, J. T.; LITSTER, J. D. Magnetic equation of state of CrBr_3 near the critical point. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 22, p. 603–606, Mar 1969. Disponível em: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.22.603>. 5, 21, 22
- 4 HUANG, K. *Statistical mechanics*. Wiley, 1987. ISBN 9780471815181. Disponível em: <https://books.google.com.br/books?id=M8PvAAAAMAAJ>. 5, 34, 35
- 5 KIM, S.-Y. Partition function zeros of the square-lattice Ising model with nearest- and next-nearest-neighbor interactions. *Physical Review E*, v. 81, n. 3, p. 1–7, 2010. ISSN 1539-3755. 6, 37
- 6 MÓL, L. A. da S. *Transições de fase em modelos magnéticos bi-dimensionais com interações dipolares*. Tese (Doutorado) — Universidade Federal de Minas Gerais, Belo Horizonte, Brasil, 2009. Acesso em: 3 jul. 2011. 8, 18
- 7 ONNES, K. Nobel Lecture: *Investigations into the Properties of Substances at Low Temperatures, which Have Led, amongst Other Things, to the Preparation of Liquid Helium*. [S.l.], 1913. Disponível em: https://www.nobelprize.org/nobel_prizes/physics/laureates/1913/onnes-lecture.pdf. 10
- 8 BCS. Nobel for their developed theory of superconductivity, usually called the BCS-theory. [S.l.], 1972. Disponível em: https://www.nobelprize.org/nobel_prizes/physics/laureates/1972/. 10
- 9 KAPITSA, P. Nobel for his basic inventions and discoveries in the area of low-temperature physics. [S.l.], 1978. Disponível em: https://www.nobelprize.org/nobel_prizes/physics/laureates/1978/. 10
- 10 WILSON, K. G. Nobel Lecture: *The Renormalization Group and Critical Phenomena*. 1982. Disponível em: http://www.nobelprize.org/nobel_prizes/physics/laureates/1982/wilson-lecture.html. 10
- 11 THOULESS, J. M. K. D. J. Nobel Lecture: *Topological phase transition and topological phases of matter*. 2016. Disponível em: https://www.nobelprize.org/nobel_prizes/physics/laureates/2016/advanced.html. 10, 26
- 12 YANG, C. N.; LEE, T. D. Statistical theory of equations of state and phase transitions. I. Theory of condensation. *Physical Review*, v. 87, n. 3, p. 404–409, dec 1952. ISSN 0031899X. Disponível em: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.87.404><http://www.ncbi.nlm.nih.gov/pubmed/22029474><http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/jp208347j>. 10, 34

- 13 LEE, T.; YANG, C. Statistical Theory of Equations of State and Phase Transitions. II. Lattice Gas and Ising Model. Physical Review, v. 87, n. 3, p. 410–419, 1952. ISSN 0031-899X. 10, 13, 34, 36
- 14 FISHER, M. E. The nature of critical points, in Lectures in Theoretical Physics. Vol. VIIC — Statistical Physics, Weak Interactions, Field Theory. Univ. Colorado Press, Boulder, 1965. Disponível em: <<https://books.google.com.br/books?id=ZR-wMQEACAAJ>>. 10
- 15 PROCESSING, D. S. Polynomials in Digital Signal Processing. IEEE Signal Processing Magazine, p. 27–42, 2003. 10
- 16 BURRUS, C. S. On Factoring Polynomials of High Degree On Factoring Polynomials of High Degree. Methods, p. 2–5, 2008. 10
- 17 MOLER, C. B.; STEWART, G. W. An algorithm for generalized matrix eigenvalue problems. SIAM Journal on Numerical Analysis, Society for Industrial and Applied Mathematics, v. 10, n. 2, p. 241–256, 1973. ISSN 00361429. Disponível em: <<http://www.jstor.org/stable/2156353>>. 10, 40
- 18 VOGEL, T. et al. Scalable replica-exchange framework for wang-landau sampling. Phys. Rev. E, American Physical Society, v. 90, p. 023302, Aug 2014. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.90.023302>>. 10, 37
- 19 WANG, F.; LANDAU, D. P. Efficient, multiple-range random walk algorithm to calculate the density of states. Phys. Rev. Lett., American Physical Society, v. 86, p. 2050–2053, Mar 2001. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.86.2050>>. 10, 37
- 20 ONSAGER, L. Crystal statistics. i. a two-dimensional model with an order-disorder transition. Phys. Rev., American Physical Society, v. 65, p. 117–149, Feb 1944. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.65.117>>. 12, 17
- 21 MERMIN, N. D.; WAGNER, H. Absence of ferromagnetism or antiferromagnetism in one- or two-dimensional isotropic Heisenberg models. Physical Review Letters, v. 17, n. 22, p. 1133–1136, 1966. ISSN 00319007. 14, 24
- 22 KOSTERLITZ, J. M.; THOULESS, D. J. Ordering, metastability and phase transitions in two-dimensional systems. Journal of Physics C: Solid State Physics, v. 6, n. 7, p. 1181, 1973. Disponível em: <<http://stacks.iop.org/0022-3719/6/i=7/a=010>>. 14, 24
- 23 BISHOP, D. J.; REPPY, J. D. Study of the superfluid transition in two-dimensional ⁴He films. Phys. Rev. Lett., American Physical Society, v. 40, p. 1727–1730, Jun 1978. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.40.1727>>. 14
- 24 EPSTEIN, K.; GOLDMAN, A. M.; KADIN, A. M. Vortex-antivortex pair dissociation in two-dimensional superconductors. Phys. Rev. Lett., American Physical Society, v. 47, p. 534–537, Aug 1981. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.47.534>>. 14
- 25 MINNHAGEN, P. The two-dimensional Coulomb gas, vortex unbinding, and superfluid-superconducting films. v. 59, n. 4, 1987. 14, 26

- 26 PLISCHKE, M.; BERGERSEN, B. Equilibrium Statistical Physics. World Scientific, 2006. ISBN 9789812560483. Disponível em: <<https://books.google.com.br/books?id=KYu7igYEkhwC>>. 17, 19
- 27 STANLEY, H. Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena. Oxford University Press, 1971. (International series of monographs on physics). ISBN 9780195053166. Disponível em: <<https://books.google.com.br/books?id=C3BzcUxoaNkC>>. 19, 21
- 28 Van Himbergen, J. E.; CHAKRAVARTY, S. Helicity modulus and specific heat of classical XY model in two dimensions. Physical Review B, v. 23, n. 1, p. 359–361, 1981. ISSN 01631829. 25, 48
- 29 LANDAU, D.; BINDER, K. A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics. New York, NY, USA: Cambridge University Press, 2009. ISBN 0521842387. 28, 37
- 30 NEWMAN, M.; BARKEMA, G. Monte Carlo Methods in Statistical Physics. Clarendon Press, 1999. ISBN 9780198517979. Disponível em: <<https://books.google.de/books?id=J5aLdDN4uFwC>>. 28, 29, 32
- 31 FERRENBURG, A. M.; SWENDSEN, R. H. Optimized monte carlo data analysis. Phys. Rev. Lett., American Physical Society, v. 63, p. 1195–1198, Sep 1989. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.63.1195>>. 29
- 32 Rocha, J. C. S.; Mól, L. A. S.; Costa, B. V. Using zeros of the canonical partition function map to detect signatures of a Berezinskii-Kosterlitz-Thouless transition. Computer Physics Communications, v. 209, p. 88–91, dez. 2016. 36, 37
- 33 Rocha, J. C. S. et al. Identifying transitions in finite systems by means of partition function zeros and microcanonical inflection-point analysis: A comparison for elastic flexible polymers. arXiv, v. 90, n. 2, p. 022601, ago. 2014. 37
- 34 PRESS, W. H. et al. Numerical Recipes in Fortran 90 (2Nd Ed.): The Art of Parallel Scientific Computing. New York, NY, USA: Cambridge University Press, 1996. ISBN 0-521-57439-0. 40
- 35 WWW.NETLIB.ORG/LAPACK. 40
- 36 WEISSTEIN, E. W. Polynomial Roots. From MathWorld - A Wolfram Web Resource. <http://mathworld.wolfram.com/PolynomialRoots.html>. Disponível em: <<http://mathworld.wolfram.com/PolynomialRoots.html>>. 40
- 37 KENNA, R.; IRVING, A. Logarithmic corrections to scaling in the two dimensional xy-model. Physics Letters B, v. 351, n. 1, p. 273 – 278, 1995. ISSN 0370-2693. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/037026939500316D>>. 48
- 38 Hasenbusch, M.; Marcu, M.; Pinn, K. High precision renormalization group study of the roughening transition. Physica A Statistical Mechanics and its Applications, v. 208, p. 124–161, jul. 1994. 48

Apêndices

APÊNDICE A – Matriz Companheira

Utilizando uma matriz companheira, é possível abordar o problema de encontrar as raízes de um polinômio, por encontrar os autovalores de uma matriz. Para isso temos que escrever o polinômio na forma,

$$p(z) = a_0 + a_1z + a_2z^2 + \dots + a_{n-1}z^{n-1} + z^n, \quad (\text{A.1})$$

onde o coeficiente que acompanha o termo de ordem n é sempre igual a 1. E definindo a matriz companheira ($n \times n$) como sendo,

$$C = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \dots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ a_0 & a_1 & a_2 & \dots & a_{n-1} \end{bmatrix}. \quad (\text{A.2})$$

Podemos afirmar que $\det(C - \lambda I) = p(\lambda) = 0$ e os autovalores de λ são as raízes do polinômio.

Demonstração:

Temos que mostrar que, se z é um raiz do polinômio ($p(z) = 0$), então também é autovalor da matriz C com autovetores $(1, z, z^2, \dots, z^{n-1})$.

$$C \begin{bmatrix} 1 \\ z \\ z^2 \\ \vdots \\ z^{n-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ z \\ z^2 \\ \vdots \\ z^{n-1} \\ -a_0 - a_1z - \dots - a_{n-1}z^{n-1} \end{bmatrix} \quad (\text{A.3})$$

Como z é uma raiz, temos que,

$$p(z) = 0 \Rightarrow z^n = -a_0 - a_1z - a_2z^2 - \dots - a_{n-1}z^{n-1}, \quad (\text{A.4})$$

substituindo esse resultado no último elemento da matriz C , temos que,

$$C \begin{bmatrix} 1 \\ z \\ z^2 \\ \vdots \\ z^{n-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} z \\ z^2 \\ \vdots \\ z^{n-1} \\ z^n \end{bmatrix} = z \begin{bmatrix} 1 \\ z \\ z^2 \\ \vdots \\ z^{n-1} \end{bmatrix}, \quad (\text{A.5})$$

então z é de fato um autovalor da matriz companheira C .