



Universidade Federal de Goiás
Instituto de Física

LUCAS DE SOUZA FERREIRA

Simulações Entrópicas do Modelo de Ashkin-Teller

Goiânia
2016

UNIVERSIDADE FEDERAL DE GOIÁS
INSTITUTO DE FÍSICA

**Autorização para Publicação de Dissertação em
Formato Eletrônico**

Na qualidade de titular dos direitos de autor, **AUTORIZO** o Instituto de Física da Universidade Federal de Goiás – UFG a reproduzir, inclusive em outro formato ou mídia e através de armazenamento permanente ou temporário, bem como a publicar na rede mundial de computadores (*Internet*) e na biblioteca virtual da UFG, entendendo-se os termos “reproduzir” e “publicar” conforme definições dos incisos VI e I, respectivamente, do artigo 5º da Lei nº 9610/98 de 10/02/1998, a obra abaixo especificada, sem que me seja devido pagamento a título de direitos autorais, desde que a reprodução e/ou publicação tenham a finalidade exclusiva de uso por quem a consulta, e a título de divulgação da produção acadêmica gerada pela Universidade, a partir desta data.

Título: Simulações Entrópicas do Modelo de Ashkin-Teller

Autor: Lucas de Souza Ferreira

Goiânia, 10 de março de 2016.

Lucas de Souza Ferreira – Autor

Prof. Dr. Álvaro A. Caparica – Orientador

LUCAS DE SOUZA FERREIRA

Simulações Entrópicas do Modelo de Ashkin-Teller

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação do Instituto de Física da Universidade Federal de Goiás, como requisito parcial para obtenção do título de Mestre em Física.

Área de pesquisa: Física Estatística

Orientador: Prof. Dr. Álvaro A. Caparica

Goiânia
2016

Lucas de Souza Ferreira

Simulações Entrópicas do Modelo de Ashkin-Teller / Lucas de Souza
Ferreira – Goiânia, 10 de março de 2016.

46 p.

Orientador: Prof. Dr. Álvaro A. Caparica.

Dissertação – Universidade Federal de Goiás.

Instituto de Física, 10 de março de 2016.

1.Física. 2.Transições de Fases. I.Universidade Federal de Goiás. II.
Instituto de Física

CDU: 11:111:111.1

LUCAS DE SOUZA FERREIRA

Simulações Entrópicas do Modelo de Ashkin-Teller

Dissertação defendida no Programa de Pós-Graduação do Instituto de Física da Universidade Federal de Goiás como requisito parcial para obtenção do título de Mestre em Física, aprovada em 10 de março de 2016, pela Banca Examinadora constituída pelos professores:

Prof. Dr. Álvaro A. Caparica

Instituto de Física – Universidade Federal de Goiás
Presidente da Banca

Prof. Dr. Leandro Félix de Sousa Bufaçal

Instituto de Física – Universidade Federal de Goiás

Prof. Dr. Nilton da Silva Branco

Departamento de Física – Universidade de Santa Catarina

© 2016 Lucas de Souza Ferreira.

Todos os direitos reservados. É proibida a reprodução total ou parcial do trabalho sem autorização da universidade, do(a) autor(a) e do orientador(a).

Lucas de Souza Ferreira

Graduou-se em Física na UFG - Universidade Federal de Goiás. Durante sua graduação, foi pesquisador do CNPq em um trabalho de iniciação científica no departamento de Física. Atualmente trabalha com simulações de Monte Carlo com ênfase em simulações entrópicas para sistemas magnéticos, polímeros e líquidos.

Dedico este trabalho aos meus filhos Gabriela e André Lucas.

AGRADECIMENTOS

Agradeço a Deus pelo amor e perseverança que me tem concedido.

Aos meus pais por todo o apoio e carinho.

À minha esposa pela paciência e compreensão.

Ao grande amigo Lucas Nunes Jorge pelas horas de conversa e discussões.

Aos companheiros de percurso Leandro Rezende e Danillo Pires com quem sempre pude aprender mais.

E, é claro, ao orientador Prof. Dr. Álvaro de Almeida Caparica que iluminou o caminho em dias escuros.

“Porque Deus amou o mundo de tal maneira que deu o seu Filho unigênito, para que todo aquele que nele crê não pereça, mas tenha a vida eterna. João 3:16”

– **Jesus Cristo**

RESUMO

Em 1943, Ashkin e Teller (AT) propuseram um modelo para descrever o comportamento de um sistema composto por quatro componentes que interagem entre si. Todavia o problema não foi resolvido analiticamente para todos parâmetros do sistema devido à complexidade de modelo. Somente trinta anos após a publicação do trabalho Fan (1972) propôs uma mudança na forma de analisar o sistema. Ele fez uma analogia com o modelo de Ising e escreveu as interações entre as componentes em termos de spins, o que levou a uma fácil correspondência com os modelos de Ising e Potts $q = 4$ e, de certa forma, tornou mais clara a compressão do modelo e possibilitou a aplicação de várias técnicas para se obter o comportamento do sistema com a temperatura. Em 2001 Wang e Landau elaboraram um algoritmo de Monte Carlo que estima diretamente a densidade de estados e pode ser aplicado no estudo de transições de fase e propriedades termodinâmicas. Esse algoritmo é baseado em um passeio aleatório no espaço das energias em que constroi-se uma estimativa da densidade de estados juntamente com um histograma de energia: toda vez que o critério de nivelamento é satisfeito, obtêm-se um nível mais refinado da densidade de estados. Este trabalho tem como objetivo o estudo do modelo de Ashkin-Teller usando o algoritmo de Wang-Landau, para o qual, determinamos o comportamento da magnetização e calor específico bem como os expoentes críticos ν , β e γ e a temperatura crítica, através da teoria de tamanho finito para diferentes conjuntos de parâmetros do modelo.

Palavras - chave: Ashkin-Teller, Simulações Entrópicas, Wang-Landau, Transições de Fases.

ABSTRACT

In 1943, Ashkin and Teller (AT) proposed a model to describe the behavior of a system composed by four components that interact with each other. However the problem has not been solved analytically for all parameters due to the complexity of the model. Only thirty years later Fan (1972) proposed a change in order to analyze the system. He made an analogy with the Ising model and described the interactions between the components in terms of spins, leading to a simple matching with the Ising and Potts $q = 4$ models and, enabling therefore a clearer comprehension of the model and allowing the implementation of various techniques to investigate the behavior of the system with the temperature. In 2001 Wang and Landau developed a Monte Carlo algorithm that estimates directly the density of states and can be applied in the study of phase transitions and the thermodynamic properties. This algorithm is based on a random walk in the space of energies that leads to an estimate for the density of states. During the simulations an energy histogram monitors the evolution of the density of states: whenever the flatness criterion is satisfied, we obtain a finer level of the density of states. In this work we perform a study of the Ashkin-Teller model using the Wang-Landau algorithm, determining the behavior of the magnetization and the specific heat and estimating the critical exponents ν , β and γ and the critical temperature through the finite-size theory for different values of the model parameters.

Key - words: Ashkin-Teller, Entropic simulation, Wang-Landau, Phase Transition.

LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1:	Caixa de simulação e suas réplicas.	23
Figura 3.1:	Evolução da temperatura do máximo do calor específico durante a simulação de WL, $L = 56$	26
Figura 4.1:	Representação do Modelo de Ashkin-Teller em duas redes bidimensionais.	28
Figura 4.2:	Comportamento do calor específico para $J_4 = 0$, $J = 1$ e $J' = 0.25, 0.50, 0.75, 1$, com $L = 8$	29
Figura 4.3:	Comportamento do calor específico para $J = 1$, $J' = 0.5$ e $J_4 = 0, 0.25, 0.50, 1$, com $L = 8$	30
Figura 5.1:	$S(E)$ para o caso $J_2 = 1$, $J_4 = 0$. Os tamanhos da rede estão em ordem crescente.	31
Figura 5.2:	$S(E)$ para o caso $J_2 = 1$, $J_4 = 1$. Os tamanhos da rede estão em ordem crescente.	32
Figura 5.3:	Magnetização para $L = 64$ e caso $(J_2 = 1, J_4 = 1)$. A linha vertical mostra a temperatura crítica exata, $T_c = 3.6409569$	32
Figura 5.4:	Susceptibilidade para $L = 64$ caso $J_2 = 1$, $J_4 = 1$. A linha vertical mostra a temperatura crítica exata, $T_c = 3.6409569$	33
Figura 5.5:	Calor específico para $L = 64$ caso $(J_2 = 1, J_4 = 1)$. A linha vertical mostra a temperatura crítica exata, $T_c = 3.6409569$	34
Figura 5.6:	Resultado para temperatura crítica T_c para um conjunto de rodadas independentes, caso $(J_2 = 1, J_4 = 0)$. O resultado para T_c é a média dos valores obtidos para susceptibilidade e calor específico.	35
Figura 5.7:	Resultado para expoente beta β para um conjunto, caso $(J_2 = 1, J_4 = 0)$	36
Figura 5.8:	Resultado para expoente γ para um conjunto, caso $(J_2 = 1, J_4 = 0)$	36
Figura 5.9:	Resultado para expoente ν para um conjunto, caso $(J_2 = 1, J_4 = 1)$	38

Figura 5.10:	Dependência da temperatura do máximo do calor específico e susceptibilidade com tamanho da rede para um conjunto, caso ($J_2 = 1, J_4 = 1$). O resultado para T_c é a média dos valores obtidos para susceptibilidade (linha pontilhada) e calor específico (linha contínua).	39
Figura 5.11:	Dependência da magnetização com o tamanho da rede para um conjunto, caso ($J_2 = 1, J_4 = 1$).	40
Figura 5.12:	Dependência da susceptibilidade com o tamanho da rede, caso ($J_2 = 1, J_4 = 1$).	40

SUMÁRIO

Capítulo 1: Introdução	15
Capítulo 2: Revisão da Literatura	17
2.1 Mecânica Estatística	17
2.2 Equilíbrio	18
2.3 Finite-size scaling	19
2.4 Flutuações	21
2.5 Simulação de Monte Carlo	21
2.6 Condições periódicas de contorno	22
Capítulo 3: Simulação Entrópica	24
Capítulo 4: Modelo de Ashkin-Teller	27
Capítulo 5: Resultados	31
5.1 Caso ($J_2 = 1, J_4 = 0$)	34
5.2 Caso ($J_2 = 1, J_4 = 1$)	37
5.3 Caso ($J_2 = 1, J_4 = 0.5$)	41
Capítulo 6: Conclusões	43

INTRODUÇÃO

O modelo de Ashkin e Teller (AT) proposto em 1943 [1] tinha como ideia original estudar um sistema de quatro componentes. Fan [2] demonstrou que uma representação válida para o modelo é a de duas redes de Ising superpostas, o que torna fácil a visualização da correspondência com dois modelos que possuem solução exata, os modelos de Ising e Potts $q = 4$ [3], bidimensionais. A partir daí uma série de estudos foram realizados para determinar o diagrama de fase do sistema [4, 5, 6, 7, 8] que é rico em detalhes. Simulações computacionais também foram realizadas para o modelo [9, 10, 11] para diferentes casos. E aplicações em diferentes tipos de materiais já foram desenvolvidas passando por diagrama de fase para superfícies de Se depositado sobre Ni(001) [12, 13], diagrama de fase e propriedades críticas do ordenamento em $YBa_2Cu_3O_z$ [14], transições de fase anômala fluido gel nos lipídios iônico bicamada ou formação de lamelas cobrados [15] e teoria de supercondutores [16, 17, 18].

Simulações de Monte Carlo (MC) têm se mostrado um poderoso método para estudar transições de fase e fenômenos críticos de sistemas complexos [19], desempenhando um papel intermediário entre modelos teóricos e experimentos. Tudo começou em 1953 com o histórico trabalho de Metropolis *et al* [20], onde foi utilizado um computador para calcular a equação de estado através do método de MC. Com o crescimento da eficiência dos computadores o algoritmo de Metropolis se tornou a base para o estudo de muitos sistemas e hoje é tido como procedimento padrão para simulações em física estatística. A partir de uma base comum, vários outros algoritmos foram desenvolvidos para atender as necessidades da comunidade científica.

Nas últimas duas décadas é crescente o número de trabalhos relacionados à simulação de MC usando o algoritmo conhecido como Wang-Landau (WL) [21]. A grande vantagem que tem atraído a atenção da comunidade científica é a capacidade de simular a densidade de estados diretamente, tornando fácil o cálculo da pedra fundamental da física estatística $S(E) = k_B \ln \Omega(E)$. A sua eficiência em estimar as propriedades termodinâmicas ficou bem estabelecida para sistema magnéticos e polímeros. Atualmente,

algumas mudanças foram propostas para melhorar a precisão do WL [22, 23] aumentando a confiança nos resultados obtidos. As alterações do algoritmo original já foram usadas em diferentes modelos [24, 25, 26, 27] obtendo uma boa estimativa de expoentes críticos, cujo os valores são mais precisos quando comparados com resultados anteriores. Para o modelo de Potts $q = 4$ [26] os resultados para os expoentes críticos diferem dos valores conjecturados, entretanto estão de acordo com valores obtidos de diferentes métodos. No trabalho de [27] realiza-se WL para o modelo de Baxter-Wu spin 1/2, cujo a classe de universalidade é a mesma do modelo de Potts $q = 4$, e obtém valores estimados dos expoentes críticos que estão em concordância com a conjectura e com valores obtidos de diferentes métodos. Neste trabalho usaremos uma extensão do WL tradicional proposta por Caparica [23].

Levando em consideração o exposto temos uma excelente motivação para determinar, de modo mais preciso, a classe de universalidade do modelo de Ashkin-Teller usando os novos algoritmos disponíveis. Esse trabalho tem como finalidade estudar o modelo de AT utilizando as simulações de Wang-Landau com as alterações sugeridas pelas referências [22, 23]. Calculando os valores estimados para os expoentes críticos ν , β , γ e a temperatura crítica T_c para três casos: na correspondência com os modelos de Ising e Potts $q = 4$ e para uma configuração intermediária. Compararemos os valores obtidos com os encontrados nas referências e faremos uma análise dos resultados obtidos.

Inicialmente será feita uma breve abordagem dos conceitos teóricos utilizados, seção 2, logo em seguida veremos os detalhes da simulação de WL convencional e comentaremos as alterações que serão realizadas. A seção 4 descreve o sistema estudado. E por fim, na seção 5, apresentamos os resultados das simulações com as análises correspondentes.

REVISÃO DA LITERATURA

Nesta seção relembremos alguns pontos importantes que serão necessários no desenvolvimento deste trabalho. Começaremos pela equação mestra, passaremos para um sistema em equilíbrio e para finalizar discutiremos os princípios da simulação de MC.

2.1 Mecânica Estatística

Quando nos propomos a estudar as propriedades da matéria condensada uma dificuldade crucial associada a um sistema físico é que ele possui muitas partes constituintes, tipicamente átomos e moléculas. Muitas vezes todas essas partículas são iguais e obedecem a equações de movimento. Entretanto o grande número de graus de liberdade torna inviável o cálculo dessas equações. Por isso utilizamos a estatística para obter as propriedades macroscópicas do sistema através de uma média sobre as configurações microscópicas. Todo esse estudo foi realizado por Gibbs, Maxwell e Boltzmann, formando a base da física estatística.

Considere um sistema que esteja em um dado estado μ (configuração). Definimos $R(\mu \rightarrow \nu)dt$ como a taxa de probabilidade de transição de μ para ν depois de um tempo dt . Ela é tudo que sabemos sobre a dinâmica do nosso sistema e em geral é considerada independente do tempo. Também definiremos um conjunto de probabilidades $\omega_\mu(t)$ que representam a probabilidade do sistema estar no estado μ no instante t . A mecânica estatística se firma sobre essas probabilidades e nela está todo o conhecimento sobre o sistema. De posse dessas definições podemos escrever a equação da evolução de $\omega_\mu(t)$ em termos da taxa de transição $R(\mu \rightarrow \nu)$:

$$\frac{d\omega_\mu(t)}{dt} = \sum_\nu [\omega_\nu(t)R(\nu \rightarrow \mu) - \omega_\mu(t)R(\mu \rightarrow \nu)]. \quad (2.1)$$

Esse conjunto de equações é conhecido como equação mestra. O primeiro termo do lado direito representa a taxa de transição do sistema para o estado μ , ao passo que o segundo representa a taxa de transição do sistema para o estado ν . As probabilidades

$\omega_\mu(t)$ devem obedecer a regra da soma

$$\sum_{\mu} \omega_\mu(t) = 1, \quad (2.2)$$

em todos os instantes de tempo. A resolução da equação 2.1 com o vínculo 2.2 determina a evolução temporal das probabilidades $\omega_\mu(t)$.

O valor esperado de uma grandeza termodinâmica A num dado instante de tempo é dado por:

$$\langle A \rangle = \sum_{\mu} A_{\mu} \omega_{\mu}(t) \quad (2.3)$$

onde A_{μ} é o valor dessa grandeza para um determinado estado μ .

2.2 Equilíbrio

Considere a equação mestra 2.1 novamente. Se os dois termos do lado direito dessa equação forem iguais então $\omega_\mu(t)$ se tornam constantes no tempo. Esse seria um estado de equilíbrio. A equação mestra se torna então um equação de primeira ordem com valores reais e com os valores de ω_μ entre zero e um (proibindo uma solução exponencial). Neste trabalho trataremos o sistema termodinâmico usando a técnica de Monte Carlo em simulações de equilíbrio. Falaremos mais adiante sobre as taxas de transição $R(\mu \rightarrow \nu)$.

Um importante ponto que devemos conhecer *a priori* são as probabilidades de equilíbrio ω_μ que chamaremos de probabilidade de ocupação de equilíbrio e a denotaremos por

$$p_\mu = \lim_{t \rightarrow \infty} \omega_\mu(t) \quad (2.4)$$

Foi Gibbs (1902) que mostrou que para um sistema em equilíbrio térmico com reservatório a temperatura T as probabilidade de ocupação são

$$p_\mu = \frac{1}{Z} e^{-\beta E_\mu}. \quad (2.5)$$

Aqui E_μ é a energia da configuração μ , $\beta = 1/k_B T$ onde k_B é a constante de Boltzmann, cujo valor é $1.38 \times 10^{-23} \text{ JK}^{-1}$. Requerendo que o vínculo 2.2 seja satisfeito encontramos que Z deve ter o seguinte valor

$$Z = \sum_{\mu} e^{-\beta E_\mu}. \quad (2.6)$$

Z é conhecida como função de partição e é muito mais do que somente uma constante de normalização. O conhecimento dessa função da temperatura pode nos dizer muito sobre o comportamento macroscópico do sistema. A distribuição de probabilidades 2.5 é conhecida como distribuição de Boltzmann.

Para um sistema no equilíbrio o valor esperado de uma grandeza termodinâmica A é

$$\langle A \rangle = \sum_{\mu} A_{\mu} p_{\mu} = \frac{1}{Z} \sum_{\mu} A_{\mu} e^{-\beta E_{\mu}} \quad (2.7)$$

onde a soma é realizada sobre todas as configurações. Em algumas situações é conveniente agruparmos as configurações com mesma energia e realizar a soma sobre os níveis energéticos do sistema. Para isso precisamos conhecer a densidade de estados, ou número de microestados do sistema, que denotaremos por $g(E)$. Com isso em mãos podemos realizar a média da seguinte forma

$$\langle A \rangle = \frac{\sum_E A_E g(E) e^{-\beta E}}{\sum_E g(E) e^{-\beta E}}. \quad (2.8)$$

Boltzmann demonstrou que a entropia é dada por

$$S = k_B \ln g(E) \quad (2.9)$$

lembrando que nessa representação todas as configurações são equiprováveis, para energia fixa. Essa definição possibilita a conexão entre o ensemble microcanônico e a termodinâmica. No entanto, essa conexão deve ser feita no limite termodinâmico, ou seja para $E, V, N \rightarrow \infty$, com densidades fixas, $E/N = \text{const}$ e $V/N = \text{const}$, é apenas nesse limite que podemos eliminar os efeitos das condições de contorno. Na prática esse limite é determinado através da teoria de escala de tamanho finito, que permite obter expoentes críticos a partir de uma escala universal.

2.3 Finite-size scaling

Devido ao grande número de graus de liberdade contidos num sistema macroscópico a simulação do tamanho real do sistema é praticamente impossível para a capacidade de processamento dos atuais computadores. Entretanto podemos estudar uma pequena parte desse sistema e extrapolar o resultado para um sistema macroscópico. Tal estudo é chamado de *finite-size scaling* [28]. De acordo com essa teoria, a parte singular da energia livre reduzida pode ser descrita fenomenologicamente por um forma de escala universal

$$f(t, H; L) = L^{-d} Y(atL^{1/\nu}, bHL^{\Delta/\nu}) \quad (2.10)$$

onde $t = (T_c - T)/T_c$ é a temperatura reduzida que nos mostra quão distante ou próximos estamos da temperatura crítica, H é o campo de ordenamento externo, a e b são fatores métricos, d é a dimensão espacial do sistema, Δ e ν são expoentes críticos estáticos e L é a dimensão linear do sistema. Partindo da definição da energia livre pode-se obter várias quantidades termodinâmicas, tais como a expressão da magnetização para campo zero, a

susceptibilidade magnética e o calor específico, respectivamente,

$$m \approx L^{-\beta/\nu} \mathcal{M}(tL^{1/\nu}), \quad (2.11)$$

$$\chi \approx L^{\gamma/\nu} \mathcal{X}(tL^{1/\nu}), \quad (2.12)$$

$$c \approx c_\infty + L^{\alpha/\nu} \mathcal{C}(tL^{1/\nu}), \quad (2.13)$$

onde \mathcal{M} , \mathcal{X} e \mathcal{C} são funções universais de escala desconhecidas que na criticalidade ($t = 0$) são constantes e α , β e γ são também expoentes críticos estáticos que devem satisfazer as relações de hiper-escala.

$$\Delta = \beta\delta = \beta + \gamma \quad (2.14)$$

$$2 - \alpha = d\nu = 2\beta + \gamma. \quad (2.15)$$

Podemos perceber que todas as relações expostas não permitem calcular os expoentes críticos separadamente. Por isso definimos um conjunto de quantidades termodinâmicas provenientes do logaritmo da derivada da magnetização [29],

$$V_1 \equiv 4[m^3] - 3[m^4], \quad (2.16)$$

$$V_2 \equiv 2[m^2] - [m^4], \quad (2.17)$$

$$V_3 \equiv 3[m^2] - 2[m^3], \quad (2.18)$$

$$V_4 \equiv (4[m] - [m^4])/3, \quad (2.19)$$

$$V_5 \equiv (3[m] - [m^3])/2, \quad (2.20)$$

$$V_6 \equiv 2[m] - [m^2], \quad (2.21)$$

onde

$$[m^n] \equiv \ln \frac{\partial \langle m^n \rangle}{\partial T}. \quad (2.22)$$

Esses cumulantes permitem determinar o expoente crítico ν mesmo desconhecendo ainda a temperatura crítica, pois partindo da equação 2.11 é fácil mostrar que

$$V_i(L) \approx (1/\nu) \ln L + \mathcal{V}_i(tL^{1/\nu}) \quad (2.23)$$

para $i = 1, 2, \dots, 6$. Na temperatura crítica T_c ($t = 0$), temperatura na qual as funções assumem o valor máximo, os \mathcal{V}_i são constantes independentes do tamanho do sistema e através do ajuste linear do gráfico de $V_i(L) \times L$, encontramos o expoente $1/\nu$ que é o coeficiente angular da reta. Uma vez determinado o expoente ν a temperatura crítica T_c pode ser estimada através dos picos do calor específico e da susceptibilidade, pois nessa

posição as equações 2.12 e 2.13 variam assintoticamente como

$$T_c(L) \approx T_c + a_q L^{-1/\nu}, \quad (2.24)$$

onde a_q é uma constante, permitindo então a determinação de T_c .

2.4 Flutuações

As flutuações de uma grandeza termodinâmica são propriedades fisicamente interessantes, pois podem ser relacionadas com propriedades termodinâmicas do sistema utilizadas para determinar o comportamento dos expoentes críticos. A flutuação quadrática de uma média é dada por $\sigma^2 = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2$, ela nos diz quão afastado da média está nossa amostragem. Calculando para a energia obtemos:

$$\sigma^2 = \frac{\sum_E E^2 g(E) e^{-\beta E}}{\sum_E g(E) e^{-\beta E}} - \left(\frac{\sum_E E g(E) e^{-\beta E}}{\sum_E g(E) e^{-\beta E}} \right)^2. \quad (2.25)$$

Esta expressão é exatamente o negativo da derivada da energia média com respeito a β . Além disso, da termodinâmica sabemos que a capacidade térmica é dada por $C = \partial U / \partial T$ e usando a regra da cadeia chegamos em

$$C = \frac{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2}{k_B T^2}. \quad (2.26)$$

Vemos assim que a flutuação da energia está relacionada diretamente com a capacidade térmica do sistema estudado. Outro ponto importante da flutuação da energia é que é através dela que demonstramos a equivalência entre a energia interna e a energia média calculada pela física estatística, para $N, V \rightarrow \infty$ de modo que a densidade N/V se mantém constante.

2.5 Simulação de Monte Carlo

A principal função da simulação de Monte Carlo é obter o valor esperado de uma grandeza termodinâmica $\langle A \rangle$ relacionado com a quantidade observada A , tal como energia interna de um gás ou magnetização para um modelo magnético. Como definido anteriormente, a forma ideal de calcular a média de uma grandeza é através da Eq. 2.7 percorrendo todos os estados possíveis do sistema. Entretanto isso só é tratável para sistemas extremamente pequenos. Em sistemas enormes a quantidade de estados visitados pela simulação é somente uma fração muito pequena do total, que introduz imprecisão no resultado do cálculo. A técnica de Monte Carlo se assenta na escolha de um subconjunto de estados aleatórios de alguma distribuição de probabilidade p_μ que especificamos. Suponha

que escolhemos M estados do total, uma melhor estimativa da quantidade A será dada por

$$A_M = \frac{\sum_{i=1}^M p_{\mu_i}^{-1} A_{\mu_i} e^{-\beta E_{\mu_i}}}{\sum_{j=1}^M p_{\mu_j}^{-1} e^{-\beta E_{\mu_j}}}, \quad (2.27)$$

A_M é chamado de estimativa de A . A medida que M é incrementado a média se torna cada vez mais próxima do valor real, e quando $M \rightarrow \infty$ temos $A_M = \langle A \rangle$. A grande questão é como escolher a distribuição de probabilidade que melhor representa seu sistema. No algoritmo de Metropolis é utilizada a distribuição de Boltzmann, tornando assim a estimativa numa simples média aritmética dos valores visitados

$$A_M = \frac{\sum_{i=1}^M A_{\mu_i}}{M}. \quad (2.28)$$

Uma outra opção é realizar a simulação entrópica, utilizado pela primeira vez por Lee [30], que significa escolher nossa distribuição como sendo proporcional ao inverso da densidade de estados microcanônica

$$p(E) \propto \frac{1}{g(E)} \quad (2.29)$$

onde $g(E)$ é o número de estados com energia E . Então a probabilidade de escolher uma configuração que tenha energia E é

$$g(E) p(E) = \frac{1}{K}, \quad (2.30)$$

onde K é uma constante de proporcionalidade. Em outras palavras, a probabilidade de se escolher uma configuração com energia E é constante para todas as energias. Dessa forma a equação para estimar uma quantidade termodinâmica é da forma da Eq. 2.8. Conseguindo estimar a densidade de estados a média passa a não depender da quantidade M de estados visitados e sim da eficiência do algoritmo utilizado para realizar a estimativa de $g(E)$.

2.6 Condições periódicas de contorno

Nas simulações de Monte Carlo usamos condições periódicas de contorno para evitar efeitos de borda. Em simulações de sistemas de spin de Ising os spins das bordas interagem com os vizinhos mais próximos e com os da extremidade oposta ao sentido da interação, esse procedimento é análogo ao de replicar o sistema em todos os lados da caixa de simulação, como mostrado na Fig. 2.1. Nela temos a caixa de simulação no centro e as réplicas no entorno, assim podemos perceber com facilidade que o spin da posição 1 realizará interação com os spins 2, 3, 4 e 5. Os demais spins das bordas seguem o mesmo

padrão de interação.

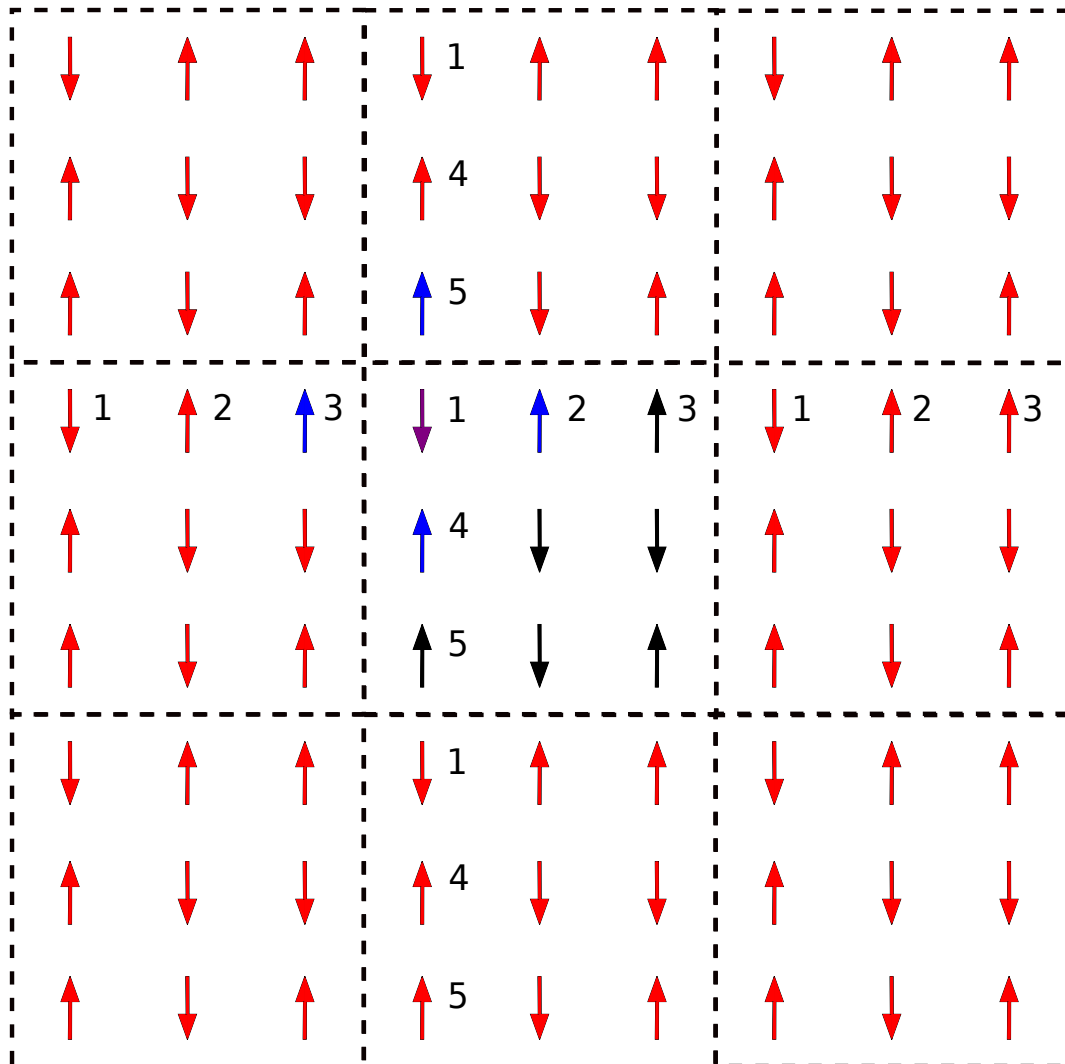


Figura 2.1: Caixa de simulação e suas réplicas.

SIMULAÇÃO ENTRÓPICA

A função da simulação entrópica é estimar a densidade de estados do sistema estudado. Esse tipo de simulação tem chamado a atenção pela eficiência em abordar comportamentos críticos. Por ser uma simulação razoavelmente nova, pesquisadores em geral têm aplicado a sistemas que possuem solução bem conhecida para testar sua validade, obtendo resultados empolgantes. De certa forma os procedimentos realizados por esse algoritmo foram propostos de forma empírica.

O algoritmo é baseado na criação e monitoramento de um histograma de energia. Toda vez que o histograma fica suficientemente nivelado temos uma estimativa da densidade de estados, onde a equação 2.30 torna-se, aproximadamente, válida. Assim assumimos que o critério de nivelamento garante que a probabilidade de obter uma configuração com uma energia qualquer é constante.

Em nossa simulação estamos interessados em determinar o número de configurações em uma dada energia, sabemos que esse número é extremamente grande para sistemas com muitas partículas, por essa razão é sensato simularmos o logaritmo da densidade de estados, definindo a quantidade $S(E)$ como

$$S(E) = \ln g(E) \tag{3.1}$$

$S(E)$ é conhecida como entropia microcanônica e $g(E)$ a densidade de estados que inicialmente não é conhecida, e atribuímos a ela o valor unitário para todos os níveis de energia, que é o mesmo de $S(E) = 0$. Para iniciar a simulação partimos de uma configuração qualquer, por conveniência escolhemos a configuração de mais baixa energia, e a partir dela fazemos pequenas alterações na configuração, modificando apenas um spin, essa nova configuração é aceita com probabilidade dada por

$$P(\mu \rightarrow \nu) = \begin{cases} e^{S(E_\mu) - S(E_\nu)}, & \text{se } g(E_\mu) < g(E_\nu) \\ 1, & \text{caso contrário} \end{cases}$$

O passeio aleatório acontece sobre todos os níveis de energia desde E_{min} até E_{max} . Todas as vezes que uma nova configuração é aceita o histograma é alterado $H(E_\nu) \rightarrow H(E_\nu) + 1$ e $S(E_\nu) \rightarrow S(E_\nu) + F_i$ é atualizado, onde $F_i = \ln f_i$ e $f_0 \equiv e = 2.71828\dots$. Esse procedimento é repetido por vários passos de Monte Carlo e então realiza-se a verificação de nivelamento exigindo que $H(E) > r\langle H \rangle$ para todas as energias, onde $\langle H \rangle$ é a média sobre todas as energias. Se essa condição é satisfeita então $f_{i+1} = \sqrt{f_i}$ e o histograma é zerado $H(E) = 0$. O valor do parâmetro r é escolhido visando obter uma boa estimativa da densidade de estados em um tempo computacional viável, geralmente escolhe-se $r = 0.8$. O artigo de Wang-Landau [21] sugere finalizar a simulação quando $f \sim 1+10^{-8}$, porém recentemente Caparica [23] propôs algumas alterações nesse algoritmo que levam a melhorias significativas. A saber as alterações são

- Atualizar a densidade de estado e o histograma somente depois de cada passo de Monte Carlo. (Um passo de Monte Carlo corresponde a dar a cada componente do sistema a possibilidade de se alterar.)
- Acumular as médias microcanônicas da magnetização somente após f_7 .
- E por último, finalizar a simulação em f_{final} definido pela média canônica durante a simulação.

Para realizar esta última alteração investigamos o comportamento do máximo do calor específico, dado pela equação 2.26 onde as médias da energia são realizadas com o $g(E)$ corrente. A partir do f_7 quando o histograma é considerado nivelado calculamos a temperatura do máximo do calor específico $T_c(0)$. Durante a simulação do próximo f calculamos o valor do parâmetro

$$\varepsilon = |T_c(t) - T_c(0)|, \quad (3.2)$$

todas as vezes que verificamos a condição de nivelamento, onde $T_c(t)$ é a temperatura do máximo do calor específico obtida pela densidade estados corrente. Se o valor de ε permanecer menor que 10^{-4} durante todas as verificações feitas para um mesmo f então na passagem para o próximo nível do fator modificador salvamos a densidade de estados e as médias microcanônicas e finalizamos a simulação. Caso contrário, na passagem para o novo nível, atualizamos $T_c(0)$ como a temperatura do máximo do calor específico obtido com a última densidade de estado, prosseguindo com a simulação. Esse procedimento é um critério de finalização da simulação, tendo como base a invariância dos resultados para o calor específico, que nos remete a estabilização da densidade de estados, pois esses resultados dependem exclusivamente de $g(E)$. Para o modelo de Ashkin-Teller, tamanho $L = 56$, obtemos a evolução de quatro simulações distintas conforme mostrado na figura 3.1. Nela podemos observar que cada simulação convergiu para uma temperatura de equilíbrio em torno da temperatura característica do tamanho simulado.

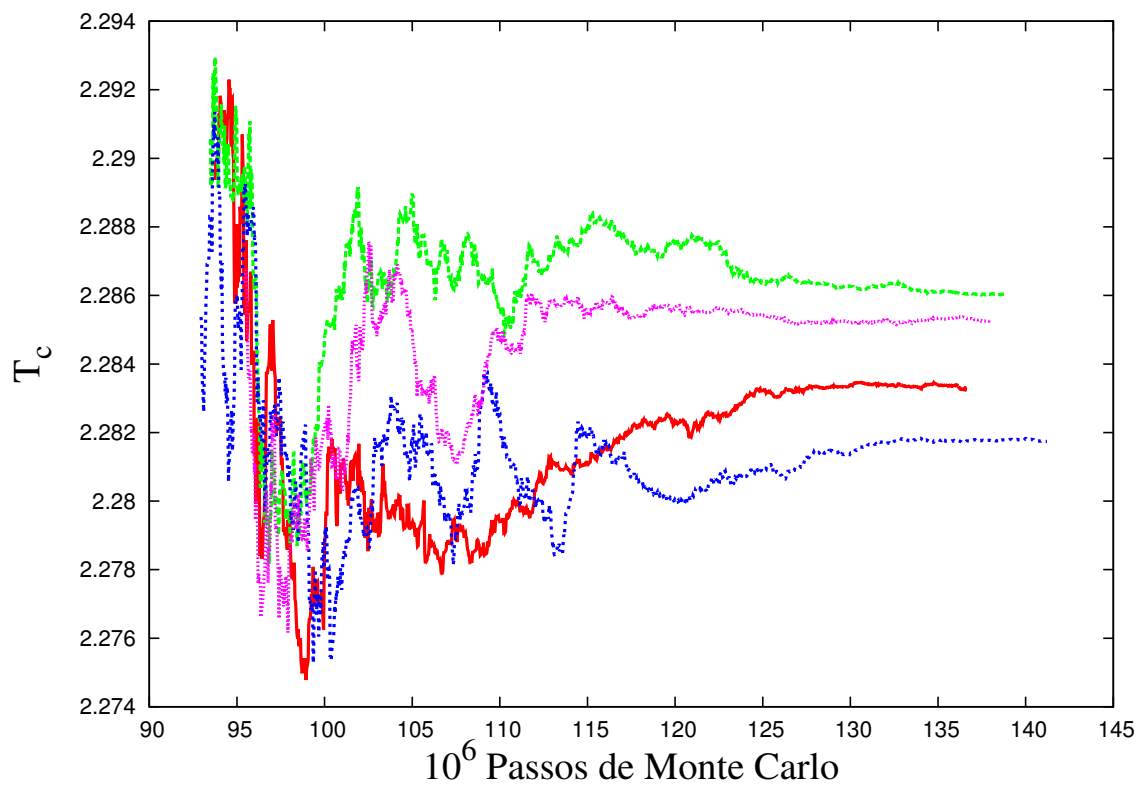


Figura 3.1: Evolução da temperatura do máximo do calor específico durante a simulação de WL, $L = 56$.

Todas as mudanças são de fácil implementação, além de concordar com a teoria da simulação de MC. A primeira das alterações leva a escolha de configurações menos correlacionadas, tornando a amostragem no espaço de energia mais eficaz. E a terceira leva em conta a característica estocástica da simulação, prevendo que cada simulação poderá ter um f_{final} diferente.

MODELO DE ASHKIN-TELLER

Em 1943 Ashkin e Teller (AT) [1] propuseram um modelo que representava a interação entre quatro diferentes tipos de átomos. Todavia o problema a ser estudado estava longe de ser resolvido analiticamente. Vinte e nove anos depois Fan [2] propôs que o modelo poderia ser comparado ao modelo de 8-Vértices [3]. Entretanto a comparação não podia ser feita diretamente, só no caso em que a transformação de dualidade fosse única, Não o bastante, informações relevantes foram apresentadas nesse trabalho, tais como ele escreve a hamiltoniana do sistema em termos de dois spins de Ising por sítios da rede, o que possibilitou fácil a comparação com dois modelos bem conhecidos: Ising [3] e Potts $q - 4$ [19].

A partir daí, uma série de estudos foi realizada para determinar o diagrama de fase do sistema [4, 5, 6, 7, 8] que é rico em detalhes. Simulações computacionais também foram realizadas para o modelo [9, 10, 11] para diferentes casos. Aplicações em diferentes tipos de materiais já foram desenvolvidas passando por diagrama de fase para superfícies de Se depositado sobre Ni(001) [12, 13], diagrama de fase e propriedades críticas do ordenamento em $YBa_2Cu_3O_z$ [14], transições de fase anômala fluido gel nos lipídios iônicos bicamada ou formação de lamelas cobrados [15] e fases de cupratos [16, 17, 18].

Esse modelo tinha como ideia original estudar um sistema de quatro componentes usando grupo de renormalização. Cada sítio da rede \mathcal{L} é ocupada por um dos quatro tipos de átomos: A, B, C, D. Dois átomos vizinhos interagem com energia: ϵ_0 para AA, BB, CC, DD; ϵ_1 para AB, CD; ϵ_2 para AC, BD e ϵ_3 para AD, CB.

O modelo pode ser expresso em termos de spins de Ising, com cada sítio associado com dois spins: τ_i e σ_i , Sendo $(\tau_i, \sigma_i) = (+, +)$ se há um átomo A no sítio i ; $(\tau_i, \sigma_i) = (+, -)$ se um átomo B; $(\tau_i, \sigma_i) = (-, +)$ se um átomo C; e $(\tau_i, \sigma_i) = (-, -)$ se D. Na Fig. 4.1 está mostrado uma parte de uma rede bidimensional onde cada sítio do sistema é o par ordenado (τ_i, σ_i) . Os retângulos em vermelho representam as iterações entre quatro spins.

A interação de energia para cada par (i, j) é

$$E(i, j) = -J\tau_i\tau_j - J'\sigma_i\sigma_j - J_4\tau_i\sigma_i\tau_j\sigma_j - J_0, \quad (4.1)$$

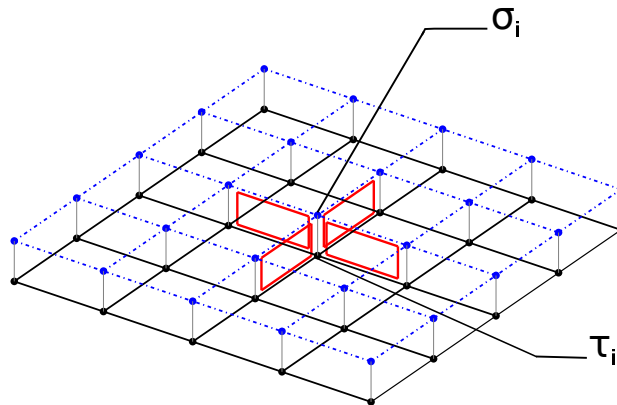


Figura 4.1: Representação do Modelo de Ashkin-Teller em duas redes bidimensionais.

onde

$$-J_0 = (\epsilon_0 + \epsilon_1 + \epsilon_2 + \epsilon_3)/4, \quad (4.2a)$$

$$-J = (\epsilon_0 + \epsilon_1 - \epsilon_2 - \epsilon_3)/4, \quad (4.2b)$$

$$-J' = (\epsilon_0 - \epsilon_1 + \epsilon_2 - \epsilon_3)/4, \quad (4.2c)$$

$$-J_4 = (\epsilon_0 - \epsilon_1 - \epsilon_2 + \epsilon_3)/4. \quad (4.2d)$$

Usando as equações 4.2 podemos escrever os pesos estatísticos $\omega_i = \exp(-\epsilon_i/k_B T)$ com $i = 0, \dots, 3$ como:

$$\omega_0 = \exp(K_0 + K + K' + K_4), \quad (4.3a)$$

$$\omega_1 = \exp(K_0 + K - K' - K_4), \quad (4.3b)$$

$$\omega_2 = \exp(K_0 - K + K' - K_4), \quad (4.3c)$$

$$\omega_3 = \exp(K_0 - K - K' + K_4). \quad (4.3d)$$

onde $K_i = J_i/k_B T$. Não faremos a resolução analítica do modelo, pois não é esse o objetivo desse trabalho, apenas mencionaremos os resultados encontrados. Levando em conta todas as interações possíveis, a Hamiltoniana do sistema é dada por

$$\mathcal{H} = -J_0 - \sum_{\langle i,j \rangle} J \tau_i \tau_j + J' \sigma_i \sigma_j + J_4 \tau_i \sigma_i \tau_j \sigma_j, \quad (4.4)$$

onde τ_i e σ_i são os graus de liberdade dos spins de Ising que estão sobre sítios da rede. A soma $\langle i, j \rangle$ é realizada sobre os vizinhos mais próximos. J_0 é uma constante aditiva, J constante de interação entre spins τ_i , J' constante de interação entre spins σ_i e J_4 constante de interação entre quatro spins. Ao escolhermos um determinado conjunto de J 's estamos definindo nosso sistema, por exemplo, fazendo $J_0 = J_4 = 0$ e $J = J' = 1$ temos duas redes de Ising desacopladas, cada rede possui a mesma temperatura crítica

dada por

$$\frac{k_B T_c}{J} = \frac{k_B T'_c}{J'} = \frac{1}{\ln(1 + \sqrt{2})}. \quad (4.5)$$

Ao escolhermos $J_0 = 0$ e $J = J' = J_4 = 1$ teremos uma analogia com o modelo de Potts $q = 4$ [2], com temperatura crítica

$$\omega_0/\omega_1 = 3, \quad (4.6)$$

levando em consideração as equações Eqs. 4.3 e 4.3 e os correspondentes valores dos J 's encontramos $T_c = 3.640956\dots$. Enfim cada conjunto diferente terá propriedades termodinâmicas diferentes, nas Fig. 4.2 e 4.3 mostramos o comportamento do calor específico para $L = 8$, $J_4 = 0$, $J = 1$ e $J' = 0.25, 0.50, 0.75, 1$ e para $J = 1$, $J' = 0.5$ e $J_4 = 0, 0.25, 0.50, 1$, respectivamente.

Na Fig. 4.2 podemos perceber dois picos e que quanto maior a diferença entre J e J' maior e a distância entre os picos, como previsto pela equação 4.5. Já na Fig. 4.3 vemos que J_4 provoca alteração no formato da curva, fazendo com que os dois picos se tornem um só com um pequeno incremento de J_4 .

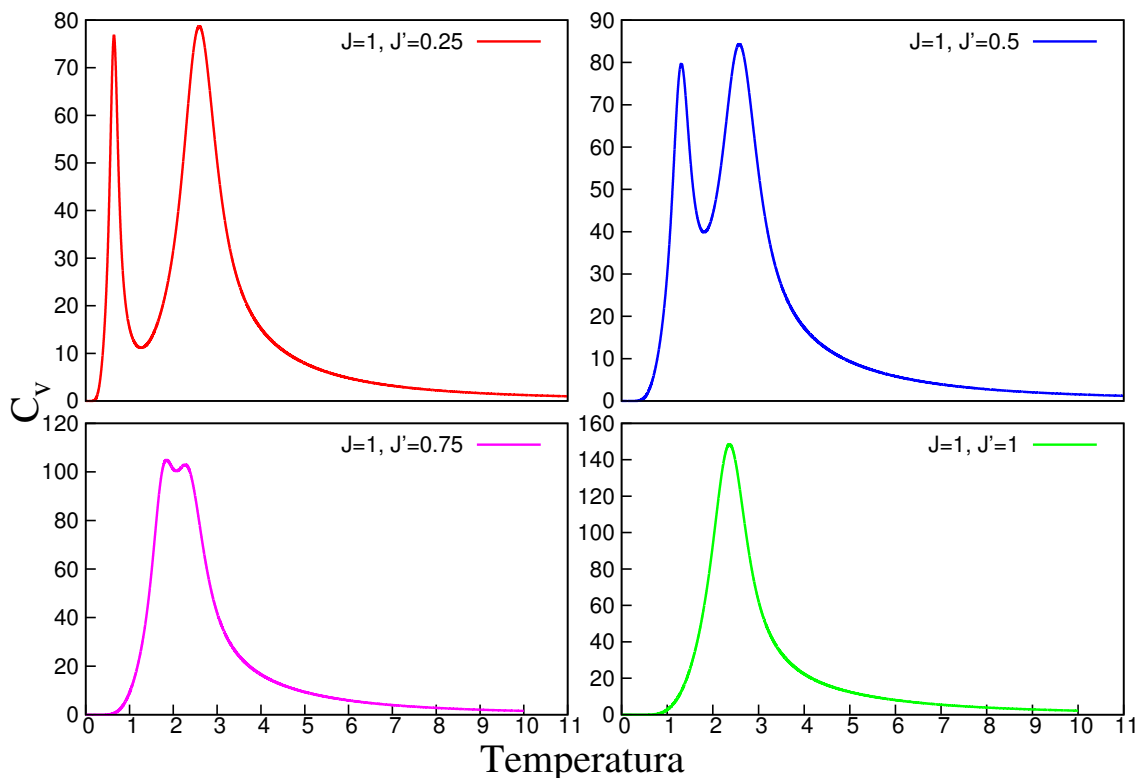


Figura 4.2: Comportamento do calor específico para $J_4 = 0$, $J = 1$ e $J' = 0.25, 0.50, 0.75, 1$, com $L = 8$.

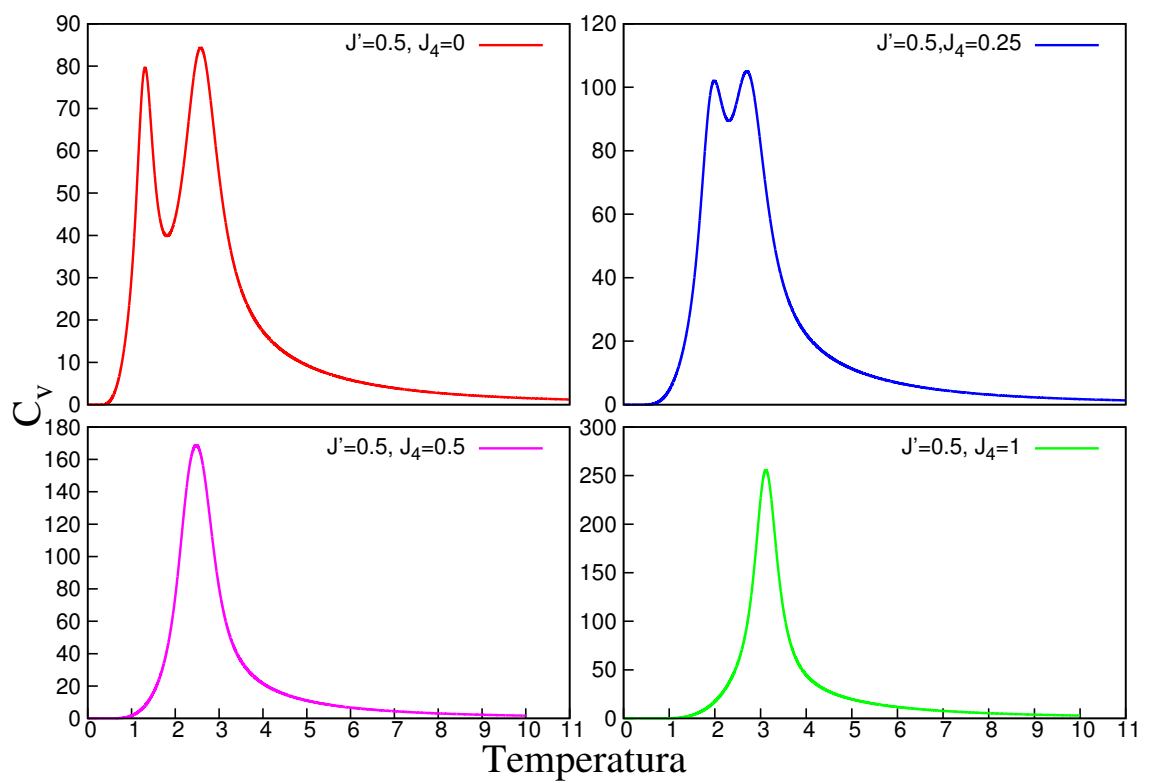


Figura 4.3: Comportamento do calor específico para $J = 1$, $J' = 0.5$ e $J_4 = 0, 0.25, 0.50, 1$, com $L = 8$.

RESULTADOS

Em nossas simulações consideramos casos em que $J = J' = 1$ e $J_4 = 0, 0.5$ ou 1 , para facilitar a escrita definimos $J_2 \equiv J = J'$. Para determinar os expoentes críticos para o modelo de Ashkin-Teller definimos um conjunto de tamanhos de redes com suas respectivas rodadas para os tamanhos: $L = 32, 36, 40, 44, 48, 52, 56, 64, 72$, e 80 tomando $N = 24, 24, 20, 20, 20, 16, 16, 16, 12$ e 12 rodadas independentes, respectivamente. Esse conjunto de dados representa um resultado particular dos expoentes. Para obter o resultado definitivo tomamos a média de dez conjuntos. Antes de apresentar os resultados dos expoentes críticos mostraremos o comportamento de $S(E)$, $m(T)$, $\chi(T)$ e $C_v(T)$.

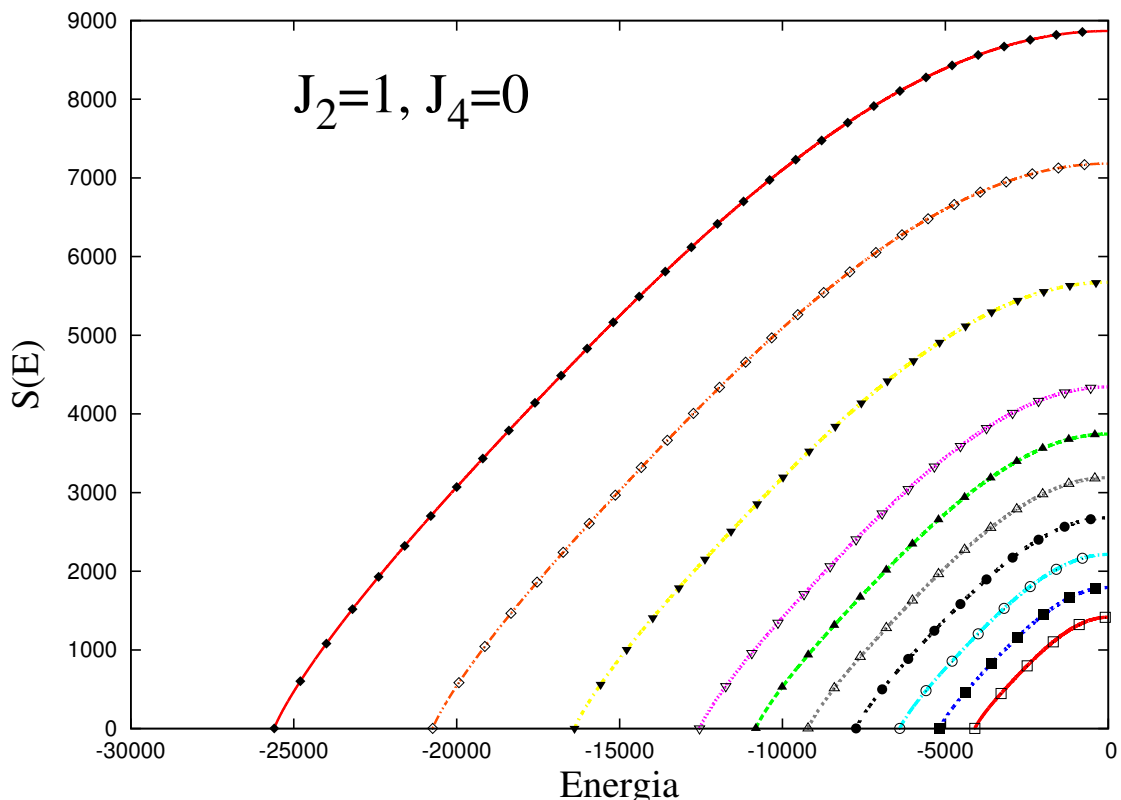


Figura 5.1: $S(E)$ para o caso $J_2 = 1, J_4 = 0$. Os tamanhos da rede estão em ordem crescente.

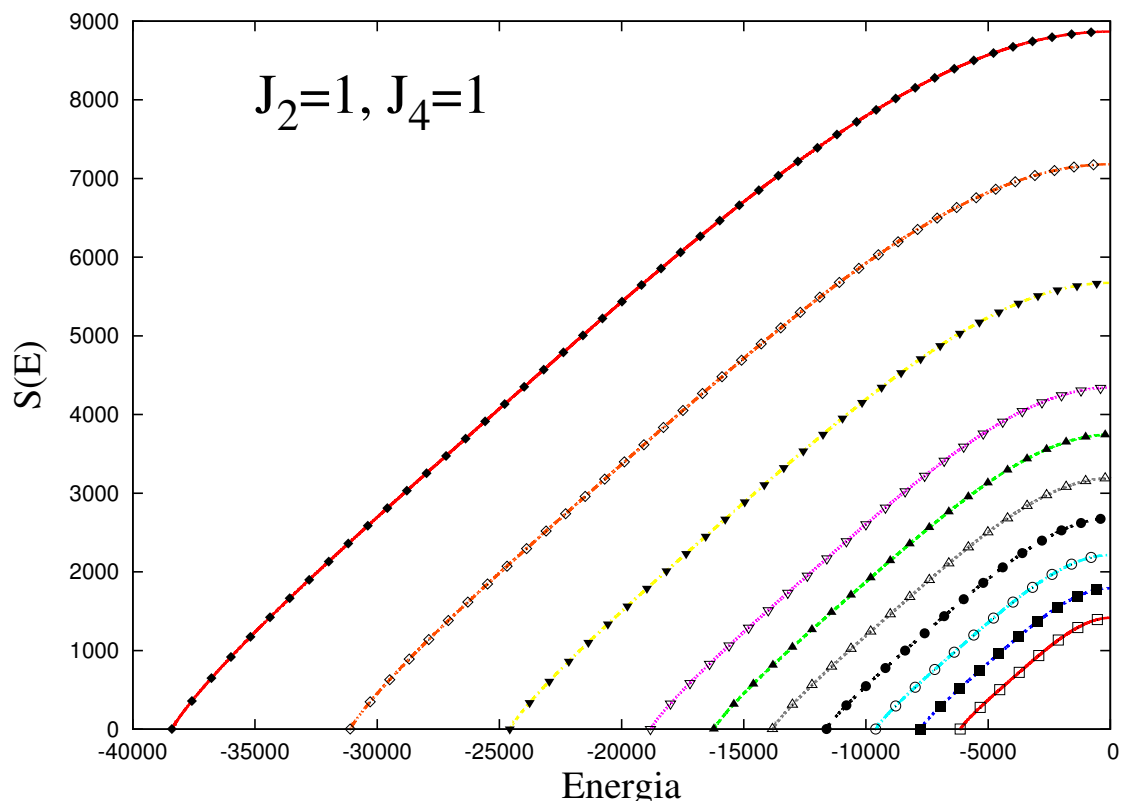


Figura 5.2: $S(E)$ para o caso $J_2 = 1, J_4 = 1$. Os tamanhos da rede estão em ordem crescente.

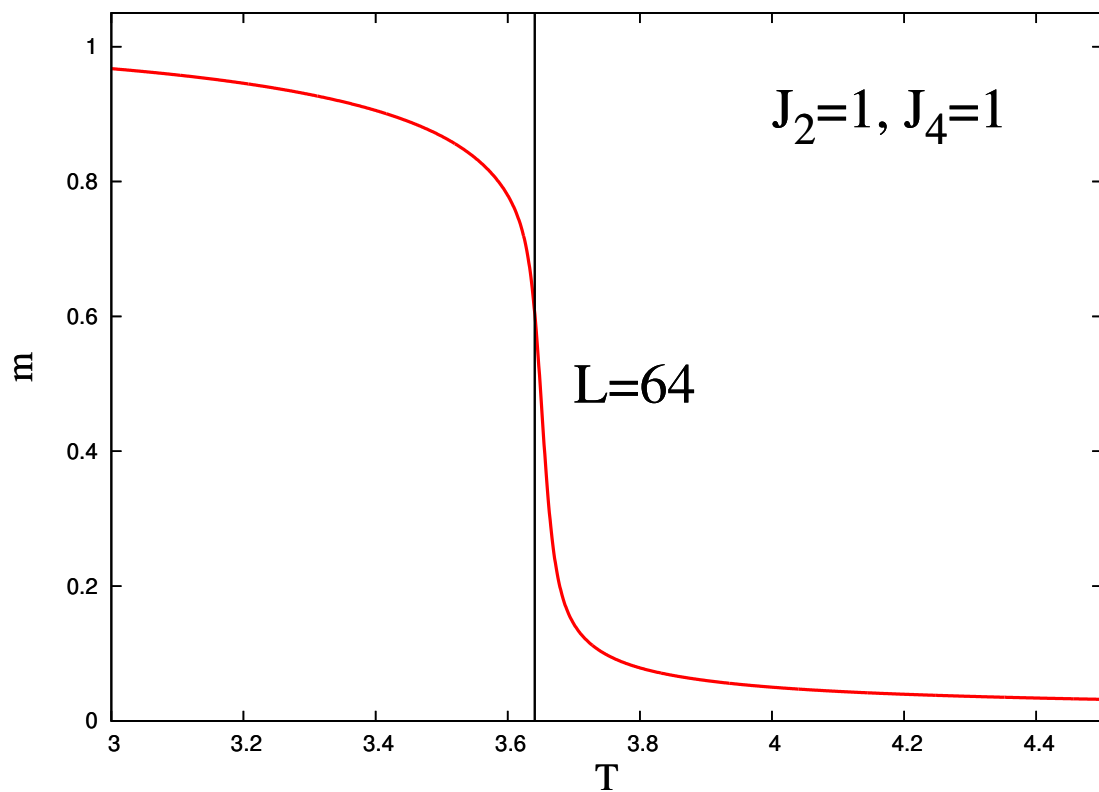


Figura 5.3: Magnetização para $L = 64$ e caso $(J_2 = 1, J_4 = 1)$. A linha vertical mostra a temperatura crítica exata, $T_c = 3.6409569$.

Na Fig. 5.1 está representada a entropia microcanônica do sistema para o caso ($J_2 = 1, J_4 = 0$) e na Fig. 5.2 o caso ($J_2 = 1, J_4 = 1$). As curvas apresentam o comportamento típico do logaritmo da densidade de estado para modelos que utilizam spins de Ising. Os tamanhos de redes estão em ordem crescente.

Na Fig. 5.3 mostramos a magnetização versus temperatura para $L = 64$, caso ($J_2 = 1, J_4 = 1$). A linha vertical mostra a temperatura crítica exata. Vemos que para temperaturas inferiores a T_c todos os spins estão ordenados para cima ou para baixo, de modo que a magnetização por spin é próxima à unidade. Acima da temperatura crítica o sistema varia rapidamente para uma configuração totalmente desordenada, ou seja, magnetização igual a zero. As curvas de magnetização para os demais tamanhos de rede são semelhantes ao representado nessa figura, a única diferença é que quanto menor o tamanho mais inclinada se torna a descida da magnetização.

A susceptibilidade como função da temperatura para uma rodada do tamanho $L = 64$ caso ($J_2 = 1, J_4 = 1$) é mostrada na Fig. 5.4. Nela podemos perceber claramente que o sistema sofre uma drástica variação em torno da temperatura crítica (linha vertical), como também mostrado na Fig. 5.3. Os valores do máximo da susceptibilidade e a temperatura associada a ela foram usados para determinar os expoentes críticos.

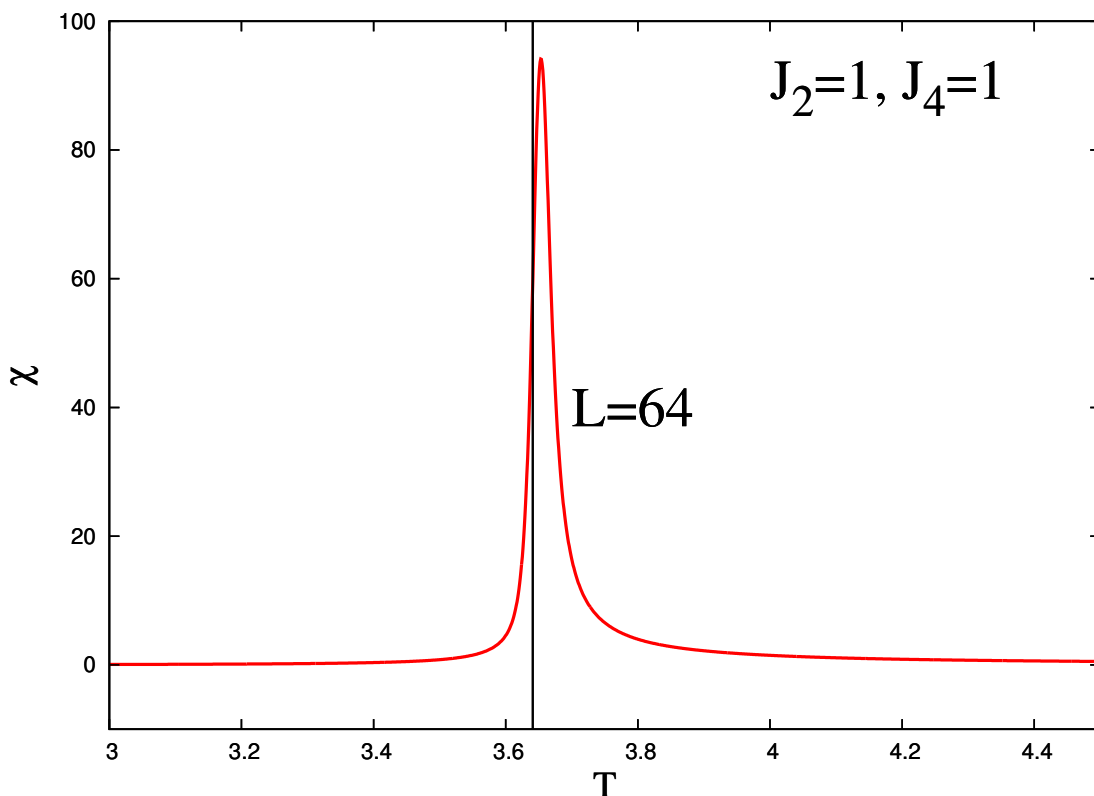


Figura 5.4: Susceptibilidade para $L = 64$ caso $J_2 = 1, J_4 = 1$. A linha vertical mostra a temperatura crítica exata, $T_c = 3.6409569$.

Na Fig. 5.5 podemos ver o calor específico para $L = 64$ caso ($J_2 = 1, J_4 = 1$). Observamos que quando a temperatura se aproxima de T_c (linha vertical) o calor específico

apresenta um pico que está relacionado a uma variação brusca da energia interna do sistema. Todos os resultados obtidos para $S(E)$, $m(T)$, $\chi(T)$ e $C_v(T)$ estão de acordo com o comportamento típico de uma transição de segunda ordem, semelhante à do modelo de Ising.

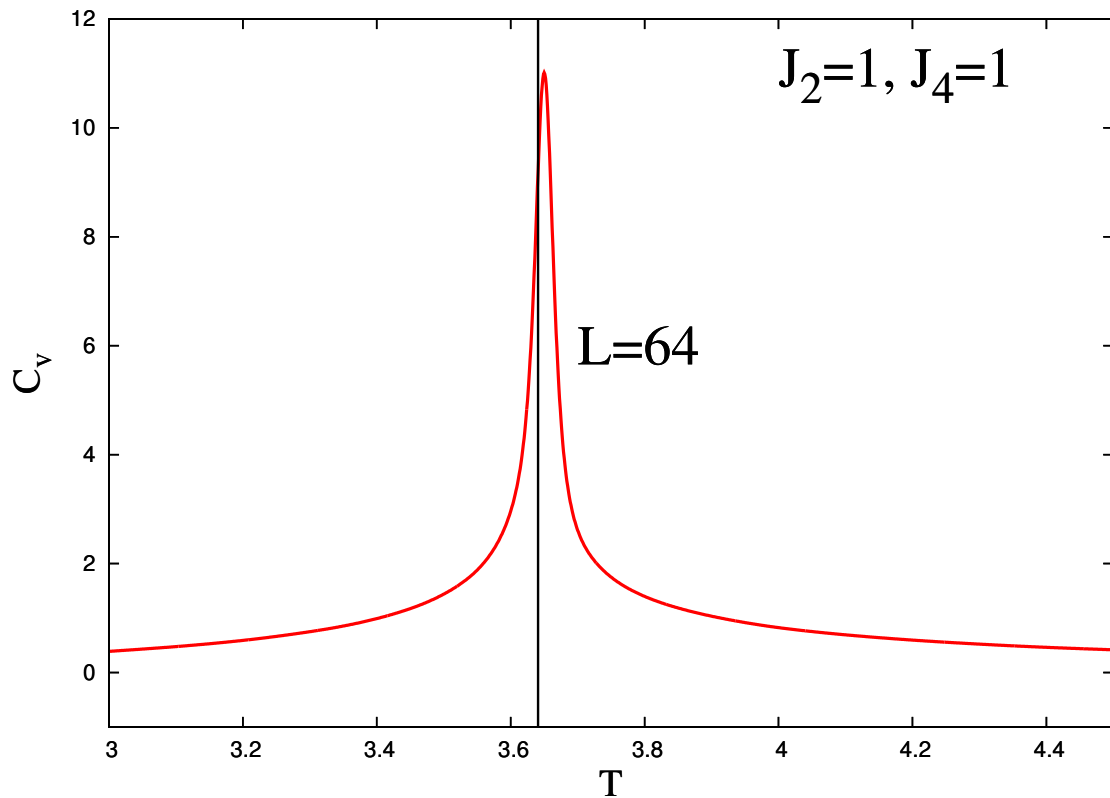


Figura 5.5: Calor específico para $L = 64$ caso ($J_2 = 1, J_4 = 1$). A linha vertical mostra a temperatura crítica exata, $T_c = 3.6409569$.

5.1 Caso ($J_2 = 1, J_4 = 0$)

Primeiramente analisaremos os resultados para o caso ($J_2 = 1, J_4 = 0$) no qual não calculamos o valor da expoente crítico ν pois este têm valor unitário e não interfere na obtenção dos outros expoentes.

Na Fig. 5.6 mostramos o resultado do ajuste linear para a temperatura crítica correspondente ao primeiro conjunto de dados. Como pode ser visto na equação 2.24 o valor para temperatura crítica é o coeficiente linear da reta que melhor ajusta aos dados. O resultado para cada conjunto é a média dos valores obtidos para susceptibilidade e calor específico. O valor final encontrado foi $T_c = 2.26930(38)$, sendo os números entre parênteses o desvio padrão da média, que deve ser somada sobre as duas últimas casas decimais. No gráfico estão suprimidos os pontos para que seja possível uma melhor visualização das barras de erros.

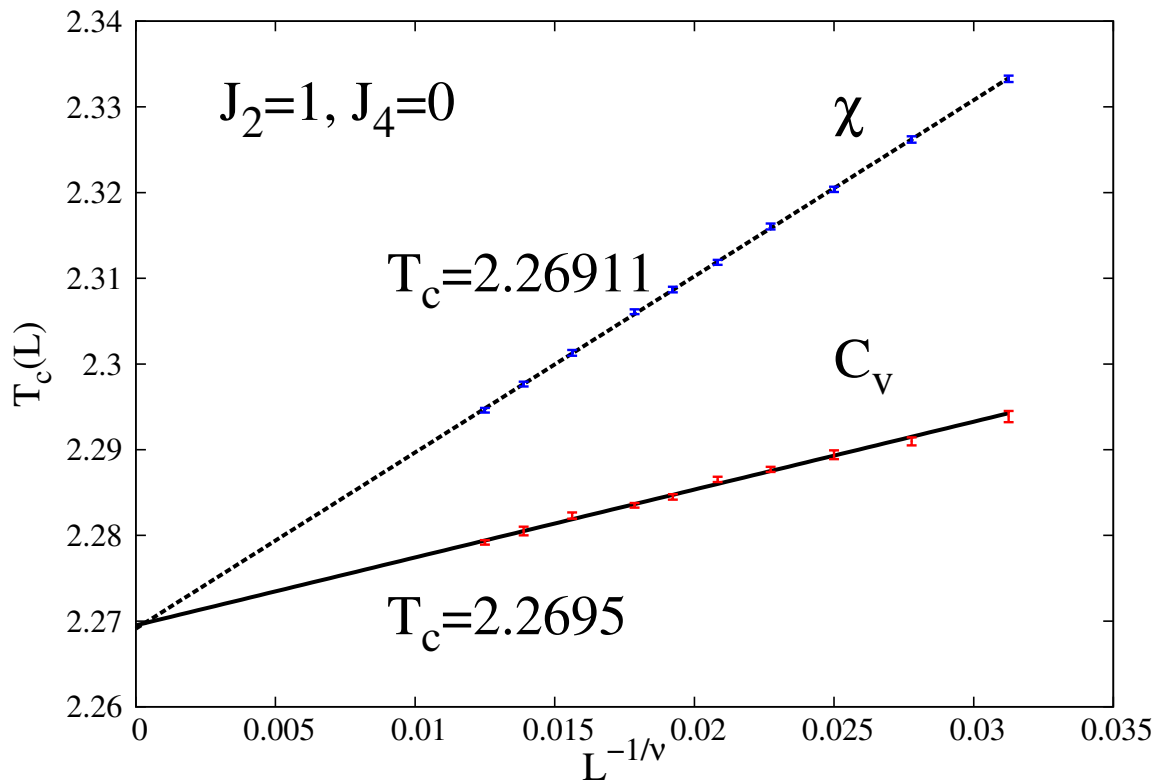


Figura 5.6: Resultado para temperatura crítica T_c para um conjunto de rodadas independentes, caso ($J_2 = 1, J_4 = 0$). O resultado para T_c é a média dos valores obtidos para susceptibilidade e calor específico.

Na Fig. 5.7 mostramos o ajuste linear log-log da equação 2.11 para um conjunto. O coeficiente angular da reta é o expoente $-\beta$. Os pontos estão com tamanho reduzido para visualização das barras de erros. Obtemos o mesmo comportamento para os dez conjuntos e como média final o valor $\beta = 0.1243(13)$.

O expoente γ foi obtido através do coeficiente angular da reta que melhor se ajustou aos dados, conforme Eq. 2.12. O valor desse expoente pode ser estimado de duas formas distintas, uma delas é encontrar o máximo da função χ diretamente e a outra é calcular o valor da função na melhor estimativa da temperatura crítica obtida da simulação. Na Fig 5.8 a linha contínua representa o ajuste linear para a primeira forma de calcular e a pontilhada a segunda forma. Para ambos os casos vemos que os dados simulados estão em concordância com os resultados exatos. O valor do expoente para cada conjunto é a média sobre os dois valores. Para todos os conjuntos obtivemos gráficos semelhantes a este. O resultado final para o expoente é $\gamma = 1.7496(69)$.

Para uma visualização mais clara dos resultados obtidos colocamos na tabela 5.1 os valores encontrados para os expoentes críticos de cada conjunto, o último valor é a média dos valores sem levar em consideração a barra de erro de cada amostra, o erro representado é o desvio padrão da média. A consideração da barra de erro em cada amostra leva a barras de erro irrealisticamente pequenas. Naturalmente o caso $J_4 = 0$

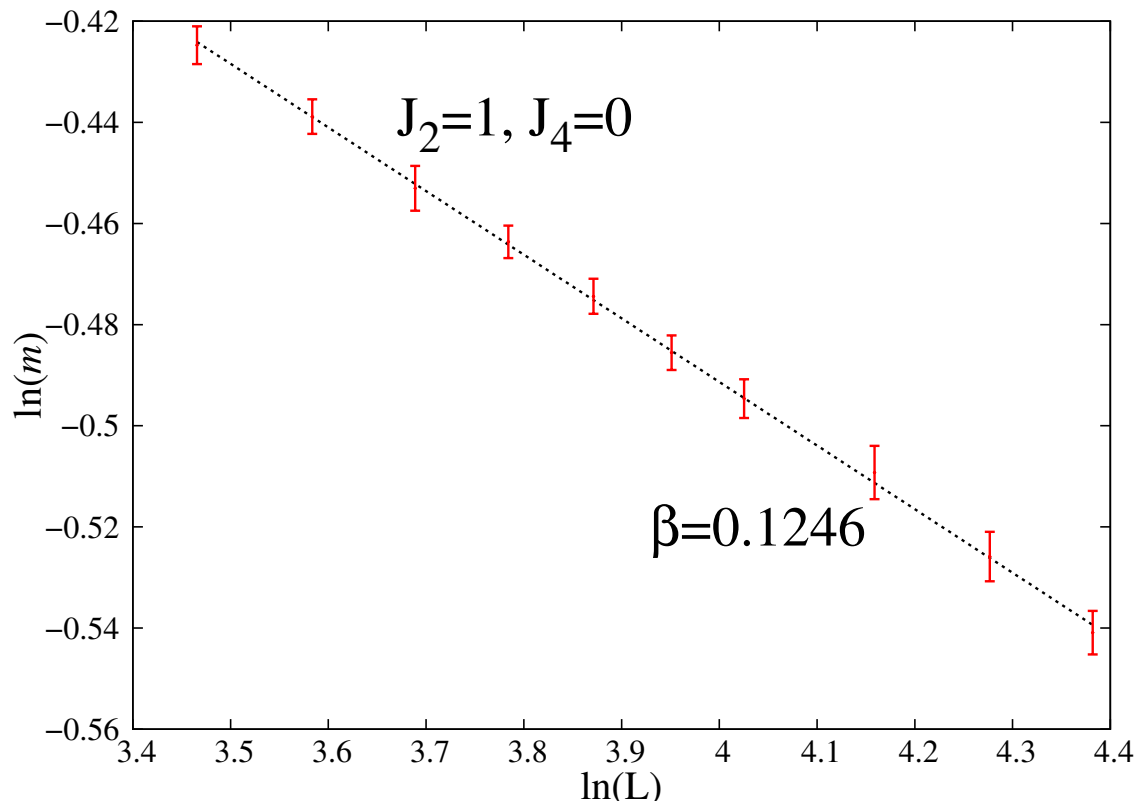


Figura 5.7: Resultado para expoente beta β para um conjunto, caso ($J_2 = 1, J_4 = 0$).

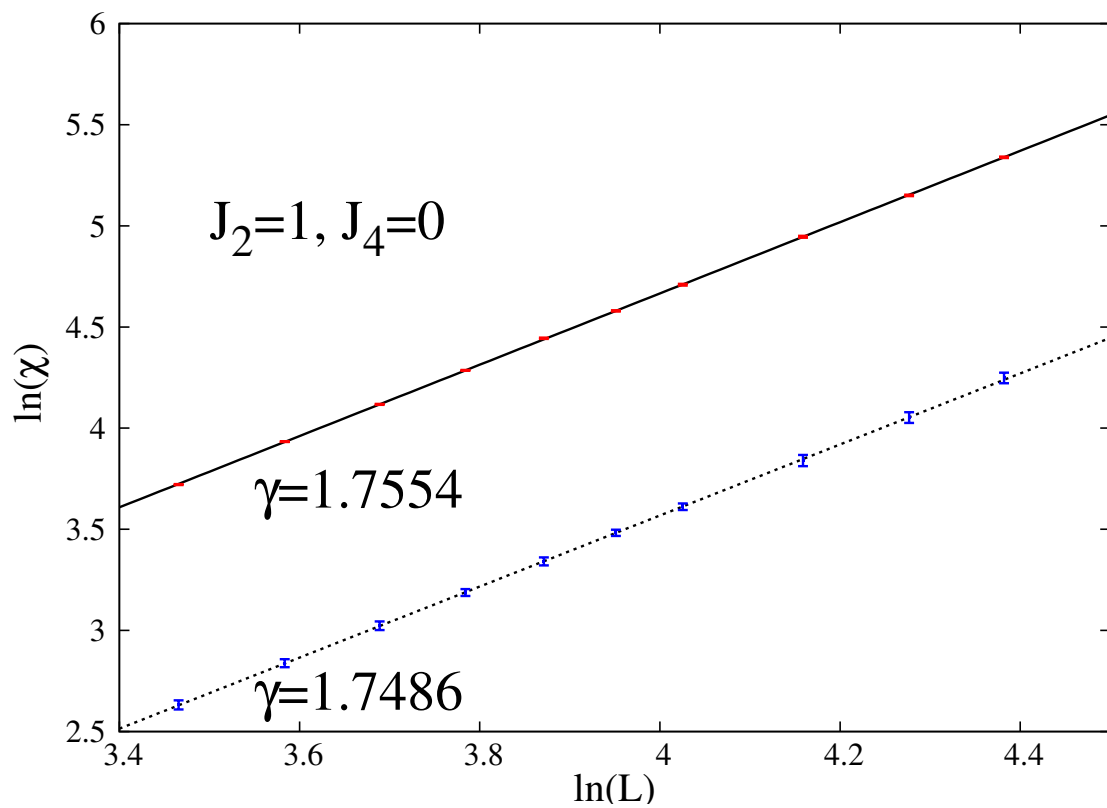


Figura 5.8: Resultado para expoente γ para um conjunto, caso ($J_2 = 1, J_4 = 0$).

Tabela 5.1: Resultados de dez simulações completas de tamanhos finitos para os expoentes críticos caso ($J_2 = 1, J_4 = 0$)

$J_2 = 1, J_4 = 0$		
T_c	β	γ
2.26917(13)	0.1246(10)	1.7520(40)
2.26949(28)	0.1236(17)	1.7434(76)
2.26862(30)	0.1258(24)	1.758(12)
2.26971(22)	0.1233(15)	1.7423(70)
2.26909(27)	0.1258(16)	1.748(11)
2.26935(25)	0.1255(16)	1.756(10)
2.26899(17)	0.1241(10)	1.7544(52)
2.26921(18)	0.1246(11)	1.7531(46)
2.27000(22)	0.1216(13)	1.7366(60)
2.26937(13)	0.12462(67)	1.7530(37)
2.26930(38)	0.1243(13)	1.7496(69)

corresponde ao modelo de Ising 2D, para o qual $T_c = 2.269185\dots$, $\beta = 0.125$ e $\gamma = 1.75$. Observando os resultados da Tabela 5.1 vemos que se tivéssemos considerado apenas um conjunto de dados, poderíamos chegar a resultados bastante ruins, como notadamente o nono conjunto. Adotando porém a média sobre os dez conjuntos garantimos que os resultados são realmente precisos.

5.2 Caso ($J_2 = 1, J_4 = 1$)

Para o caso ($J_2 = 1, J_4 = 1$) primeiramente calculamos o expoente crítico $1/\nu$ como sendo a média aritmética dos seis valores provenientes dos coeficientes angulares das retas de ajuste dados pela Eq. 2.23, para cada um dos dez conjuntos de rodadas independentes, o valor final é a média simples dos dez valores obtidos.

Na Fig. 5.9 mostramos os ajustes lineares para as seis funções V_i' s para um dado conjunto. Podemos observar que os dados escalam muito bem ao ajuste linear e as barras de erros são menores que os pontos impossibilitando a visualização. O coeficiente angular da reta de ajuste fornece a quantidade $\frac{1}{\nu}$, assim $\nu = 1/(\frac{1}{\nu})$ com o erro dado por $\Delta\nu = \Delta(\frac{1}{\nu})/(\frac{1}{\nu})^2$ para cada conjunto independente, dessa forma encontramos $\nu = 0.7117(16)$ como sendo nossa melhor estimativa.

Tendo em mãos o resultado definitivo para ν podemos calcular a temperatura crítica. No gráfico da Fig. 5.10 exibimos o comportamento da temperatura do máximo do

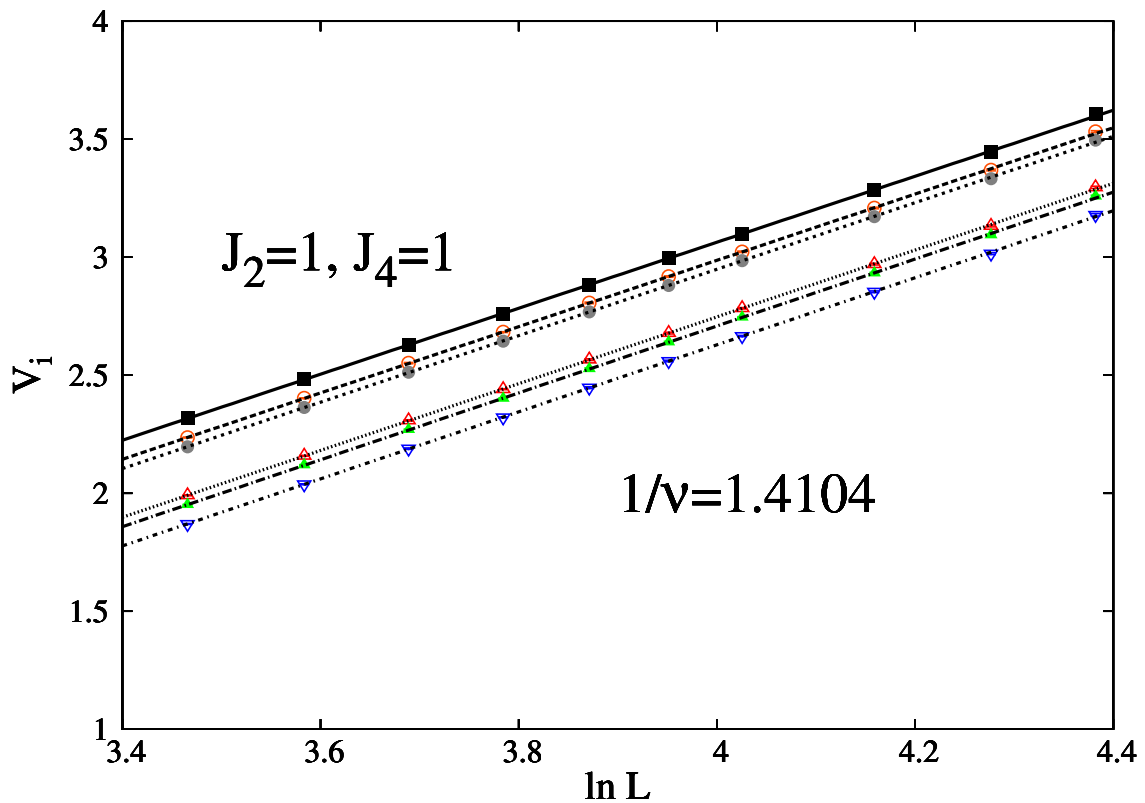


Figura 5.9: Resultado para expoente ν para um conjunto, caso ($J_2 = 1, J_4 = 1$).

calor específico e susceptibilidade com o tamanho $L^{-1/\nu}$. Assim como no caso ($J_2 = 1, J_4 = 0$) o resultado para T_c é a média dos valores obtidos para susceptibilidade e calor específico. Os pontos estão em tamanho reduzido para proporcionar a visualização das barras de erro. O resultado final para a temperatura crítica é $T_c = 3.64118(13)$.

Um dos ajustes lineares para o expoente β está mostrado na Fig. 5.11. Para todos os dez conjuntos obtivemos gráficos semelhantes. Calculamos $\beta = \nu \frac{\beta}{\nu}$ com o erro do dado por $\Delta\beta = \frac{\beta}{\nu} \Delta\nu + \nu \Delta \frac{\beta}{\nu}$, obtendo o valor final $\beta = 0.0952(16)$.

Para calcular o expoente γ utilizamos o mesmo procedimento que no caso ($J_2 = 1, J_4 = 0$). Entretanto o valor obtido é γ/ν , então o valor para o expoente é calculado de forma análoga ao de beta, e calculando a média dos dez conjuntos de rodadas independentes encontramos $\gamma = 1.3026(58)$. O ajuste linear para o expoente γ está mostrado na Fig. 5.12

Na tabela 5.2 mostramos os dez resultados para os expoentes críticos, onde podemos observar que os resultados para cada conjunto estão próximos uns dos outros e que a média final contempla a maioria dos valores dentro da barra de erro, fornecendo assim um resultado mais confiável.

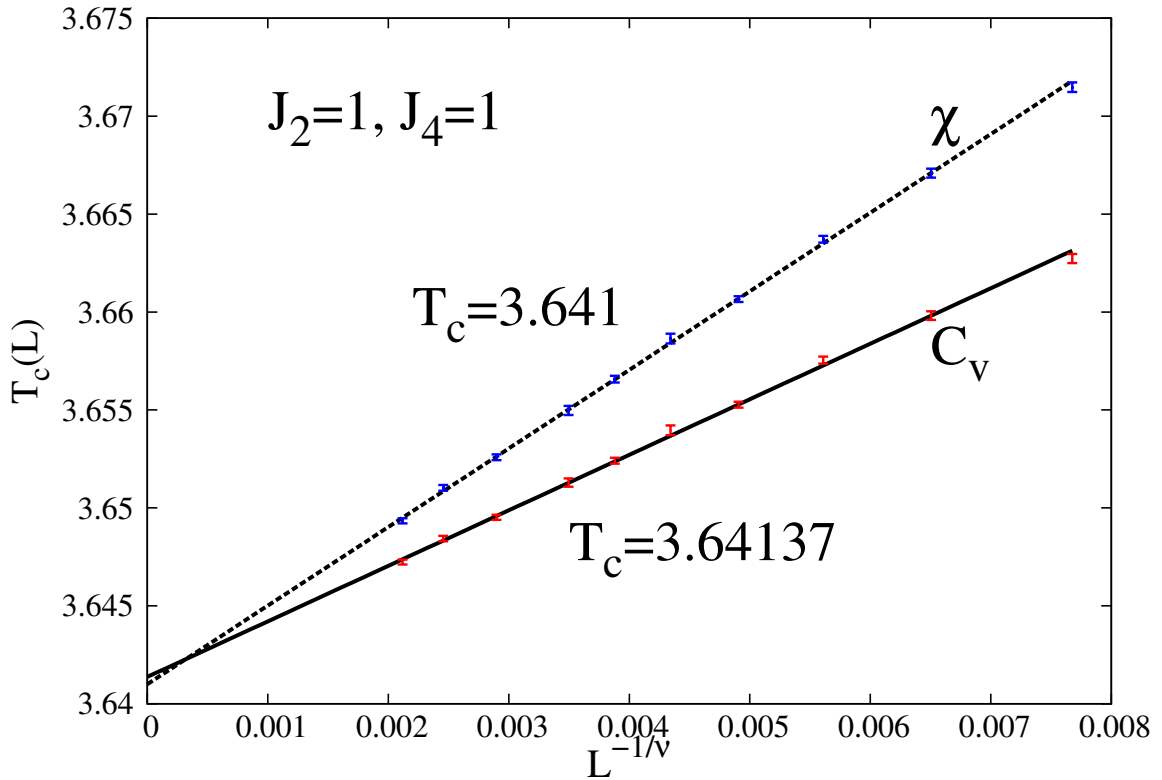


Figura 5.10: Dependência da temperatura do máximo do calor específico e susceptibilidade com tamanho da rede para um conjunto, caso ($J_2 = 1, J_4 = 1$). O resultado para T_c é a média dos valores obtidos para susceptibilidade (linha pontilhada) e calor específico (linha contínua).

Tabela 5.2: Resultados de dez simulações completas de tamanhos finitos para os expoentes críticos caso ($J_2 = 1, J_4 = 1$).

$J_2 = 1, J_4 = 1$			
ν	T_c	β	γ
0.7089(42)	3.64118(27)	0.0945(30)	1.303(16)
0.7110(42)	3.64130(24)	0.0935(40)	1.298(17)
0.7135(39)	3.64125(22)	0.0947(38)	1.299(20)
0.7126(41)	3.64117(22)	0.0951(28)	1.304(12)
0.7123(42)	3.64098(20)	0.0984(36)	1.311(17)
0.7131(37)	3.64101(23)	0.0970(28)	1.311(16)
0.7116(45)	3.64139(20)	0.0929(31)	1.293(12)
0.7110(41)	3.64115(25)	0.0959(21)	1.307(14)
0.7135(39)	3.64113(22)	0.0961(34)	1.304(19)
0.7094(43)	3.64128(26)	0.0946(29)	1.301(16)
0.7117(16)	3.64118(13)	0.0952(16)	1.3026(58)

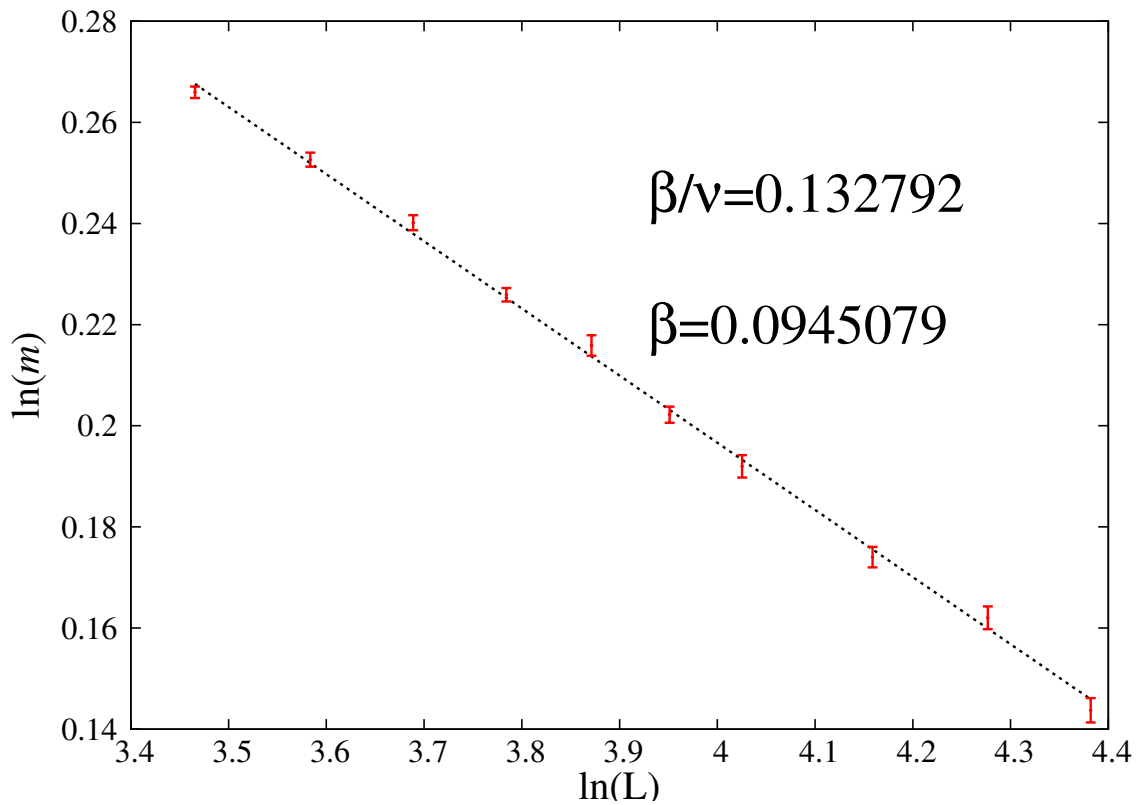


Figura 5.11: Dependência da magnetização com o tamanho da rede para um conjunto, caso ($J_2 = 1, J_4 = 1$).

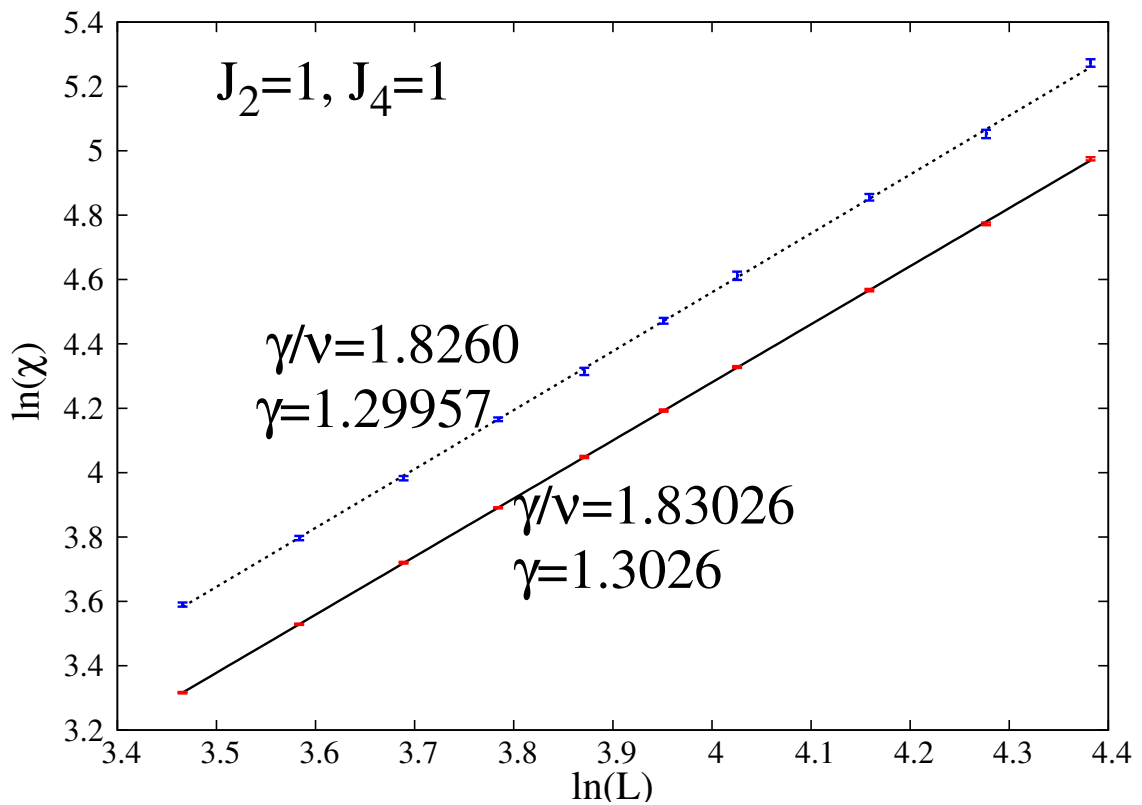


Figura 5.12: Dependência da susceptibilidade com o tamanho da rede, caso ($J_2 = 1, J_4 = 1$).

5.3 Caso ($J_2 = 1, J_4 = 0.5$)

Os bons resultados dos casos anteriores nos permite concluir que a simulação está coerente com o modelo proposto. Dessa forma podemos aplicá-la a casos em que não conhecemos os resultados exatos e estimar os expoentes críticos com boa precisão. Aplicamos os procedimentos descritos anteriormente para o caso ($J_2 = 1, J_4 = 0.5$) e obtivemos gráficos dos ajustes muito semelhantes aos mostrados para os dois casos que possuem solução exata e por essa razão omitiremos tais figuras.

Na tabela 5.3 mostramos os resultados das dez rodadas independentes para $J_2 = 1$ e $J_4 = 0.5$, e na tabela 5.4 apresentamos as estimativas da temperatura crítica e os expoentes ν , β e γ para os diferentes valores de J_4 . Esses resultados sugerem que os expoentes críticos ν , β e γ decresce e a temperatura crítica cresce com o incremento de J_4 .

Na tabela 5.5 fazemos uma comparação dos resultados obtidos com os valores teóricos e reportados na literatura. Para o caso ($J_2 = 1, J_4 = 0$) os nossos resultados estão bem próximos dos valores exatos e as barras de erro são semelhantes as do reportado no artigo Ref. [23]. Já para o caso ($J_2 = 1, J_4 = 1$) os valores encontrados para os expoentes ν , β e γ estão na mesma ordem de grandeza dos valores teóricos com erro relativo de 6.8%, 14% e 12% respectivamente. Obtivemos uma boa estimativa para a temperatura crítica, a qual difere do valor teórico em 0.006%.

Tabela 5.3: Resultados de dez simulações completas de tamanhos finitos para os expoentes críticos caso ($J_2 = 1, J_4 = 0.5$).

$J_2 = 1, J_4 = 0.5$			
ν	T_c	β	γ
0.7945(43)	3.00207(13)	0.09922(87)	1.4198(79)
0.7911(50)	3.00213(14)	0.0990(11)	1.419(10)
0.7967(43)	3.001885(74)	0.10123(82)	1.4272(73)
0.7916(46)	3.00177(11)	0.1016(18)	1.430(10)
0.7942(41)	3.002011(56)	0.0989(16)	1.420(11)
0.7963(41)	3.001992(33)	0.10051(97)	1.4207(78)
0.7911(49)	3.00193(20)	0.1002(13)	1.4287(79)
0.7941(53)	3.002080(74)	0.0993(12)	1.4195(98)
0.7936(40)	3.00195(22)	0.0995(13)	1.4263(75)
0.7929(59)	3.00207(16)	0.0997(13)	1.4222(99)
0.7936(20)	3.00199(11)	0.09991(93)	1.4233(41)

Tabela 5.4: Estimativas da temperatura crítica e os expoentes ν , β e γ para os diferentes valores de J_4 .

J_4	0	0.5	1.0
ν	1	0.7936(20)	0.7120(16)
T_c	2.26930(38)	3.0020(13)	3.64117(13)
β	0.1243(13)	0.09991(93)	0.0952(16)
γ	1.7496(69)	1.4233(41)	1.3026(58)

Tabela 5.5: Comparação dos expoentes críticos com os valores exatos e reportados na literatura.

Método	T_c	β	γ	ν
$J_4 = 0$				
Exato	2.2691853	0.125	1.75	-
[23]	2.26916(10)	0.12514(44)	1.7605(10)	-
Neste Trabalho	2.26930(38)	0.1243(13)	1.7496(69)	-
$J_4 = 0.5$				
Neste Trabalho	3.00199(11)	0.0997(13)	1.4233(41)	0.7936(20)
$J_4 = 1$				
Conjectura	3.6409569	0.08333	1.16666	0.66666
[4]	3.533	0.091	1.330	0.756
[26]	-	0.0877(37)	1.3161(69)	0.7076(10)
Neste Trabalho	3.64118(13)	0.0952(16)	1.3026(58)	0.7117(16)

CONCLUSÕES

Neste trabalho utilizamos simulações entrópicas para determinar os expoentes críticos para o modelo de Ashkin-Teller. As simulações foram feitas com base no algoritmo de Wang-Landau, no qual foram realizadas algumas modificações, a saber: Atualizar a densidade de estados e o histograma a cada N passos de Monte Carlo; acumular as médias microcanônicas da magnetização somente após f_7 ; e, por último, finalizar a simulação em um dado f_{final} definido pela média canônica durante a simulação. Tais modificações foram facilmente implementadas e levaram a resultados precisos.

Os expoentes críticos ν , β , γ e a temperatura crítica T_c foram estimados para dois casos especiais do modelo. Para o caso ($J_2 = 1$, $J_4 = 0$) (modelo de Ising) obtivemos uma boa correspondência entre os valores simulados e os exatos, obtendo $\beta = 0.1243(13)$, $\gamma = 1.7496(69)$ e $T_c = 2.26930(38)$ com um erro relativo de 0.007%, 0.0002% e 0.00005% respectivamente. Para o caso ($J_2 = 1$, $J_4 = 1$) (modelo de Potts $q = 4$) os resultados ficaram um pouco acima dos valores conjecturados, como nas Ref. [4] e Ref. [26]: $\beta = 0.0952(16)$, $\gamma = 1.3026(58)$, $\nu = 0.7117(16)$ e $T_c = 3.64118(13)$ com um erro relativo de 14%, 12%, 6.8% e 0.005% respectivamente. Tais resultados estão em concordância com os valores teóricos, dando credibilidade aos valores obtidos para o caso ($J_2 = 1$, $J_4 = 0.5$): $\beta = 0.0997(13)$, $\gamma = 1.4233(41)$, $\nu = 0.7936(20)$ e $T_c = 3.00199(11)$. Para obter estes valores realizamos a média sobre dez conjuntos independentes.

No caso análogo ao modelo de Ising os resultados são excelentes, todos concordando com os valores exatos dentro de $\pm 1\sigma$. Já para $J_4 = 1$, que corresponde ao modelo de Potts $q = 4$, nossa estimativa para a temperatura crítica está praticamente no limite de $\pm 1\sigma$, já os expoentes críticos diferem significativamente dos valores conjecturados, porém concordam com outras estimativas obtidas na literatura.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] ASHKIN, J.; TELLER, E. Statistics of two-dimensional lattices with four components. **Phys. Rev.**, American Physical Society, v. 64, p. 178–184, Sep 1943. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.64.178>>. Citado 2 vezes nas páginas 15 e 27.
- [2] FAN, C. Symmetry properties of the Ashkin-Teller model and the eight-vertex model. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 6, p. 902–910, Aug 1972. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.6.902>>. Citado 3 vezes nas páginas 15, 27 e 29.
- [3] BAXTER, R. J. Exactly solved models in statistical mechanics. Academic Press, 1982. Citado 2 vezes nas páginas 15 e 27.
- [4] DASGUPTA, C. Renormalization-group study of the Ashkin-Teller-Potts model in two dimensions. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 15, p. 3460–3464, Apr 1977. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.15.3460>>. Citado 4 vezes nas páginas 15, 27, 42 e 43.
- [5] KADANOFF, L. P. Singularities near the bifurcation point of the Ashkin-Teller model. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 22, p. 1405–1408, Aug 1980. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.22.1405>>. Citado 2 vezes nas páginas 15 e 27.
- [6] FELÍCIO, J. R. D. de; KÖBERLE, R. Critical exponents of the Ashkin-Teller model. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 25, p. 511–514, Jan 1982. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.25.511>>. Citado 2 vezes nas páginas 15 e 27.
- [7] GIULIANI, A.; MASTROPIETRO, V. Anomalous critical exponents in the anisotropic Ashkin-Teller model. **Phys. Rev. Lett.**, American Physical Society, v. 93, p. 190603, Nov 2004. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.93.190603>>. Citado 2 vezes nas páginas 15 e 27.
- [8] SANTOS, J. P.; BARRETO, F. S. New effective field theory for the Ashkin-Teller model. **Physica A: Statistical Mechanics and its Applications**, v. 421, p. 316 – 329, 2015. ISSN 0378-4371. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0378437114010012>>. Citado 2 vezes nas páginas 15 e 27.
- [9] DITZIAN, R. V. et al. Phase diagram for the Ashkin-Teller model in three dimensions. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 22, p. 2542–2553, Sep 1980. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.22.2542>>. Citado 2 vezes nas páginas 15 e 27.

- [10] BADEHDAH, M. et al. Numerical study of the spin-1 Ashkin-Teller model. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 59, p. 6250–6255, Mar 1999. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.59.6250>>. Citado 2 vezes nas páginas 15 e 27.
- [11] WISEMAN, S.; DOMANY, E. Cluster method for the Ashkin-Teller model. **Phys. Rev. E**, American Physical Society, v. 48, p. 4080–4090, Nov 1993. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.48.4080>>. Citado 2 vezes nas páginas 15 e 27.
- [12] BAK, P. et al. Phase diagram of selenium adsorbed on the Ni(100) surface: A physical realization of the Ashkin-Teller model. **Phys. Rev. Lett.**, American Physical Society, v. 54, p. 1539–1542, Apr 1985. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.54.1539>>. Citado 2 vezes nas páginas 15 e 27.
- [13] OCHAB, J.; AKINCI, G.; UNERTL, W. Surface phases of Se deposited on Ni(001). **Surface Science**, v. 181, n. 3, p. 457 – 486, 1987. ISSN 0039-6028. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0039602887902007>>. Citado 2 vezes nas páginas 15 e 27.
- [14] BARTELT, N.; EINSTEIN, T.; WILLE, L. Phase diagram and critical properties of oxygen ordering in YBa₂Cu₃O_z. **Physica C: Superconductivity**, v. 162, p. 871 – 872, 1989. ISSN 0921-4534. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/092145348990498X>>. Citado 2 vezes nas páginas 15 e 27.
- [15] TAMASHIRO, M. N. et al. Phase transitions and spatially ordered counterion association in ionic-lipid membranes: A statistical model. **Phys. Rev. E**, American Physical Society, v. 84, p. 031909, Sep 2011. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.84.031909>>. Citado 2 vezes nas páginas 15 e 27.
- [16] AJI, V.; VARMA, C. M. Theory of the quantum critical fluctuations in cuprate superconductors. **Phys. Rev. Lett.**, American Physical Society, v. 99, p. 067003, Aug 2007. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.99.067003>>. Citado 2 vezes nas páginas 15 e 27.
- [17] GRØNSLETH, M. S. et al. Thermodynamic properties near the onset of loop-current order in high- T_c superconducting cuprates. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 79, p. 094506, Mar 2009. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.79.094506>>. Citado 2 vezes nas páginas 15 e 27.
- [18] HE, Y.; VARMA, C. M. Collective modes in the loop-current-ordered phase of cuprates. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 85, p. 155102, Apr 2012. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.85.155102>>. Citado 2 vezes nas páginas 15 e 27.
- [19] NEWMAN, M. E.; BARKEMA, G. T.; NEWMAN, M. **Monte Carlo methods in statistical physics**. [S.l.]: Clarendon Press Oxford, 1999. Citado 2 vezes nas páginas 15 e 27.
- [20] METROPOLIS, N. et al. Equation of state calculations by fast computing machines. **The Journal of Chemical Physics**, v. 21, n. 6, p. 1087–1092, 1953. Disponível em:

<<http://scitation.aip.org/content/aip/journal/jcp/21/6/10.1063/1.1699114>>. Citado na página 15.

[21] 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>>. Citado 2 vezes nas páginas 15 e 25.

[22] CAPARICA, A. d. A.; CUNHA-NETTO, A. Wang-Landau sampling: Improving accuracy. **Physical Review E**, APS, v. 85, n. 4, p. 046702, 2012. Citado na página 16.

[23] CAPARICA, A. A. Wang-Landau sampling: A criterion for halting the simulations. **Phys. Rev. E**, American Physical Society, v. 89, p. 043301, Apr 2014. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.89.043301>>. Citado 4 vezes nas páginas 16, 25, 41 e 42.

[24] FERREIRA, L. S.; CAPARICA, A. A. Computer simulations of a polymer with exact solution. **International Journal of Modern Physics C**, v. 23, n. 08, p. 1240012, 2012. Disponível em: <<http://www.worldscientific.com/doi/abs/10.1142/S0129183112400128>>. Citado na página 16.

[25] FERREIRA, L. S. et al. The rubber band revisited: Wang-Landau simulation. **Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment**, IOP Publishing, v. 2012, n. 10, p. P10028, 2012. Citado na página 16.

[26] CAPARICA, A.; LEÃO, S. A.; DASILVA, C. J. Static critical behavior of the s -states Potts model: High-resolution entropic study. **Physica A: Statistical Mechanics and its Applications**, v. 438, p. 447 – 453, 2015. ISSN 0378-4371. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0378437115005452>>. Citado 3 vezes nas páginas 16, 42 e 43.

[27] JORGE, L. N. et al. Critical behavior of the spin-1/2 Baxter-Wu model: Entropic sampling simulations. 2016, Disponível em: <<http://arxiv.org/abs/1510.04300v2>>. Citado na página 16.

[28] FISHER, M. E.; BARBER, M. N. Scaling theory for finite-size effects in the critical region. **Phys. Rev. Lett.**, American Physical Society, v. 28, p. 1516–1519, Jun 1972. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.28.1516>>. Citado na página 19.

[29] CAPARICA, A. A.; BUNKER, A.; LANDAU, D. P. Classical ferromagnet with double-exchange interaction: High-resolution Monte Carlo simulations. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 62, p. 9458–9462, Oct 2000. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.62.9458>>. Citado na página 20.

[30] LEE, J. New Monte Carlo algorithm: Entropic sampling. **Phys. Rev. Lett.**, American Physical Society, v. 71, p. 211–214, Jul 1993. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.71.211>>. Citado na página 22.