



Universidade Federal de Goiás  
**Instituto de Física**

RHAYSON ALMEIDA DE SOUSA

# Simulações Entrópicas do Modelo de Baxter-Wu Unidimensional

Goiânia  
2020



UNIVERSIDADE FEDERAL DE GOIÁS  
INSTITUTO DE FÍSICA

## TERMO DE CIÊNCIA E DE AUTORIZAÇÃO (TECA) PARA DISPONIBILIZAR VERSÕES ELETRÔNICAS DE TESES

### E DISSERTAÇÕES NA BIBLIOTECA DIGITAL DA UFG

Na qualidade de titular dos direitos de autor, autorizo a Universidade Federal de Goiás (UFG) a disponibilizar, gratuitamente, por meio da Biblioteca Digital de Teses e Dissertações (BDTD/UFG), regulamentada pela Resolução CEPEC nº 832/2007, sem ressarcimento dos direitos autorais, de acordo com a [Lei 9.610/98](#), o documento conforme permissões assinaladas abaixo, para fins de leitura, impressão e/ou download, a título de divulgação da produção científica brasileira, a partir desta data.

O conteúdo das Teses e Dissertações disponibilizado na BDTD/UFG é de responsabilidade exclusiva do autor. Ao encaminhar o produto final, o autor(a) e o(a) orientador(a) firmam o compromisso de que o trabalho não contém nenhuma violação de quaisquer direitos autorais ou outro direito de terceiros.

#### 1. Identificação do material bibliográfico

Dissertação       Tese

#### 2. Nome completo do autor

Rhayson Almeida de Sousa

#### 3. Título do trabalho

Simulações entrópicas do modelo de Baxter-Wu unidimensional

#### 4. Informações de acesso ao documento (este campo deve ser preenchido pelo orientador)

Concorda com a liberação total do documento  SIM       NÃO<sup>1</sup>

**[1]** Neste caso o documento será embargado por até um ano a partir da data de defesa. Após esse período, a possível disponibilização ocorrerá apenas mediante:

**a)** consulta ao(à) autor(a) e ao(à) orientador(a);

**b)** novo Termo de Ciência e de Autorização (TECA) assinado e inserido no arquivo da tese ou dissertação.

O documento não será disponibilizado durante o período de embargo.

Casos de embargo:

- Solicitação de registro de patente;
- Submissão de artigo em revista científica;
- Publicação como capítulo de livro;
- Publicação da dissertação/tese em livro.

**Obs. Este termo deverá ser assinado no SEI pelo orientador e pelo autor.**



Documento assinado eletronicamente por **Álvaro de Almeida Caparica**,  
**Usuário Externo**, em 14/07/2020, às 14:20, conforme horário oficial de



Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).

---



Documento assinado eletronicamente por **RHAYSON ALMEIDA DE SOUSA, Usuário Externo**, em 14/07/2020, às 16:33, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).

---



A autenticidade deste documento pode ser conferida no site [https://sei.ufg.br/sei/controlador\\_externo.php?acao=documento\\_conferir&id\\_orgao\\_acesso\\_externo=0](https://sei.ufg.br/sei/controlador_externo.php?acao=documento_conferir&id_orgao_acesso_externo=0), informando o código verificador **1433947** e o código CRC **74D21B7A**.

---

**Referência:** Processo nº 23070.025917/2020-41

SEI nº 1433947

RHAYSON ALMEIDA DE SOUSA

# Simulações Entrópicas do Modelo de Baxter-Wu Unidimensional

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

**Coorientador:** Prof. Dr. Lucas de Souza Ferreira

Goiânia  
2020

Ficha de identificação da obra elaborada pelo autor, através do Programa de Geração Automática do Sistema de Bibliotecas da UFG.

Sousa, Rhayson Almeida de  
Simulações entrópicas do modelo de Baxter-Wu unidimensional  
[manuscrito] / Rhayson Almeida de Sousa. - 2020.  
LV, 55 f.: il.

Orientador: Prof. Dr. Álvaro de Almeida Caparica; co-orientador Dr. Lucas de Souza Ferreira.

Dissertação (Mestrado) - Universidade Federal de Goiás, Instituto de Física (IF), Programa de Pós-Graduação em Física, Goiânia, 2020.  
Bibliografia.

Inclui gráfico, lista de figuras.

1. O modelo de Baxter-Wu. 2. Rede unidimensional. 3. Simulação entrópica. 4. Transição de fase. I. Caparica, Álvaro de Almeida, orient. II. Título.

CDU 531.21



UNIVERSIDADE FEDERAL DE GOIÁS

INSTITUTO DE FÍSICA

## ATA DE DEFESA DE DISSERTAÇÃO

Ata nº 185 da sessão de Defesa de Dissertação de Rhayson Almeida de Sousa, que confere o título de Mestre em Física, na área de concentração em Física.

Aos 10 dias do mês de junho de 2020, a partir das 15h00min, por meio de videoconferência, realizou-se a sessão pública de Defesa de Dissertação intitulada “Simulações entrópicas do modelo de Baxter-Wu unidimensional”. Os trabalhos foram instalados pelo Orientador, Professor Doutor Álvaro de Almeida Caparica (IF/UFG), com a participação dos demais membros da Banca Examinadora: Professor Doutor Minos Martins Adão Neto (ICE/UFAM), membro titular externo; e Professor Doutor Leandro Felix de Sousa Bufaiçal (IF/UFG), membro titular interno. Durante a arguição, os membros da banca não fizeram sugestão de alteração do título do trabalho. A Banca Examinadora reuniu-se em sessão secreta a fim de concluir o julgamento da Dissertação, tendo sido o candidato aprovado pelos seus membros. Proclamados os resultados pelo Professor Doutor Álvaro de Almeida Caparica, Presidente da Banca Examinadora, foram encerrados os trabalhos e, para constar, lavrou-se a presente ata que é assinada pelos Membros da Banca Examinadora, aos 10 dias do mês de junho de 2020.

TÍTULO SUGERIDO PELA BANCA



Documento assinado eletronicamente por **Leandro Felix De Sousa Bufaiçal, Professor do Magistério Superior**, em 10/06/2020, às 16:51, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).



Documento assinado eletronicamente por **Álvaro de Almeida Caparica, Usuário Externo**, em 10/06/2020, às 16:51, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).



Documento assinado eletronicamente por **Andris Figueiroa Bakuzis, Professor do Magistério Superior**, em 11/06/2020, às 17:31, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).



A autenticidade deste documento pode ser conferida no site [https://sei.ufg.br/sei/controlador\\_externo.php?acao=documento\\_conferir&id\\_orgao\\_acesso\\_externo=0](https://sei.ufg.br/sei/controlador_externo.php?acao=documento_conferir&id_orgao_acesso_externo=0), informando o código verificador **1366835** e o código CRC **2EAF2FC6**.

Referência: Processo nº 23070.025917/2020-41

SEI nº 1366835



Aos meus pais, Sandra e Isaías.

---

# AGRADECIMENTOS

---

Aos meus pais, Sandra Morais Almeida e Isaías Antônio de Sousa, pela dedicação, apoio e carinho.

Ao prof. Dr. Lucas de Souza Ferreira pela amizade, pelas discussões sobre o trabalho, pela paciência e dedicação comigo ao longo do Mestrado.

Ao prof. Dr. Álvaro de Almeida Caparica pela amizade, pela orientação e por aceitar compartilhar os seus conhecimentos.

Aos meus tios Ceuma Morais e Fernando Lima, por sempre estarem dispostos a me ajudar nos momentos de necessidade.

Aos meus familiares, pelo apoio e carinho.

Aos meus amigos conterrâneos Lucas Ribeiro, Gabriel Sá, Rebeca Cristina, Janaína Almeida e Evelen Dias e outros tantos pela amizade e apoio.

Aos meus amigos Ana Gabriela, Wilmar Júnior e Ricardo Mayckon pela amizade e conselhos que levarei por toda a vida.

À UFG e ao Programa de Pós-graduação pela oportunidade.

Às agências de fomento Fapeg e Capes, por financiarem minha pesquisa.

*“O período de maior ganho em conhecimento e experiência é o período mais difícil da vida de alguém.”*

– **Dalai Lama**

---

# RESUMO

---

O modelo de Baxter-Wu foi inicialmente proposto em 1972 por D. W. Wood e H. P. Griffiths e resolvido exatamente por R. Baxter e F. Wu. O modelo é definido em uma rede triangular bidimensional que pode ser decomposta em três sub-redes triangulares, de modo que qualquer face triangular contém um spin de cada sub-rede em cada vértice. O estado fundamental do modelo é quatro vezes degenerado, sendo formado pela fase ferromagnética positiva e três fases ferrimagnéticas. O modelo também possui uma proposta para uma rede tridimensional feita por L. N. Jorge, L. S. Ferreira e A. A. Caparica inspirado na rede bidimensional, sendo o estado fundamental apenas formado pela fase ferromagnética, e possui uma transição ordem-desordem descontínua. O modelo de Baxter-Wu de rede unidimensional foi proposto por M. F. Calvacante e J. A. Plascak, no estudo do modelo de Baxter-Wu em diferentes dimensionalidades de rede através da aproximação de campo médio, onde apresentou uma transição de ordem-desordem descontínua. Neste trabalho, estudamos o modelo de Baxter-Wu unidimensional usando a contagem de estados e simulações entrópicas. Calculamos as propriedades termodinâmicas para diferentes valores de campo e temperatura e obtivemos as configurações para o estado fundamental de três diferentes regiões que estão separadas em  $H = 0$  e  $H = -3$ . Somente nas interfaces encontramos efeito de tamanho finito e um estudo de tamanho finito foi realizado para  $H = 0$ , obtendo a temperatura crítica e os expoentes críticos.

**Palavras - chave:** O modelo de Baxter-Wu, rede unidimensional, simulação entrópica, transição de fase.

---

# ABSTRACT

---

The Baxter-Wu model was initially proposed in 1972 by D. W. Wood and H. P. Griffiths and solved exactly by R. Baxter and F. Wu. The model is defined in a two-dimensional triangular lattice that can be decomposed into three triangular sub-lattice, so that any triangular face contains a spin from each sub-lattice at each vertex. The ground state of the model is four times degenerate, being formed by the positive ferromagnetic phase and three ferrimagnetic phases. The model also has a proposal for a three-dimensional lattice made by L. N. Jorge, L. S. Ferreira and A. A. Caparica inspired by the two-dimensional lattice, the ground state being only formed by the ferromagnetic phase and has a discontinuous order-disorder transition. The Baxter-Wu model of one-dimensional lattice was proposed by M. F. Calvacante and J. A. Plascak in the study of the Baxter-Wu model in different dimensionalities of lattices through the mean-field approach, where it presented a discontinuous order-disorder transition. In this work we studied the one-dimensional Baxter-Wu model using state counting and entropic simulations. We calculated the thermodynamic properties for different field and temperature values and obtained the ground state settings for three different regions that are separated at  $H = 0$  and  $H = -3$ . Only on the interfaces we found out a finite size effect and a finite size study was performed for  $H = 0$ , obtaining the critical temperature and the critical exponents.

**Key - words:** The Baxter-Wu model, one-dimensional lattice, entropic simulation, phase transition.

---

## LISTA DE FIGURAS

---

- Figura 2.1:** Do lado esquerdo: O diagrama de fases de um sistema magnético, no qual  $H$  é o campo magnético externo e  $T$  a temperatura. Do lado direito: O parâmetro de ordem  $m$ , escolhido como a magnetização espontânea por spin do sistema, como função da temperatura  $T$  em campo magnético externo  $H = 0$ .  $T_c$  é a temperatura crítica. . . . . 24
- Figura 4.1:** Rede triangular cristalina do modelo de Baxter-Wu bidimensional. 34
- Figura 4.2:** Os estados fundamentais do modelo de Baxter-Wu bidimensional: O estado ferromagnético e os três estados ferrimagnéticos. . . . . 35
- Figura 4.3:** Rede tridimensional do modelo de Baxter-Wu. Reproduzido com a permissão do autor [1]. . . . . 36
- Figura 4.4:** Rede unidimensional do modelo de Baxter-Wu. Os índices  $A$ ,  $B$  e  $C$  representam as sub-redes do sistema. . . . . 37
- Figura 5.1:** Comportamento da magnetização como função da temperatura e do campo externo para  $L = 81$ . A figura superior apresenta o comportamento no plano tridimensional, enquanto a figura inferior apresenta no plano bidimensional, onde as cores estão relacionada ao valor da grandeza. Percebemos três diferentes regiões que nomeamos de ferromagnética ( $H > 0$ ), ferrimagnética ( $-3 < H < 0$ ), e ferromagnética negativa ( $H < -3$ ). . . . . 40
- Figura 5.2:** Comportamento da energia como função da temperatura e do campo externo para  $L = 81$ . A figura superior apresenta o comportamento no plano tridimensional, enquanto a figura inferior apresenta no plano bidimensional, onde as cores estão relacionadas ao valor da grandeza. Percebemos que na região de  $-3 < H < 5$  as configurações ordenadas apresentam a mesma energia e em torno de  $H = -3$  ocorre uma mudança do valor da energia. . . . . 41

<b>Figura 5.3:</b>	Comportamento da susceptibilidade como função da temperatura e do campo externo para $L=81$ . A figura superior apresenta o comportamento no plano tridimensional, enquanto a figura inferior apresenta no plano bidimensional, onde as cores estão relacionadas ao valor da grandeza. Observa-se que em torno de $H = 0$ e $H = -3$ a susceptibilidade magnética diverge. . . . .	42
<b>Figura 5.4:</b>	Comportamento do calor específico como função da temperatura e do campo externo para $L = 81$ . A figura superior apresenta o comportamento no plano tridimensional, enquanto a figura inferior apresenta no plano bidimensional, onde as cores estão relacionadas ao valor da grandeza. Observa-se que em torno de $H = -3$ o calor específico diverge. . . . .	43
<b>Figura 5.5:</b>	Comportamento da energia (a esquerda) e do calor específico (a direita) do sistema em $H = 0$ para os tamanhos de rede $L = 60, 72, 81, 243$ . . . . .	44
<b>Figura 5.6:</b>	Comportamento da magnetização (a esquerda) e da susceptibilidade magnética (a direita) do sistema em $H = 0$ para os tamanhos de rede $L = 60, 72, 81$ . . . . .	45
<b>Figura 5.7:</b>	As densidades de estados para o modelo de Baxter-Wu unidimensional para o tamanho de rede $L = 6$ . As densidades representadas por $g(E, M)$ usam a magnetização como a soma dos spins, enquanto que $g(E, M')$ usam a soma dos módulos da magnetização das sub-redes. As densidades de estados para as cinco primeiras configurações estão representadas acima e a configuração invertendo todos os spins em baixo. Para a sexta configuração, em cima estão as configurações em que a magnetização é nula independente do parâmetro de ordem e em baixo as que dependem da escolha. . . . .	47
<b>Figura 5.8:</b>	Parâmetro de ordem como uma função da temperatura. Observa-se que o comportamento do parâmetro de ordem exibe um comportamento de escala de tamanho finito. As linhas representam o comportamento analítico para as redes e os pontos os resultados simulados. Os erros são menores que os símbolos. . . . .	48
<b>Figura 5.9:</b>	Comportamento do parâmetro de ordem (a esquerda) e da susceptibilidade magnética (a direita) como função da temperatura para os tamanhos de rede $L = 243, 405, 648$ obtidos pelas simulações entrópicas. Os erros são menores que os símbolos. . . . .	49

<b>Figura 5.10:</b>	Dependência de $V_j$ com o logaritmo do tamanho de rede na temperatura crítica, na qual as inclinações fornecem $1/\nu$ (a esquerda). Dependência de tamanho das localizações dos extremos em diferentes quantidades termodinâmicas (a direita). As barras de erro são menores que os símbolos. . . . .	49
<b>Figura 5.11:</b>	Dependência do logaritmo da susceptibilidade magnética (a esquerda) e da magnetização (a direita) com o logaritmo do tamanho de rede na temperatura crítica. . . . .	50

---

# SUMÁRIO

---

<b>Capítulo 1: Introdução</b>	<b>17</b>
<b>Capítulo 2: Revisão da Mecânica Estatística</b>	<b>19</b>
2.1 Mecânica Estatística no Equilíbrio	19
2.2 O limite termodinâmico	22
2.3 Transições de Fase e Fênomenos Críticos	23
2.3.1 Os Expoentes Críticos	24
2.4 Teoria de Escala de Tamanho Finito	26
<b>Capítulo 3: Simulações Entrópicas</b>	<b>30</b>
3.1 Método Monte Carlo	30
3.1.1 Amostragem de Wang-Landau	30
3.1.2 Densidade de estados conjuntas	32
<b>Capítulo 4: O Modelo de Baxter-Wu</b>	<b>34</b>
4.1 Rede bidimensional	34
4.2 Rede tridimensional	36
4.3 Rede unidimensional	37
<b>Capítulo 5: Resultados e Discussões</b>	<b>38</b>
5.1 Campo magnético externo $H$	38
5.2 Campo magnético externo $H = 0$	46
<b>Capítulo 6: Conclusões e Perspectivas Futuras</b>	<b>51</b>

---

# INTRODUÇÃO

---

Em 1972, D. W. Wood e H. P. Griffiths propuseram para o modelo de Ising bidimensional uma rede triangular com o uso de interações triplas entre spins-1/2 [2]. A solução exata foi obtida por R. Baxter e F. Wu [3, 4, 5]. O modelo possui um estado fundamental quatro vezes degenerado, sendo um estado ferromagnético e outros três estados ferrimagnéticos. A expansão para uma rede tridimensional foi proposta por L. N. Jorge, L. S. Ferreira e A. A. Caparica, onde realizaram um estudo das propriedades termodinâmicas do sistema através de simulações de Monte Carlo pela amostragem de Wang-Landau e estimaram a temperatura de transição do sistema [6]. Já o modelo de rede unidimensional foi proposto por M. F. Calvacante e J. A. Plascak em seus estudos da teoria do campo médio aplicado a diferentes dimensionalidades desse modelo [7].

O nome Monte Carlo é aplicado para uma classe de métodos matemáticos adotado por Ulam e Metropolis e seus colaboradores que trabalharam no desenvolvimento de armas nucleares em Los Alamos na década de 1940 [8]. As simulações de Monte Carlo utilizam-se da geração de números aleatórios para realizar uma caminhada aleatória sobre os estados do sistema. O algoritmo de amostragem de importância de Metropolis foi a técnica mais comum em simulações de Monte Carlo, na qual as configurações são geradas de um estado anterior usando uma probabilidade de transição que depende da diferença das energias dos estados finais e iniciais [9]. Em outra linha, o algoritmo desenvolvido por F. Wang e D. P. Landau estima a densidade de estados, permitindo calcular médias canônicas das propriedades termodinâmicas para qualquer temperatura [10, 11].

O algoritmo de Wang-Landau realiza um passeio aleatório no espaço de energia através da mudança de estado dos spins, em que a energia associada com cada configuração é aceita com uma probabilidade recíproca à densidade de estados. Durante o passeio aleatório, um histograma é acumulado no espaço de energia que é usado para controlar a frequência que os níveis de energia são visitados. Então, a atual densidade de estados é modificada por um fator de modificação e com a nova densidade de estados um novo passeio aleatório é realizado. Cada passeio aleatório produz um histograma nivelado para a distribuição de energia. Uma das vantagens deste algoritmo é que a densidade de estados

---

não depende da temperatura e, portanto, com a função de partição podemos calcular todas as quantidades termodinâmicas de interesse do sistema, através da média canônica [11]. Com o objetivo de obter mais informações, acerca de um sistema durante as simulações, como por exemplo o efeito da magnetização, podemos realizar um passeio aleatório tanto no espaço de energia quanto no parâmetro de ordem, sendo também necessário para sistemas com ordens mais complexas. [12].

O objetivo deste trabalho consiste em estudar o modelo de Baxter-Wu de rede unidimensional através de duas maneiras. Inicialmente, com o uso de simulações entrópicas, estudamos o comportamento das quantidades termodinâmicas como função da temperatura e do campo magnético externo, onde observamos duas regiões de interface entre as configurações de estados ordenados. Em um segundo momento, estudamos o modelo com ausência de campo externo através de duas abordagens. Primeiramente, estudamos o comportamento das quantidades termodinâmicas usando a função de partição dada pela contagem das configurações, onde usamos o parâmetro de ordem como a soma dos módulos da magnetização das sub-redes, pois esta permite diferenciar as configurações ordenadas da configuração desordenada do sistema. Em seguida, realizamos simulações entrópicas para redes de tamanhos maiores, onde calculamos a temperatura crítica que apresenta o valor  $T_c = 0.20361(22)$  e obtivemos os expoentes críticos  $\nu = 2.480651(75)$ ,  $\gamma = 2.974(11)$  e  $\beta = 0.0215(16)$ , sendo que esses expoentes não obedecem uma lei de escala e não se encaixam em nenhuma classe de universalidade.

Esta dissertação está organizada da seguinte forma: No capítulo 2, apresentamos uma breve revisão da mecânica estatística no equilíbrio, além da definição de transições de fase, fenômenos críticos e dos efeitos de escala de tamanho finito. No capítulo 3, abordamos o método Monte Carlo e da técnica de amostragem de Wang-Landau. No capítulo 4, fazemos uma breve revisão histórica do modelo de Baxter-Wu e expomos os objetivos do nosso trabalho. No capítulo 5, apresentamos os nossos resultados. No capítulo 6, apresentamos as conclusões e as perspectivas de continuidade.

---

# REVISÃO DA MECÂNICA ESTATÍSTICA

---

Neste capítulo, faremos uma breve revisão de algumas características básicas da termodinâmica e da mecânica estatística que serão usados na produção e análise dos nossos resultados. Definiremos o limite termodinâmico, as transições de fase, os fenômenos críticos e a teoria de escala de tamanho finito.

## 2.1 Mecânica Estatística no Equilíbrio

O objetivo da mecânica estatística é obter todas as propriedades de equilíbrio de um sistema molecular macroscópico a partir das leis das dinâmicas moleculares. Portanto, seu objetivo não é apenas derivar as leis gerais da termodinâmica, mas também as funções específicas de um dado sistema. A mecânica estatística, contudo, não descreve como um sistema se aproxima do equilíbrio e nem determina se o sistema já pode ser encontrado no equilíbrio, apenas afirma qual é a situação de equilíbrio para um determinado sistema [13].

Definindo um conjunto de pesos  $\omega_i(\tau)$  que representam a probabilidade do sistema estar no estado  $i$  no instante  $\tau$ . A evolução temporal de  $\omega_i(\tau)$  é representada por:

$$\frac{d\omega_i(\tau)}{d\tau} = \sum_j [\omega_j(\tau)P(j \rightarrow i) - \omega_i(\tau)P(i \rightarrow j)], \quad (2.1)$$

em que a Equação (2.1) governa o tempo de desenvolvimento da quantidade  $\omega_i(\tau)$ . O primeiro termo do lado direito representa a taxa de transição do estado  $j$  para o estado  $i$ , enquanto o segundo termo do lado direito representa a taxa de transição do estado  $i$  para o estado  $j$ . A soma das probabilidades deve ser unitária para todos os tempos  $\tau$ :

$$\sum_i \omega_i(\tau) = 1, \quad (2.2)$$

dado que o sistema deve sempre estar em algum estado. Sendo  $Q$  alguma quantidade, tomando o valor de  $Q_i$  em algum estado  $i$ , podemos definir o valor esperado para esta

quantidade em algum instante para o sistema como:

$$\langle Q \rangle = \sum_{\tau} Q_i \omega_i(\tau). \quad (2.3)$$

Quando o sistema atinge um estado em que os dois termos do lado direito da Equação (2.1) cancelam um ao outro para todos os estados  $i$ , então a variação temporal das probabilidades será nula e os pesos serão constantes para o resto do tempo:

$$\omega_i P(i \rightarrow j) = \omega_j P(j \rightarrow i), \quad (2.4)$$

que corresponde ao estado de equilíbrio do sistema. As taxas de transições  $P(i \rightarrow j)$  adquirem valores que surgem da natureza térmica da interação do sistema e do reservatório térmico. *A priori*, os valores de equilíbrio dos pesos são conhecidos e são denominados de *probabilidades de ocupação de equilíbrio*:

$$P_i = \lim_{\tau \rightarrow \infty} \omega_i(\tau). \quad (2.5)$$

Em 1902, Gibbs mostrou que para um sistema em equilíbrio térmico com um reservatório térmico, a probabilidade  $P_i$  do sistema ser encontrado no microestado  $i$  é proporcional a  $\exp(-\beta E_i)$ , conhecido como *fator de Boltzmann*, sendo  $\beta = 1/k_B T$ , em que  $k_B$  é a constante de Boltzmann,  $T$  é a temperatura do sistema e  $E_i$  é a energia do microestado  $i$  [8]. Desde que o sistema deve sempre estar em algum estado, a soma sobre todas as probabilidades  $P_i$  deve ser um, e a probabilidade normalizada é, portanto,

$$P_i = \frac{\exp(-\beta E_i)}{Z}, \quad (2.6)$$

onde a Equação (2.6) é denominada de *probabilidade de distribuição de Boltzmann*. A constante de normalização  $Z$ , também denominada de *função de partição*, contém todas as informações essenciais sobre o sistema em consideração. A forma mais geral para um sistema clássico é dada por

$$Z = \sum_i \exp(-\beta E_i), \quad (2.7)$$

onde a soma é sobre todos os possíveis estados do sistema e, portanto, depende do tamanho do sistema e do número de graus de liberdade para a partícula. Contudo, há poucos exemplos em que é possível extrair resultados exatos para sistemas muito grandes de partículas interagentes, sendo que em geral a função de partição não pode ser calculada exatamente [14].

A conexão entre a termodinâmica e a mecânica estatística ocorre através da *energia livre de Helmholtz* do sistema:

$$F = -k_B T \ln Z, \quad (2.8)$$

as outras quantidades termodinâmicas mais facilmente observadas são todas obtidas pela diferenciação apropriada da Equação (2.8). Por exemplo, a energia interna é definida como a média da energia de um sistema em equilíbrio térmico:

$$U \equiv \langle E \rangle = \sum_i P_i E_i = \frac{\sum_i E_i \exp(-\beta E_i)}{\sum_i \exp(-\beta E_i)} = -\frac{1}{Z} \left( \frac{\partial Z}{\partial \beta} \right)_{N,V} = - \left( \frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} \right)_{N,V}. \quad (2.9)$$

Para estudar as flutuações da energia definimos o desvio quadrático médio como:

$$(\delta U)^2 = \langle (E - \langle E \rangle)^2 \rangle = \langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2, \quad (2.10)$$

em que a média do quadrado da energia pode ser obtida diferenciando novamente a função de partição:

$$\langle E^2 \rangle = \frac{\sum_i E_i^2 \exp(-\beta E_i)}{\sum_i \exp(-\beta E_i)} = \frac{1}{Z} \left( \frac{\partial^2 Z}{\partial \beta^2} \right)_{N,V}, \quad (2.11)$$

substituindo as equações (2.9) e (2.11) na Equação (2.10) temos:

$$(\delta U)^2 = \langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2 = \frac{1}{Z} \left( \frac{\partial^2 Z}{\partial \beta^2} \right)_{N,V} - \left[ \frac{1}{Z} \left( \frac{\partial Z}{\partial \beta} \right)_{N,V} \right]^2 = \left( \frac{\partial^2 \ln Z}{\partial \beta^2} \right)_{N,V}. \quad (2.12)$$

O calor específico  $c_V$  pode ser definido como a taxa de variação da energia  $U$  em relação à temperatura  $T$  por sítio:

$$c_V = \frac{1}{N} \left( \frac{\partial U}{\partial T} \right)_{N,V} = \frac{k_B \beta^2}{N} \left( \frac{\partial^2 \ln Z}{\partial \beta^2} \right)_{N,V}, \quad (2.13)$$

em que  $N$  é o número de partículas do sistema. Logo, tomando a Equação (2.13) e substituindo na Equação (2.12) temos:

$$(\delta U)^2 = \langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2 = \frac{N c_V}{k_B \beta^2}, \quad (2.14)$$

consequentemente, a flutuação da energia do sistema será

$$\delta U = (N k_B T^2 c_V)^{1/2}, \quad (2.15)$$

que é um resultado completamente geral e não depende de nenhuma propriedade específica

do sistema a ser considerada. Percebe-se que desde que o calor específico cresça linearmente com o tamanho do sistema, as flutuações de energia fracionárias cai com a raiz quadrada do tamanho do sistema [15]:

$$\frac{\delta U}{U} \sim \frac{1}{\sqrt{N}}, \quad (2.16)$$

portanto, as flutuações tornam-se insignificantes no limite no qual o tamanho do sistema vai para o infinito e, por causa disso, este limite é denominado de *limite termodinâmico*. A exceção para esse comportamento surge quando o calor específico do sistema diverge, então as flutuações não desaparecem à medida que o sistema se torna maior, mas está presente em todas as escalas, sendo um indicativo de um tipo de transição de fase [15].

Para um sistema magnético formado, por exemplo, por um conjunto de dipolos, a magnetização sofre uma mudança em resposta a um campo magnético externo  $H$ . Agora, a energia livre de Helmholtz será uma função do campo externo  $H$  e da temperatura  $T$ . Portanto, a magnetização é definida através da Equação (2.8) como:

$$M = - \left[ \frac{\partial F(H, T)}{\partial H} \right]_T, \quad (2.17)$$

em que as flutuações em torno do valor médio da magnetização está relacionada com a susceptibilidade por dipolo do sistema:

$$\chi(H, T) = \frac{1}{N} \lim_{H \rightarrow 0} \left( \frac{\partial M}{\partial H} \right)_T = \frac{\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2}{Nk_B T}. \quad (2.18)$$

## 2.2 O limite termodinâmico

A energia livre é extensiva para um sistema grande. Portanto, espera-se que para um sistema finito possamos escrever:

$$F_\Omega = V(\Omega)f_b + S(\Omega)f_s + O(L^{d-2}) \quad (2.19)$$

em que  $\Omega$  é uma região de amostra do sistema,  $L$  é a dimensão linear,  $f_b$  é a energia livre por unidade de volume e  $f_s$  é a energia livre por unidade de área que são definidos como:

$$f_b[K] \equiv \lim_{V(\Omega) \rightarrow \infty} \frac{F_\Omega[K]}{V(\Omega)}, \quad (2.20)$$

$$f_s[K] \equiv \lim_{S(\Omega) \rightarrow \infty} \frac{F_\Omega[K] - V(\Omega)f_b[K]}{S(\Omega)}, \quad (2.21)$$

se os limites existem e são independentes de  $\Omega$ .  $[K]$  representa o conjunto de constantes de acoplamento do sistema. Para um sistema definido sobre uma rede, com locais de rede  $N(\Omega)$ , a energia livre por local é dada por:

$$f_b[K] \equiv \lim_{N(\Omega) \rightarrow \infty} \frac{F(\Omega)}{N(\Omega)}, \quad (2.22)$$

se o limite existe e é independente de  $\Omega$ . As equações (2.20), (2.21) e (2.22) são conhecidas como *limite termodinâmico*.

## 2.3 Transições de Fase e Fênomenos Críticos

Em 1933, Ehrenfest propôs uma classificação para as transições de fase para sistemas em equilíbrio térmico que sofrem uma transição do tipo ordem-desordem [16]. Podendo ocorrer dois tipos de transição:

- **Primeira ordem ou descontínua:** Quando a primeira derivada da energia livre é descontínua na temperatura de transição.
- **Segunda ordem ou contínua:** Quando a primeira derivada da energia livre é contínua na temperatura de transição. Enquanto que a segunda derivada da energia livre apresenta singularidades em alguns valores de temperatura e campo.

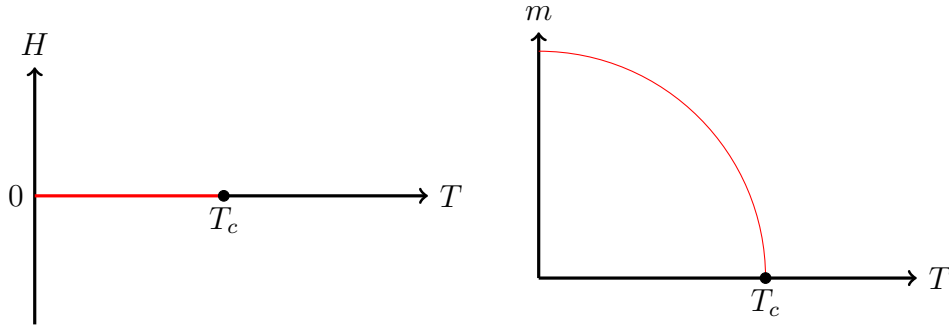
Para exemplificar iremos utilizar um sistema magnético que consiste de uma rede cristalina com spins localizados nos vértices. O Hamiltoniano deste sistema é dado por:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j - H \sum_{i=1}^N \sigma_i, \quad (2.23)$$

em que  $\sigma$  são os spins localizados nos vértices que podem apontar ou para cima ( $\sigma = 1$ ) ou para baixo ( $\sigma = -1$ ),  $H$  é o campo magnético externo e  $J$  é a constante de acoplamento dos spins. Se  $J > 0$ , os pares de spin apontam na mesma direção, isto é, fase ferromagnética. Se  $J < 0$ , os pares de spins apontam em direções opostas, isto é, fase antiferromagnética.

Quando o sistema está em equilíbrio, a rede cristalina e os spins terão os graus de liberdade descritos por uma única temperatura  $T$ . Com  $J > 0$  e  $H = 0$  em altas temperaturas ( $T \gg J/k_B$ ), o sistema se encontra na fase paramagnética, ou seja, os spins apontam em ambas as direções com igual frequência, portanto nenhuma direção é privilegiada e, conseqüentemente, o momento magnético total será zero. Contudo, em baixas temperaturas ( $T \ll J/k_B$ ) os spins tendem a se alinhar ao longo de uma direção particular no espaço, mesmo na ausência de campo externo, ou seja, existe uma magnetização espontânea e, portanto, o sistema se encontra na fase ferromagnética.

A característica distintiva da maioria das transições de fase é o *parâmetro de ordem*, ou seja, de alguma propriedade do sistema que é diferente de zero na fase ordenada, mas zero na fase desordenada. O parâmetro de ordem é definido diferentemente em diferentes tipos de sistemas físicos [14]. Para o sistema magnético em questão, o parâmetro de ordem é definido como a magnetização por spin da rede cristalina:



**Figura 2.1:** Do lado esquerdo: O diagrama de fases de um sistema magnético, no qual  $H$  é o campo magnético externo e  $T$  a temperatura. Do lado direito: O parâmetro de ordem  $m$ , escolhido como a magnetização espontânea por spin do sistema, como função da temperatura  $T$  em campo magnético externo  $H = 0$ .  $T_c$  é a temperatura crítica.

$$m = \frac{\langle M \rangle}{N} = \frac{1}{N} \left\langle \sum_{i=1}^N \sigma_i \right\rangle. \quad (2.24)$$

O lado esquerdo da Figura 2.1 representa o diagrama de fases do sistema, enquanto o lado direito ilustra o comportamento do parâmetro de ordem em função da temperatura. Observa-se que o parâmetro de ordem diminui à medida que a temperatura aumenta e torna-se nulo depois de uma temperatura específica. Portanto, ocorre uma *transição de fase contínua* entre as fases ferromagnética ( $m \neq 0$ ) e paramagnética ( $m = 0$ ), em  $H = 0$ , numa temperatura particular denominada de *temperatura crítica* ( $T = T_c$ ).

### 2.3.1 Os Expoentes Críticos

Um problema básico na teoria de transições de fase é estudar o comportamento de um dado sistema na vizinhança de seu ponto crítico. Sabe-se que seu comportamento é marcado pelo fato de que diversas quantidades físicas do sistema possuem singularidades no ponto crítico. É habitual expressar as singularidades no ponto crítico em termos de leis de potências caracterizadas por um conjunto de expoentes críticos que determinam a natureza qualitativa do comportamento crítico de um sistema[17]. Inicialmente, iremos definir um parâmetro adimensional  $t$  chamado de *temperatura reduzida* que mede a distância que o sistema se encontra da temperatura crítica:

$$t = \frac{T - T_c}{T_c}, \quad (2.25)$$

No limite  $t \rightarrow 0$  (ou seja,  $T \rightarrow T_c$ ) qualquer quantidade termodinâmica pode ser decomposta numa parte regular, que permanece finita podendo ser contínua ou descontínua, mais uma parte singular que pode ser divergente ou ter derivadas divergentes. Supõe-se que a parte singular seja proporcional a alguma potência de  $t$ , geralmente fracionária. Os quatro primeiros expoentes críticos são  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$  e  $\delta$  e são definidos como:

Capacidade calorífica:

$$C \sim |t|^{-\alpha}, \quad (2.26)$$

Parâmetro de ordem:

$$M \sim |t|^\beta. \quad (2.27)$$

Susceptibilidade:

$$\chi \sim |t|^{-\gamma}, \quad (2.28)$$

Equação de estado ( $t = 0$ )

$$M \sim H^{1/\delta}, \quad (2.29)$$

As três primeiras relações se referem a uma transição de fase, logo compreende-se que  $H = 0$ . A última, por outro lado, especificamente refere-se ao caso  $H \neq 0$ . Deve-se manter em mente que estes comportamentos se referem à parte singular, ou seja, se  $\alpha = 0$ , por exemplo, a capacidade calorífica não possuirá uma parte singular, contudo ainda poderá possuir uma descontinuidade finita em  $t = 0$ .

As definições acima supõem implicitamente que as singularidades são do mesmo tipo quando nos aproximamos abaixo ou acima da temperatura crítica, exceto na Equação (2.29), pois é apenas útil abaixo da temperatura crítica, desde que  $M$  seja nula para  $t > 0$ . Os outros dois expoentes críticos são  $\eta$  e  $\nu$  e dizem respeito à função de correlação, que pode assumir a forma Ornstein-Zernike [13]:

$$\Gamma(r) \xrightarrow[t \rightarrow 0]{} r^{-p} e^{-r/\xi}, \quad (2.30)$$

então, serão definidos como:

Comprimento de correlação:

$$\xi \sim |t|^{-\nu}, \quad (2.31)$$

Decaimento da lei de potência em  $t = 0$ :

$$p = d - 2 + \eta. \quad (2.32)$$

O significado dos expoentes críticos reside em sua universalidade. Isto significa que os valores dos expoentes críticos se dividem em um número de classes de universalidade e todos os modelos que se encaixam numa dessas classes de universalidade possuem os mesmos valores para esses expoentes.

Os expoentes críticos  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$ ,  $\delta$ ,  $\eta$  e  $\nu$  não são todos independentes. Podemos escolher apenas dois como independentes e obter os demais através das relações de superescala [13]:

Fisher:

$$\gamma = \nu(2 - \eta), \quad (2.33)$$

Rushbrook:

$$\alpha + 2\beta + \gamma = 2, \quad (2.34)$$

Widom:

$$\gamma = \beta(\delta - 1), \quad (2.35)$$

Josephson:

$$d\nu = 2 - \alpha, \quad (2.36)$$

em que  $d$  é a dimensionalidade do sistema.

## 2.4 Teoria de Escala de Tamanho Finito

O método de escala de tamanho finito (*finite-size scaling* em inglês) é uma forma de extrair valores para os expoentes críticos observando como as quantidades termodinâmicas variam com o tamanho  $L$  do sistema. Para exemplificar este método podemos utilizar o caso do expoente crítico da susceptibilidade. Partindo das equações (2.28) e (2.31) podemos expressar a susceptibilidade em termos da função de correlação na vizinhança da transição por:

$$\chi \sim \xi^{\gamma/\nu}. \quad (2.37)$$

Em um sistema finito, o comprimento de correlação é limitado ao tamanho do sistema e, conseqüentemente, a susceptibilidade também será limitada. Em sistemas finitos, a susceptibilidade nunca realmente diverge. Se representarmos  $\xi$  pelo valor que o comprimento de correlação apresenta em um sistema infinito em temperatura  $t$ , então a limitação surge quando  $\xi > L$ . Enquanto,  $\xi \ll L$ , o valor  $\chi$  da susceptibilidade deve corresponder ao mesmo que para um sistema infinito:

$$\chi = \xi^{\gamma/\nu} \chi_0(L/\xi), \quad (2.38)$$

em que  $\chi_0$  é uma função adimensional de uma única variável  $x = L/\xi$  que possui as seguintes propriedades:

$$\chi_0 = \text{constante}, \text{ para } x \gg 1, \quad (2.39)$$

e

$$\chi_0 \sim x^{\gamma/\nu} \text{ com } x \rightarrow 0, \quad (2.40)$$

Definindo a função adimensional  $\tilde{\chi}$ :

$$\tilde{\chi}(x) = x^{-\gamma/\nu} \chi_0(x^\nu) \Rightarrow \chi_0(x^\nu) = \tilde{\chi}(x) x^{\gamma/\nu}, \quad (2.41)$$

Substituindo a Equação (2.41) na Equação (2.38) temos:

$$\chi = \xi^{\gamma/\nu} \tilde{\chi}(x) x^{\gamma/\nu}, \quad (2.42)$$

Consequentemente,

$$\chi = L^{\gamma/\nu} \tilde{\chi}(L^{1/\nu} t), \quad (2.43)$$

em que  $x = L^{1/\nu} t$ . A Equação (2.43) reescreve o comportamento da susceptibilidade magnética à medida que a susceptibilidade varia com o tamanho  $L$  do sistema próximo à temperatura crítica. A função  $\tilde{\chi}(L^{1/\nu} t)$  é denominada de *função de escala* e é constante na temperatura crítica.

O método pode ser facilmente estendido para outras quantidades, por exemplo, para o calor específico e para o parâmetro de ordem [18, 19, 20]:

$$c = L^{\alpha/\nu} \tilde{c}(L^{1/\nu} t), \quad (2.44)$$

$$m = L^{-\beta/\nu} \tilde{m}(L^{1/\nu} t), \quad (2.45)$$

entretanto, somente para tamanhos de rede suficientemente grandes e em temperaturas muito próximas da temperatura crítica.

Derivadas e logaritmo das derivadas da magnetização são quantidades importantes para estudar fenômenos críticos. Algumas relações são úteis para determinar a temperatura crítica e o expoente crítico estático  $\nu$  [21, 22, 23]:

$$V_1 \equiv 4 [m^3] - 3 [m^4], \quad (2.46)$$

$$V_2 \equiv 2 [m^2] - [m^4], \quad (2.47)$$

$$V_3 \equiv 3 [m^2] - 2 [m^3], \quad (2.48)$$

$$V_4 \equiv (4 [m] - [m^4]) / 3, \quad (2.49)$$

$$V_5 \equiv (3 [m] - [m^3]) / 2, \quad (2.50)$$

$$V_6 \equiv 2 [m] - [m^2]. \quad (2.51)$$

Em que:

$$[m^n] \equiv \ln \frac{\partial \langle m^n \rangle}{\partial T}. \quad (2.52)$$

A partir da Equação (2.45) é fácil mostrar que:

$$V_i \approx (1/\nu) \ln L + \mathcal{V}_i(tL^{1/\nu}), \quad (2.53)$$

para  $i = 1, 2, \dots, 6$ . Na temperatura crítica  $T_c(t = 0)$  os  $\mathcal{V}_i$  devem ser constantes independentes do tamanho do sistema. Desta forma, o expoente crítico  $\nu$  é determinado pelos picos destas funções. Com a estimativa para o expoente crítico  $\nu$  é possível determinar a temperatura crítica localizando os máximos nas seguintes quantidades [21, 22]:

$$\chi = L \frac{\langle (m - \langle m \rangle)^2 \rangle}{T}, \quad (2.54)$$

$$D_{K_2} \equiv \frac{\partial \langle (m - \langle m \rangle)^2 \rangle}{\partial T}, \quad (2.55)$$

$$D_{K_3} \equiv \frac{\partial \langle (m - \langle m \rangle)^3 \rangle}{\partial T}, \quad (2.56)$$

$$D_{K_4} \equiv \frac{\partial (\langle (m - \langle m \rangle)^4 \rangle - 3 \langle (m - \langle m \rangle)^2 \rangle^2)}{\partial T}, \quad (2.57)$$

segundo as equações (2.43) e (2.45) as localizações dos extremos destas funções variam assintoticamente como:

$$T_c(L) = T_c + aL^{-1/\nu}. \quad (2.58)$$

em que  $a$  é uma constante dependente da quantidade, permitindo então a determinação de  $T_c$ .

Para uma transição de fase descontínua, a compreensão do efeito de tamanho finito não pode ser mais relacionada à lei de potência. Utiliza-se a teoria de flutuação [24]. O cumulante de quarta-ordem da energia e magnetização são definidos como:

$$U_X(T) \equiv 1 - \frac{\langle X^4 \rangle_T}{3 \langle X^2 \rangle_T^2}, \quad (2.59)$$

em que  $X \equiv E, M$ , sendo  $E$  a energia e  $M$  a magnetização [6]. O comportamento do cumulante apresenta um mínimo onde a temperatura de transição escala como:

$$T_L = T_c + aL^{-d}, \quad (2.60)$$

sendo  $a$  uma constante e  $d$  a dimensão do sistema. A extrapolação para  $L \rightarrow \infty$  fornece

a temperatura de transição  $T_c$  para o sistema infinito, enquanto o mínimo do cumulante de quarta-ordem escala como:

$$U_E(L) = U_E^\infty + bL^{-1}, \quad (2.61)$$

em que  $U_E^\infty$  é o valor do cumulante para uma rede infinita e  $b$  uma constante. O comportamento do cumulante também sugere uma transição de fase descontínua, onde há a presença de mínimos agudos e o cruzamento das curvas de diferentes tamanhos de redes ocorrendo em torno da temperatura de transição [25, 26].

Outra forma de encontrar a temperatura de transição é a análise dos picos da probabilidade de energia. Na região da temperatura de transição esta probabilidade deve apresentar dois picos de mesma altura e a região entre os picos deve ter uma probabilidade nula [27]. No ensemble canônico, a distribuição de probabilidade da energia é calculada como:

$$P(E, T) = g(E) \exp(-E/k_B T). \quad (2.62)$$

Esse método permite calcular o calor latente da transição como a diferença de energia  $\Delta E_L$  entre os dois picos que obedecem a relação de escala  $L^{-1}$  [26]. As temperaturas onde os picos atingem o mesmo peso também escalam com a Equação (2.60).

Se a entropia é dada como uma função da energia, pode-se calcular a temperatura inversa microcanônica diretamente pela definição:

$$\beta = \frac{1}{T} = \frac{\partial S}{\partial E}, \quad (2.63)$$

e o comportamento desta quantidade muda com a ordem da transição de fase. Nas transições descontínuas, tem uma forma de  $S$  e uma linha reta na temperatura de transição a divide em duas áreas do mesmo tamanho[28].

As simulações de Monte Carlo são utilizadas para verificar e testar diversos aspectos da teoria de escala de tamanho finito. Por outro lado, a teoria é utilizada para analisar e interpretar dados de simulações de Monte Carlo. Como por exemplo, um sistema sofrendo uma transição de fase de ordem desconhecida. Nesses casos, as simulações sempre produzirão comportamentos suaves, independentemente da ordem de transição no limite termodinâmico. As singularidades nas derivadas da energia livre ocorrem quando o tamanho do sistema está no infinito e, portanto, para sistemas finitos a natureza descontínua da transição de primeira ordem não é notável, encontrando apenas comportamentos suaves nas quantidades termodinâmicas de modo semelhante as transições contínuas [24].

---

# SIMULAÇÕES ENTRÓPICAS

---

## 3.1 Método Monte Carlo

A determinação de médias termodinâmicas no equilíbrio de sistemas modelo é realizada pela geração de uma sequência de microestados que são escolhidos do ensemble de equilíbrio do modelo. Há duas técnicas utilizadas para determinar as médias: As simulações de Dinâmica Molecular (DM) e as simulações de Monte Carlo (MC). Uma simulação de DM pode ser usada para integrar as equações de movimento de Newton para gerar séries temporais de estados no espaço de fase à medida que o sistema explora as hipersuperfícies de energia constante do Hamiltoniano. Enquanto que uma simulação de MC tradicional gera uma sequência de estados escolhidos, por uma caminhada aleatória, os microestados configuracionais do ensemble canônico. Ambos os métodos são exemplos de amostragem de importância que concentra o esforço computacional na geração de microestados que são representativos do ensemble de equilíbrio, ao invés de amostrar todo o espaço de fase. A sequência de estados produzidos pelos dois métodos podem ser usados para estimar médias no equilíbrio. O método padrão de MC é o algoritmo de Metropolis [9]. Contudo, algoritmos mais eficientes desempenham grande importância ao permitir que as simulações atinjam a resolução que é necessária para localizar e caracterizar as transições de fase. Dentre esses algoritmos, a técnica de simulação utilizada neste trabalho é a técnica de amostragem de Wang-Landau [10, 11].

### 3.1.1 Amostragem de Wang-Landau

A amostragem de Wang-Landau (WL) [10, 11] realiza um passeio aleatório no espaço de energia através da mudança de estado dos spins, em que a energia associada com cada configuração é aceita com uma probabilidade recíproca a densidade de estados  $g(E)$ . Durante o passeio aleatório, um histograma é acumulado no espaço de energia que é usado para controlar a frequência que os níveis de energia são visitados. A atual densidade de estados é então modificada por um fator modificador e com a nova densidade de estados

um novo passeio aleatório é realizado. Cada passeio aleatório produz um histograma nivelado para a distribuição de energia. Através deste método, a função de partição pode ser calculada por:

$$Z = \sum_E g(E) \exp(-\beta E), \quad (3.1)$$

em que  $\beta = 1/k_B T$ ,  $k_B$  é a constante de Boltzmann e  $T$  é a temperatura absoluta.

Uma das vantagens do algoritmo de Wang-Landau é que a densidade de estados não depende da temperatura e, portanto, com a função de partição podemos calcular todas as quantidades termodinâmicas de interesse do sistema, através da média canônica:

$$\langle X \rangle = \frac{\sum_E \langle X \rangle_E g(E) \exp(-\beta E)}{\sum_E g(E) \exp(-\beta E)}, \quad (3.2)$$

em que  $\langle X \rangle_E$  é a média microcanônica obtida durante as simulações. Como a densidade de estados se torna muito grande durante as simulações é preferível trabalhar com o logaritmo da densidade de estados:

$$S(E) = \ln g(E), \quad (3.3)$$

em que  $S(E)$  é a entropia microcanônica.

No início da simulação, a densidade de estados é desconhecida e, portanto, se atribui para todos os possíveis níveis de energia  $g(E) = 1$ , ou seja  $S(E) = 0$ . O passeio aleatório é realizado para todos os níveis de energia de  $E_{min}$  até  $E_{max}$ . Se  $E_1$  é a energia da atual configuração e  $E_2$  é a energia da nova possível configuração, a probabilidade de transição de  $E_1$  para  $E_2$  será:

$$P(E_1 \rightarrow E_2) = \min(\exp[S(E_1) - S(E_2)], 1), \quad (3.4)$$

isto é, se  $S(E_2) \leq S(E_1)$ , a nova configuração é aceita, caso contrário, será aceita com uma probabilidade  $g(E_1)/g(E_2)$ , ou seja, se um número aleatório  $r$  escolhido entre 0 e 1 for maior ou igual a  $g(E_1)/g(E_2)$ . Quando uma nova configuração é aceita, o histograma é atualizado,  $H(E_2) \rightarrow H(E_2) + 1$ , e a densidade de estados é modificada na forma  $S(E_2) \rightarrow S(E_2) + F_i$ , sendo  $F_i = \ln f_i$ , e  $f_i$  é o  $i$ -ésimo fator de modificação. Caso a tentativa de configuração não seja aceita, então os atuais  $H(E_1)$  e  $S(E_1)$  são novamente atualizados, ou seja,  $H(E_1) \rightarrow H(E_1) + 1$  e  $S(E_1) \rightarrow S(E_1) + F_i$ .

O fator de modificação inicial é tomado como sendo  $f = f_0 = e = 2,71828\dots$ . O critério de nivelamento dos histogramas será  $x\%$  da média do histograma  $\langle H(E) \rangle$ , no qual  $x\%$  é escolhido de acordo com o tamanho e complexidade do sistema e da precisão desejada da densidade de estados. Durante as nossas simulações, o critério de nivelamento foi 80% da média do histograma  $\langle H(E) \rangle$ , sendo verificada a cada  $L$  passos de Monte Carlo, em que  $L$  é o tamanho linear do sistema [19]. Se a condição de nivelamento for satisfeita,

atualizamos o fator de modificação para um menor por  $f_{i+1} = \sqrt{f_i}$  e o histograma é reiniciado,  $H(E) = 0$ .

As médias microcanônicas são acumuladas quando  $\ln f = \ln f_{micro}$  definida pelas médias microcanônicas durante as simulações. Originalmente, as simulações eram interrompidas quando  $\ln f \approx 10^{-8}$ . Entretanto, Caparica e Cunha-Netto mostraram para o modelo de Ising bidimensional que as simulações podem ser realizadas até um  $\ln f = \ln f_{13} = 1.2208 \times 10^{-4}$  e simulações com fatores modificadores mais altos são desnecessários [19]. Portanto, para as nossas simulações, os fatores de modificação escolhidos para o modelo de Baxter-Wu unidimensional são  $f_{micro} = f_7$  e  $f_{final} = f_{16}$ .

O algoritmo pode ser esquematizado da seguinte forma:

- Inicie a simulação no estado fundamental;
- Atribua para todos os possíveis níveis de energia  $S(E) = 0$ ;
- Proponha uma nova configuração;
- Se  $S(E_2) \leq S(E_1)$  a configuração é aceita, caso contrário, um número aleatório  $r$  no intervalo  $0 < r < 1$  será escolhido e se  $g(E_1)/(E_2) \leq r$ , então a nova configuração será aceita;
- Atualize  $S(E)$  e  $H(E)$  após  $L$  passos de Monte Carlo:  $S(E) \rightarrow S(E) + F_i$  e  $H(E) \rightarrow H(E) + 1$ ;
- Continue até que o histograma obedeça a condição de nivelamento: todos  $H(E) > 0.8\langle H(E) \rangle$ ;
- Atualize o fator de modificação para um menor,  $f_{i+1} = \sqrt{f_i}$ , e reinicie o histograma,  $H(E) = 0$ ;
- A partir de  $f_7$ , acumule as médias microcanônicas;
- Encerre a simulação quando  $f = f_{16}$ .

### 3.1.2 Densidade de estados conjuntas

Para os estudos do efeito da magnetização sobre o sistema, podemos realizar um passeio aleatório tanto no espaço de energia  $E$  quanto no parâmetro de ordem  $M$ . Um passeio aleatório bidimensional pode ser necessário para sistemas com ordens mais complexas, por exemplo, um modelo de spin-glass tridimensional mesmo na ausência de campo externo [12].

O algoritmo funciona como descrito anteriormente, mas agora, o passeio aleatório será realizado com uma probabilidade de transição:

$$P(E_1, M_1 \rightarrow E_2, M_2) = \min(\exp[S(E_1, M_1) - S(E_2, M_2)], 1), \quad (3.5)$$

em que  $E_1$  e  $M_1$  é a energia e o parâmetro de ordem da atual configuração e  $E_2$  e  $M_2$  é a energia e o parâmetro de ordem da nova possível configuração e, durante a simulação, um histograma bidimensional  $H(E, M)$  é acumulado.

O histograma e a densidade de estados serão atualizados da seguinte maneira:

$$S(E, M) \rightarrow S(E, M) + F_i, \quad (3.6)$$

$$H(E, M) \rightarrow H(E, M) + 1. \quad (3.7)$$

Uma vez estimada a densidade de estados conjunta  $g(E, M)$ , a função de partição pode ser calculada como:

$$Z(T, H) = \sum_{E, M} g(E, M) \exp[-\beta(E - HM)]. \quad (3.8)$$

A partir da função de partição, podemos obter as quantidades termodinâmicas para todos os valores de temperatura e campo magnético através da média canônica:

$$\langle X \rangle = \frac{\sum_{E, M} \langle X \rangle_{E, M} g(E, M) \exp[-\beta(E - HM)]}{\sum_{E, M} g(E, M) \exp[-\beta(E - HM)]}, \quad (3.9)$$

em que  $\langle X \rangle_{E, M}$  é a média microcanônica acumulada durante a simulação.

---

## O MODELO DE BAXTER-WU

---

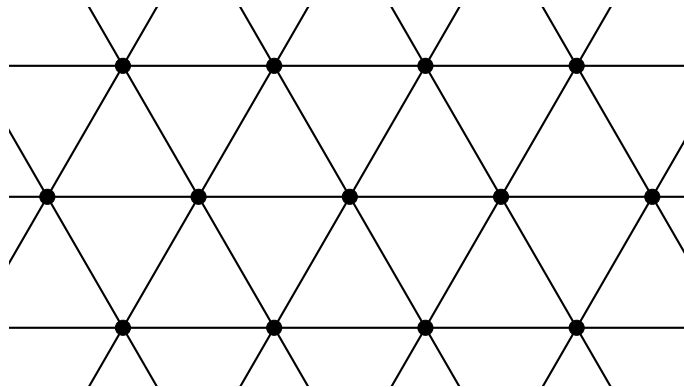
O intuito deste capítulo é inicialmente fazer uma breve cronologia do modelo de Baxter-Wu desde sua proposta de rede triangular bidimensional até a rede unidimensional. Depois propor os objetivos deste trabalho sobre o modelo de rede unidimensional.

### 4.1 Rede bidimensional

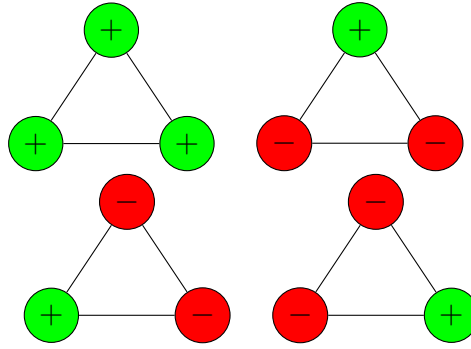
O modelo foi inicialmente proposto por D. W. Wood e H. P. Griffiths [2] em 1972 e resolvido exatamente por R. Baxter e F. Wu [3, 4, 5]. O sistema é definido em uma rede triangular bidimensional, conforme a Figura 4.1, de modo que a interação entre os spins é dada pelo hamiltoniano:

$$\mathcal{H}_{BW2D} = -J \sum_{\langle ijk \rangle} \sigma_i \sigma_j \sigma_k, \quad (4.1)$$

onde os spins estão localizados nos vértices da rede e podem assumir os valores  $\sigma_i = \pm 1$ , sendo  $J$  a constante de acoplamento que define a escala de energia e a soma se estende a todas as faces triangulares da rede.



**Figura 4.1:** Rede triangular cristalina do modelo de Baxter-Wu bidimensional.



**Figura 4.2:** Os estados fundamentais do modelo de Baxter-Wu bidimensional: O estado ferromagnético e os três estados ferrimagnéticos.

Uma das razões que inspiraram a elaboração do modelo de Baxter-Wu foi a construção de um modelo magnético que não apresentasse uma simetria por inversão de spins e que exibisse uma transição ordem-desordem [27]. A rede de Baxter-Wu pode ser decomposta em três sub-redes triangulares, de modo que qualquer face triangular contém um spin de cada uma delas.

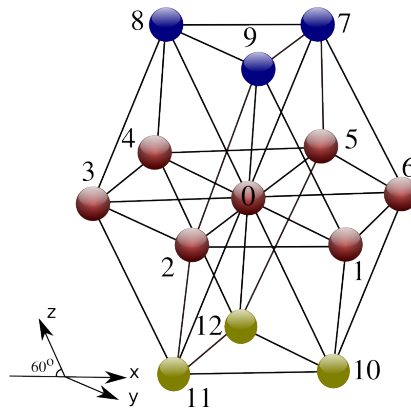
O hamiltoniano do modelo (Equação 4.1) apresenta uma tripla interação de spins vizinhos próximos, sendo que se os spins de quaisquer duas sub-redes forem invertidos, o estado resultante terá igual probabilidade que o estado inicial [29], portanto, o estado fundamental do modelo é quatro vezes degenerado, sendo que em um deles todos os sítios da rede são preenchidos por spins positivos  $\sigma = +1$ , o estado ferromagnético, e os outros três restantes apresentam duas sub-redes preenchidas por spins negativos  $\sigma = -1$ , os estados ferrimagnéticos, conforme a Figura 4.2.

Um resultado bastante curioso é apresentado pela solução exata da temperatura de transição resolvida por Wood e Griffiths [2], em que o modelo de Baxter-Wu para spin-1/2 apresenta o mesmo ponto crítico que o modelo bidimensional de interação de pares de spins, o modelo de Ising numa rede quadrada,  $k_B T_c / J = 2 / \ln(1 + \sqrt{2}) = 2.26918531$ , mas sem a mesma classe de universalidade.

O parâmetro de ordem do modelo de Baxter-Wu pode ser definido de diferentes maneiras. Novotny e Landau [30] definiram como parâmetros de ordem a polarização  $p$ , em que a polarização é a raiz do valor quadrático médio da função de correlação entre spins vizinhos de diferentes sub-redes, e a magnetização  $m$  sendo a raiz do valor quadrático médio da magnetização das três sub-redes. Entretanto, Santos e Figueredo [31], no seu estudo da dinâmica crítica do modelo, definiram como a média da magnetização por spin, ou seja, o parâmetro de ordem no estado fundamental para o caso ferromagnético é igual a  $+1$  e para os estados ferrimagnéticos é  $-1/3$ .

## 4.2 Rede tridimensional

O modelo de Baxter-Wu para uma rede tridimensional foi proposto por L. N. Jorge, L. S. Ferreira e A. A. Caparica [6] inspirado na rede bidimensional. A estrutura deste modelo é dada pela Figura 4.3, onde no plano horizontal há um hexágono regular formado pelos pontos (1 – 6) e no centro o ponto 0 (zero), onde cruzam três eixos que formam um ângulo de  $60^\circ$ , sendo que para cada eixo pode-se associar um outro hexágono regular. Os outros hexágonos são formados pelos pontos (1, 9, 8, 4, 12, 10), (2, 9, 7, 5, 12, 11) e (3, 8, 7, 6, 10, 11). Logo, um spin da rede possui um total de 12 vizinhos próximos e 24 faces triangulares circundando-o. Os três locais do plano superior estão localizados acima do centro de três faces triangulares alternadas, enquanto que os outros três locais no plano inferior estão localizados abaixo do centro das outras três faces triangulares.



**Figura 4.3:** Rede tridimensional do modelo de Baxter-Wu. Reproduzido com a permissão do autor [1].

A energia deste modelo é dada pelo seguinte hamiltoniano:

$$H_{BW3D} = -J \sum_{\langle i,j,k \rangle} \sigma_i \sigma_j \sigma_k, \quad (4.2)$$

onde a soma se estende sobre todas as possíveis faces triangulares da rede, e as variáveis de spin que podem assumir os valores  $\sigma = \pm 1$  estão localizados nos vértices dos triângulos.  $J$  é a constante de acoplamento que escala a energia da rede, sendo a mesma em todas as direções. Uma clara diferença entre a rede tridimensional e a bidimensional são as configurações do estado fundamental, que para a rede tridimensional apresenta unicamente o estado ferromagnético. Com o uso de simulações entrópicas, os autores demonstraram que o modelo apresenta uma transição ordem-desordem descontínua, cuja temperatura de transição é dada por  $k_B T/J = 11.377485(29)$ .

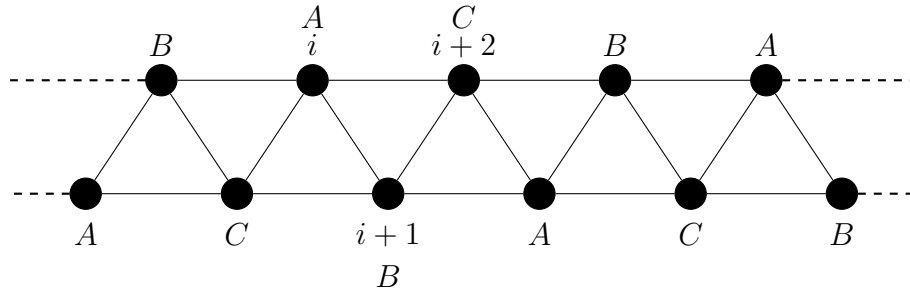
### 4.3 Rede unidimensional

O modelo de Baxter-Wu de rede unidimensional foi proposto recentemente na literatura por M. F. Calvacante e J. A. Plascak [7], no estudo do modelo de Baxter-Wu em diferentes dimensionalidades de rede através da aproximação de campo médio. O modelo de rede unidimensional apresentou uma transição de ordem-desordem descontínua com a temperatura de transição dada por  $k_B T/J = 1.4879$ .

A Figura 4.4 apresenta a estrutura deste modelo com as suas sub-redes sendo denominadas por  $A$ ,  $B$  e  $C$ , onde a energia pode ser descrita como:

$$\mathcal{H}_{BW1D} = -J \sum_{i=1}^L \sigma_i \sigma_{i+1} \sigma_{i+2} - H \sum_{i=1}^L \sigma_i, \quad (4.3)$$

em que  $J$  é a constante de acoplamento e  $L$  é o número de spins na rede que podem assumir os valores  $\sigma_i = \pm 1$ , obedecendo as condições periódicas de contorno:  $\sigma_{L+1} = \sigma_1$  e  $\sigma_{L+2} = \sigma_2$ .



**Figura 4.4:** Rede unidimensional do modelo de Baxter-Wu. Os índices  $A$ ,  $B$  e  $C$  representam as sub-redes do sistema.

A solução exata do modelo de rede unidimensional ainda não foi apresentada na literatura, contudo há trabalhos que abordam outros modelos de curta interação em sistemas unidimensionais, por exemplo, Mermin e Wagner [32] afirmam que o modelo de Heisenberg isotrópico na ausência de campo externo não possui ferromagnetismo ou antiferromagnetismo em uma ou duas dimensões. A técnica da matriz de transferência do modelo de Ising unidimensional aponta a existência de ferromagnetismo espontâneo apenas em  $T_c = 0$  [33, 34]. Entretanto, Ferreira *et al.* abordam a possibilidade de transição de fase no modelo de Ising unidimensional através da escolha apropriada do parâmetro de ordem, em que utilizaram-se da solução exata e das simulações entrópicas para estimar a temperatura de transição,  $T_c = 0.171008(63)J/k_B$  [35].

Em nosso trabalho, iremos estudar o modelo de Baxter-Wu de rede unidimensional através do comportamento das quantidades termodinâmicas do sistema como função da temperatura e do campo externo. Em seguida, iremos estudar o comportamento dessas quantidades em campo externo nulo tomando como parâmetro de ordem a soma dos módulos da magnetização das sub-redes do sistema.

---

## RESULTADOS E DISCUSSÕES

---

Neste capítulo, falaremos dos resultados obtidos para o modelo de Baxter-Wu unidimensional. Inicialmente, abordaremos o comportamento das quantidades termodinâmicas como função da temperatura e do campo externo. Em um segundo momento, estudaremos o modelo para campo externo  $H = 0$  através de duas abordagens. Primeiramente, estudaremos o comportamento das quantidades termodinâmicas usando a função de partição dada pela contagem das configurações, onde usamos o parâmetro de ordem como a soma dos módulos da magnetização das sub-redes. Em seguida, realizamos simulações entrópicas para redes de tamanhos maiores e calculamos a temperatura crítica e os expoentes críticos.

### 5.1 Campo magnético externo $H$

O hamiltoniano do modelo (Equação (4.3)) nos permite estudar o comportamento do sistema para diferentes valores de campo  $H$ . Dessa forma, iremos estudar o modelo através de amostragens entrópicas, que nos possibilitam, pela estimativa da densidade de estado conjunta, o acesso a qualquer grandeza termodinâmica como função de  $T$  e  $H$ . Através das grandezas termodinâmicas podemos determinar qual a configuração do estado fundamental e entender o que acontece com o sistema para diferentes valores de  $T$  e  $H$ .

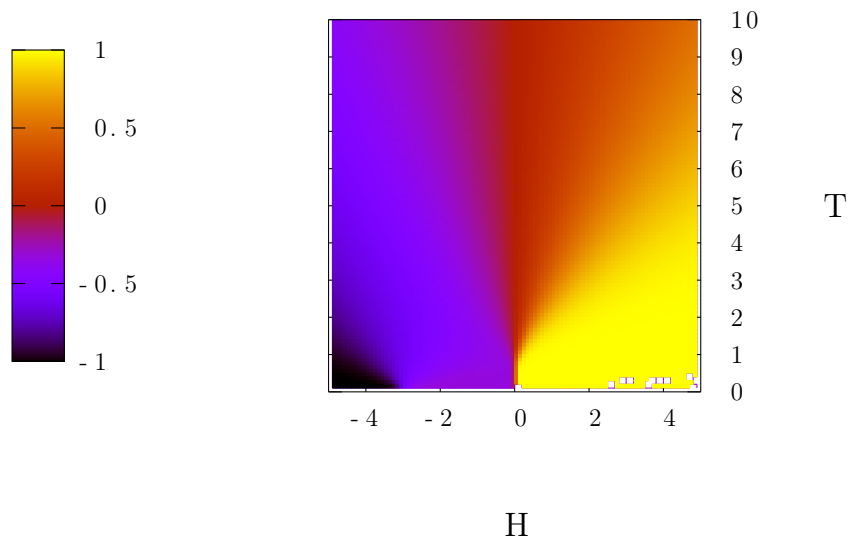
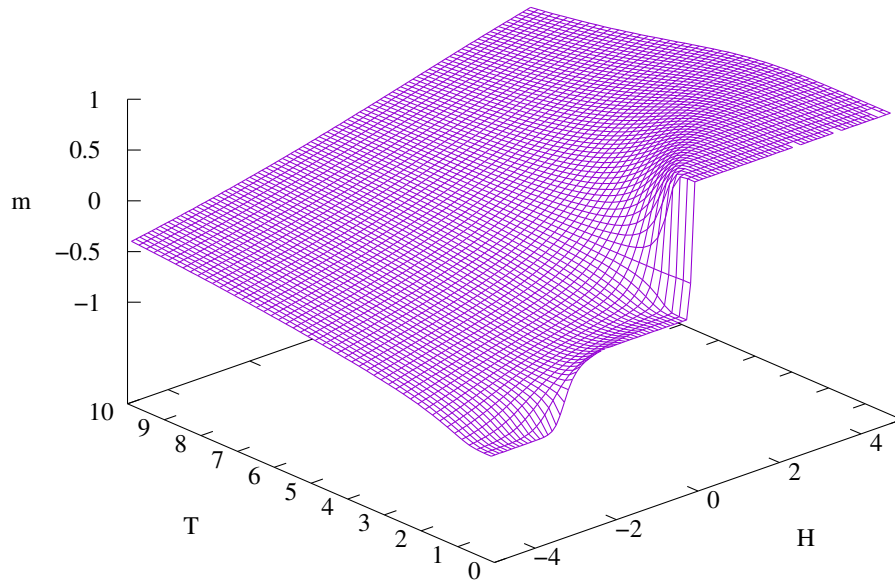
Inicialmente, realizamos as simulações entrópicas com os tamanhos de rede  $L = 60, 72, 81$  com  $N = 20, 20, 20$  rodadas independentes e, então, calculamos as médias canônicas para as quantidades termodinâmicas como a magnetização, a energia, a susceptibilidade magnética e o calor específico para o intervalo de campo externo  $H = [-5, 5]$  com uma taxa de variação de  $dH = 0.1$ . Na Figura 5.1, apresentamos o comportamento da magnetização como função da temperatura  $T$  e do campo externo  $H$  no plano tridimensional (figura superior) e no plano bidimensional (figura inferior), onde as cores estão associadas ao valor da grandeza, sendo preto para  $m = -1$  e

amarelo para  $m = +1$ . Observamos que para  $H > 0$  na região de baixas temperaturas, a região de platô apresenta uma configuração ferromagnética positiva e à medida que a temperatura aumenta, torna-se paramagnético. Já para  $H < 0$  temos duas regiões distintas em baixas temperaturas, a primeira no intervalo  $-3 < H < 0$ , onde  $m = -1/3$ , evidenciando que a região de platô é uma configuração ferrimagnética, e a segunda região em  $H < -3$ , a região de platô é uma configuração ferromagnética negativa. Nota-se que ao fixamos a temperatura em algum valor na região de baixas temperaturas e variarmos o campo externo  $H$ , a transição entre as configurações ferromagnética positiva e ferrimagnética ocorre abruptamente em  $H = 0$ , enquanto que a transição entre as configurações ferrimagnética e ferromagnética negativa ocorre de maneira mais suave em torno de  $H = -3$ . Dessa forma, podemos definir dois pontos onde existe a coexistência de mais de uma fase nos estados ordenados:  $H = 0$  e em torno de  $H = -3$ . Esse tipo de análise é conhecido como diagrama de fases, pois extraímos informações do comportamento das quantidades termodinâmicas nas fases de equilíbrio e na interface entre as fases.

A Figura 5.2 apresenta o comportamento da energia como uma função da temperatura  $T$  e do campo externo  $H$  no plano tridimensional (figura superior) e no plano bidimensional (figura inferior), onde as cores estão associadas ao valor da grandeza, sendo preto para  $e = -1$  e amarelo para  $e = +1$ . Observa-se que na região  $-3 < H < 5$  em baixas temperaturas, as regiões de platôs pertencentes as configurações ferromagnética positiva e ferrimagnética apresentam o mesmo valor energético de  $e = -1$  e à medida que a temperatura aumenta torna-se nula. Na região  $-5 < H < -3$ , a região de platô pertencente a configuração ferromagnética negativa apresenta o valor energético de  $e = +1$  e também com o aumento da temperatura torna-se nula. Na interface em  $H = 0$  em baixas temperaturas, entre as configurações ferromagnética positiva e ferrimagnética não há uma mudança na energia, pois o modelo é quatro vezes degenerado no estado fundamental a campo magnético externo nulo. Contudo, na interface em torno  $H = -3$ , entre as configurações ferrimagnética e ferromagnética negativa, ocorre uma quebra do valor da energia relacionada com a mudança da configuração dos spins, onde os spins positivos das sub-redes do sistema na fase ferrimagnética tornam-se negativos devido ao aumento da intensidade do campo.

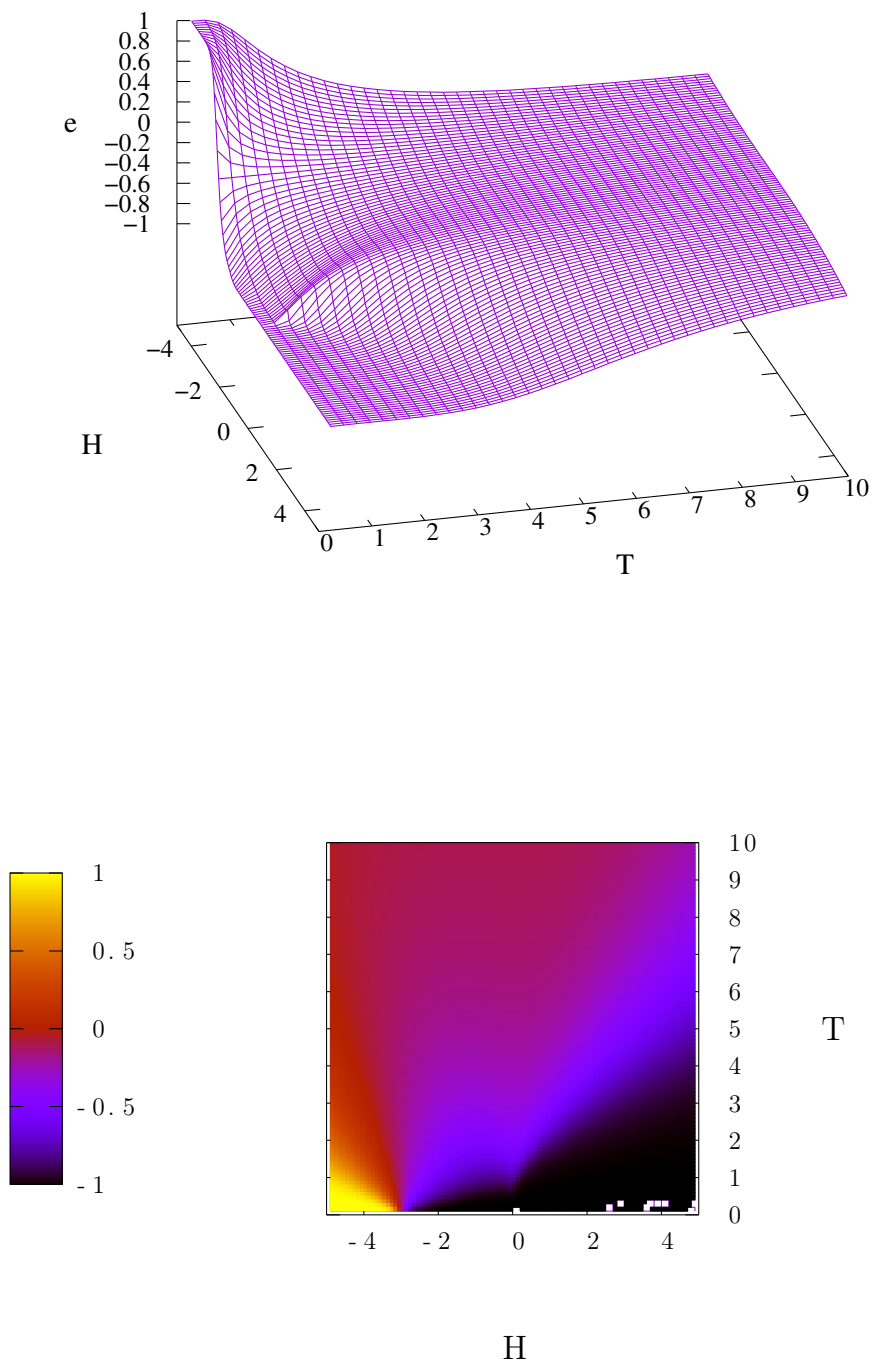
Estudaremos agora o comportamento das flutuações da magnetização e da energia através da susceptibilidade magnética e do calor específico. Na Figura 5.3, apresentamos o comportamento da susceptibilidade magnética do sistema como uma função da temperatura e do campo externo no plano tridimensional (figura superior) e no plano bidimensional (figura inferior), onde a cor preta está associada a  $\chi/L = 0$  e a cor amarela a  $\chi/L = 5$ , a cor branca está associada com valores maiores que o intervalo apresentado para a susceptibilidade magnética. Observa-se que nos estados ordenados do modelo, as configurações ferromagnéticas e ferrimagnéticas, a susceptibilidade magnética apresenta um máximo suave com o aumento da temperatura. Entretanto, percebe-

## Magnetização



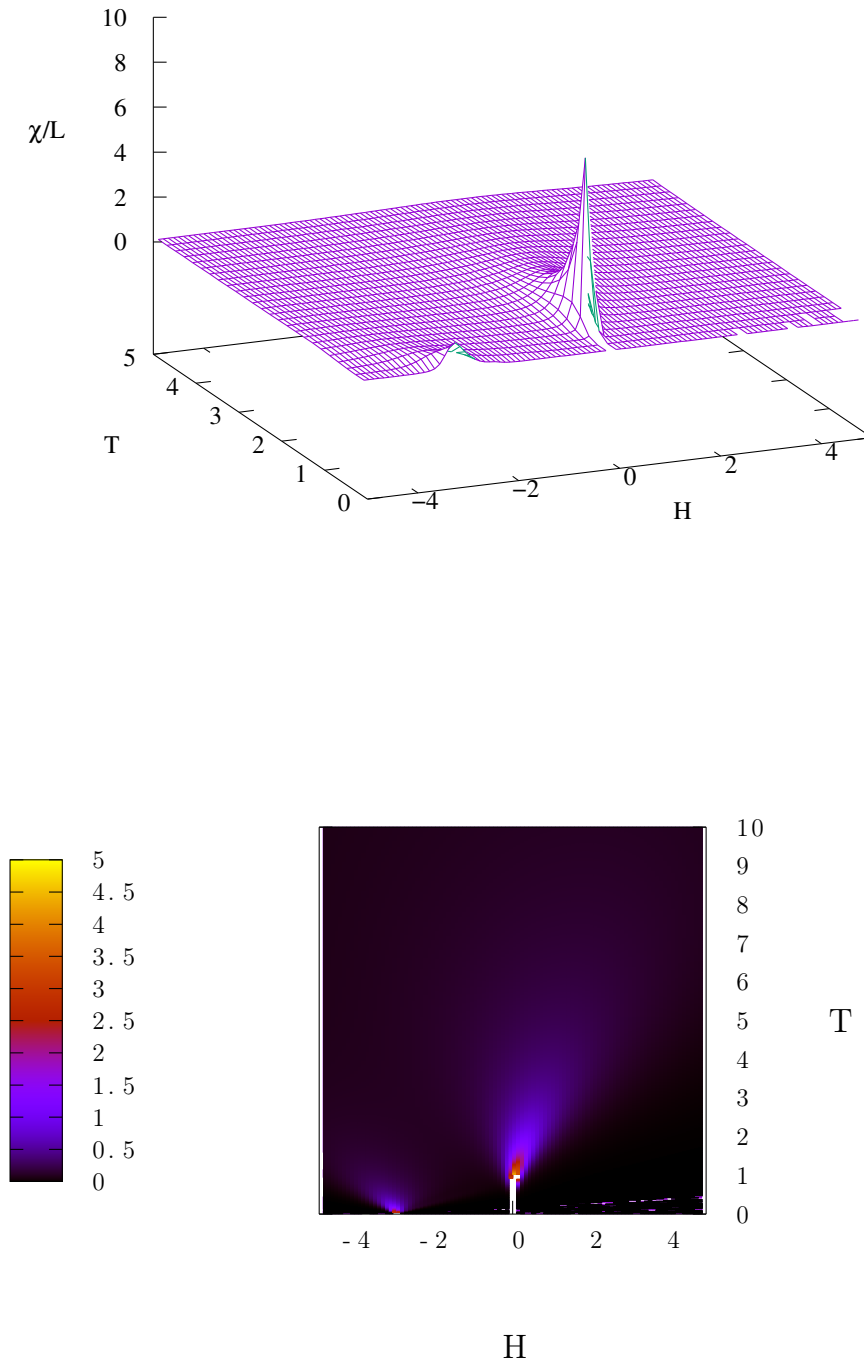
**Figura 5.1:** Comportamento da magnetização como função da temperatura e do campo externo para  $L = 81$ . A figura superior apresenta o comportamento no plano tridimensional, enquanto a figura inferior apresenta no plano bidimensional, onde as cores estão relacionada ao valor da grandeza. Percebemos três diferentes regiões que nomeamos de ferrogmanética ( $H > 0$ ), ferrimagnética ( $-3 < H < 0$ ), e ferrogmanética negativa ( $H < -3$ ).

## Energia de Troca



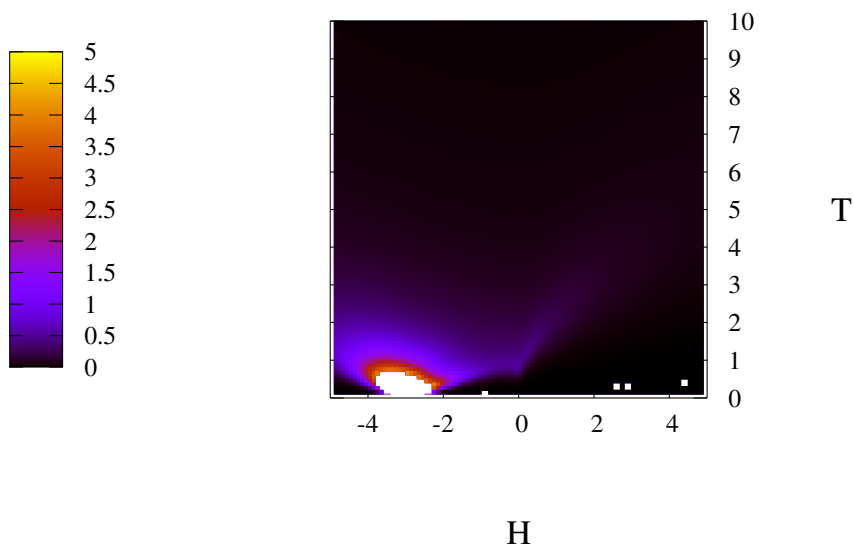
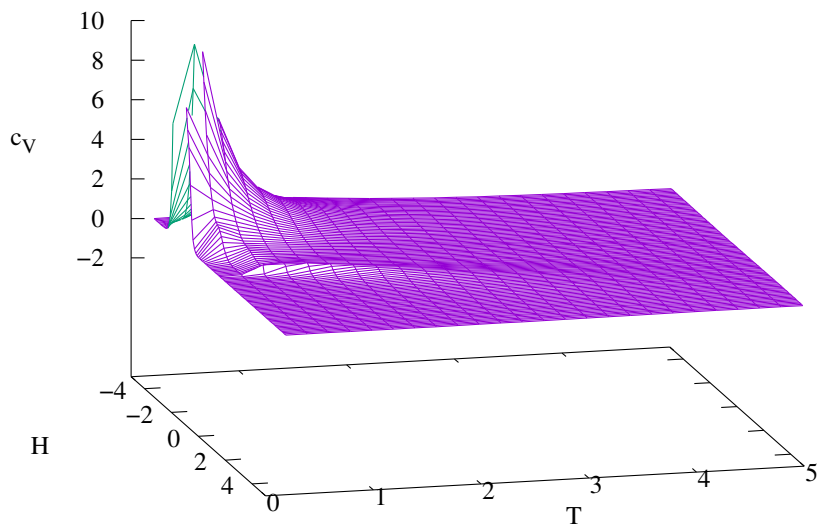
**Figura 5.2:** Comportamento da energia como função da temperatura e do campo externo para  $L = 81$ . A figura superior apresenta o comportamento no plano tridimensional, enquanto a figura inferior apresenta no plano bidimensional, onde as cores estão relacionadas ao valor da grandeza. Percebemos que na região de  $-3 < H < 5$  as configurações ordenadas apresentam a mesma energia e em torno de  $H = -3$  ocorre uma mudança do valor da energia.

## Susceptibilidade Magnética

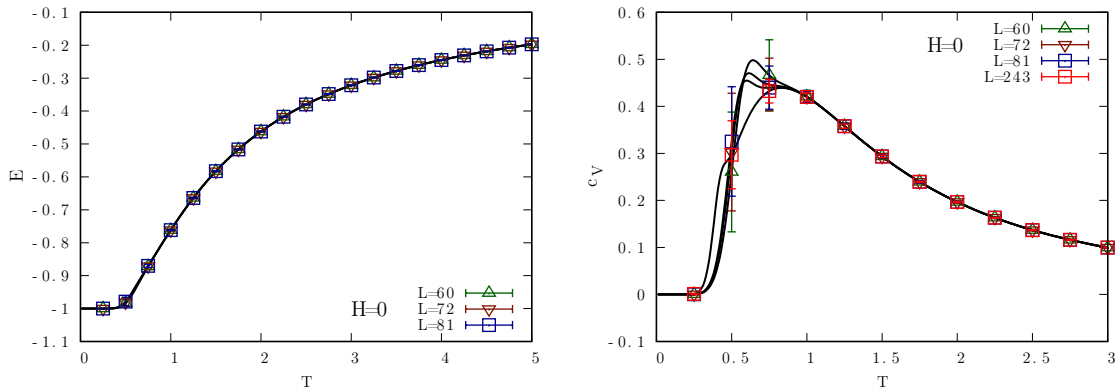


**Figura 5.3:** Comportamento da susceptibilidade como função da temperatura e do campo externo para  $L=81$ . A figura superior apresenta o comportamento no plano tridimensional, enquanto a figura inferior apresenta no plano bidimensional, onde as cores estão relacionadas ao valor da grandeza. Observa-se que em torno de  $H = 0$  e  $H = -3$  a susceptibilidade magnética diverge.

## Calor Específico



**Figura 5.4:** Comportamento do calor específico como função da temperatura e do campo externo para  $L = 81$ . A figura superior apresenta o comportamento no plano tridimensional, enquanto a figura inferior apresenta no plano bidimensional, onde as cores estão relacionadas ao valor da grandeza. Observa-se que em torno de  $H = -3$  o calor específico diverge.

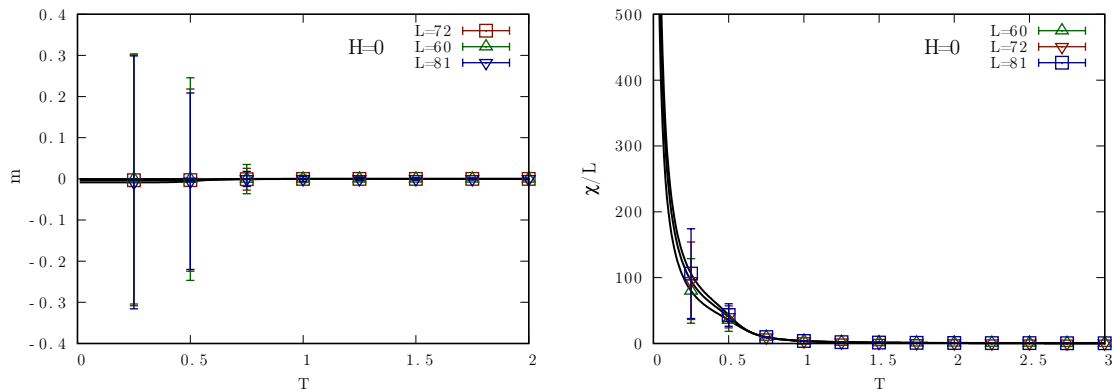


**Figura 5.5:** Comportamento da energia (a esquerda) e do calor específico (a direita) do sistema em  $H = 0$  para os tamanhos de rede  $L = 60, 72, 81, 243$ .

se um aumento do valor da susceptibilidade magnética em baixas temperaturas nas regiões de coexistência entre as configurações ordenadas. Na interface em  $H = 0$ , as configurações, como visto no diagrama de fases da energia na Figura 5.2, apresentam o mesmo valor energético, contudo, segundo o diagrama de fases da magnetização na Figura 5.1, não apresentam os mesmos valores para a magnetização, dessa forma as flutuações da magnetização entre  $m = +1$  e  $m = -1/3$  é evidenciada pela susceptibilidade magnética. Na interface em  $H = -3$ , os estados ordenados não apresentam os mesmos valores de energia e as flutuações na magnetização ocorre entre  $m = -1/3$  e  $m = -1$ , sendo também evidenciada pela susceptibilidade magnética, porém, sendo mais suave que em  $H = 0$ .

Na Figura 5.4, apresentamos o comportamento do calor específico como função da temperatura e do campo externo no plano tridimensional (figura superior) e no plano bidimensional (figura inferior), onde as cores novamente estão associadas a intensidade da quantidade, sendo a cor preta  $c_V = 0$  e a cor amarela  $c_V = 5$ , enquanto que a cor branca representa valores maiores que o intervalo apresentado ao calor específico. No intervalo de  $0 < H < 5$ , na região de configuração da fase ferromagnética positiva, o calor específico apresenta um máximo suave com o aumento da temperatura. Na região  $-3 < H < 0$ , na região de configuração da fase ferrimagnética, à medida que o campo se aproxima de  $H = -3$ , observa-se um aumento do valor do calor específico para a região de baixas temperaturas, entretanto, tornando-se nula à medida que a temperatura aumenta. Conforme a Figura 5.1, em  $H = 0$ , as configurações ferromagnética positiva e ferrimagnética, apresentam o mesmo valor para energia, logo o calor específico não apresenta grandes valores para esta interface. Entretanto, em torno de  $H = -3$ , as configurações ferrimagnética e ferromagnética negativa não apresentam o mesmo valor energético, logo as flutuações da energia ocorre entre os valores  $e = -1$  e  $e = +1$ , mas à medida que a temperatura aumenta, as flutuações tornam-se nulas.

Com o objetivo de estudar o comportamento dessas quantidades termodinâmicas na região de interface entre as configurações do estado fundamental, fixamos o valor do



**Figura 5.6:** Comportamento da magnetização (a esquerda) e da susceptibilidade magnética (a direita) do sistema em  $H = 0$  para os tamanhos de rede  $L = 60, 72, 81$ .

campo externo em  $H = 0$ . A região em torno de  $H = -3$  ficará para trabalhos futuros, pois as quantidades termodinâmicas apresentam um comportamento que para ser melhor caracterizado necessita de estudos mais aprofundados. Na Figura 5.5, apresentamos o comportamento da energia (a esquerda) e o calor específico (a direita) do sistema como uma função da temperatura. Observa-se que o valor mínimo da energia que o sistema apresenta é  $e = -1$  que está relacionado com as configurações ferromagnética positiva e ferrimagnética e à medida que a temperatura aumenta tende a zero suavemente, em conformidade com o diagrama de fases da energia na Figura 5.2. No comportamento do calor específico como função do temperatura, podemos observar a presença de dois máximos suaves na região de baixas temperaturas e à medida que a temperatura aumenta, o calor específico suavemente diminui. Os tamanhos de rede podem ser diferenciados através do primeiro máximo do calor específico que é um efeito de tamanho finito do sistema que diminui à medida que o tamanho da rede aumenta que pode ser melhor visualizado para o tamanho de rede  $L = 243$ . Observa-se a ausência de efeito de tamanho finito entre os tamanhos de rede para a energia.

Na Figura 5.6 apresentamos o comportamento da magnetização (a esquerda) e da susceptibilidade magnética (a direita) como função da temperatura. Como as configurações são degeneradas e com a ausência de campo externo, a magnetização é nula ao longo de todo o intervalo de temperatura, conforme a Figura 5.1. No regime de baixas temperaturas a magnetização flutua entre os valores  $m = +1$  e  $m = -1/3$ , sendo evidenciado pelo alto valor da barra de erro. O valor dessa quantidade é nula em todo o intervalo de temperatura, pois em baixas temperaturas temos uma configuração ferromagnética e três ferrimagnéticas tornando a média da magnetização nula, e para altas temperaturas temos uma configuração paramagnética. Essas flutuações são melhores observadas através do comportamento da susceptibilidade magnética como função da temperatura. Como visto anteriormente na Figura 5.3, a susceptibilidade diverge na região de baixas temperaturas. Observa-se a presença de efeito de tamanho finito apenas para a

susceptibilidade magnética no regime de baixas temperaturas.

Vemos que nessa região de interface, o parâmetro de ordem tomado como sendo a magnetização total da rede, não diferencia as configurações de estado fundamental, formadas pelas fases ferromagnética positiva e ferrimagnéticas, da configuração desordenada formada pela fase paramagnética. Dessa forma, utilizamos uma nova abordagem para estudar o modelo de Baxter-Wu de rede unidimensional nessa região, onde adotamos a soma dos módulos da magnetização das sub-redes como parâmetro de ordem.

## 5.2 Campo magnético externo $H = 0$

Para  $H = 0$ , iremos estudar o modelo de Baxter-Wu numa rede unidimensional usando duas abordagens: a contagem analítica de configuração para pequenos tamanhos de rede e a simulação entrópica. Para realizar a contagem das configurações de spin, utilizamos um parâmetro de ordem que permite distinguir uma fase ordenada de uma fase desordenada. Como o estado fundamental é quatro vezes degenerado, composto por um estado ferromagnético e outros três estados ferrimagnéticos, uma escolha que difere essas quatro configurações de uma fase desordenada é a soma dos módulos da magnetização das sub-redes  $A$ ,  $B$  e  $C$  do sistema (conforme a Figura 4.4), o parâmetro de ordem  $M'$ . Desta forma, podemos reescrever o hamiltoniano da Equação (4.3) como:

$$\tilde{\mathcal{H}} = -J \sum_{i=1}^L \sigma_i \sigma_{i+1} \sigma_{i+2} - H \left( \left| \sum_{i \in A} \sigma_i \right| + \left| \sum_{i \in B} \sigma_i \right| + \left| \sum_{i \in C} \sigma_i \right| \right) = -JE_j - HM'_j, \quad (5.1)$$

com a condição de contorno  $\sigma_{L+1} = \sigma_1$  e  $\sigma_{L+2} = \sigma_2$ . O índice  $j$  representa uma configuração em particular. A função de partição é dada por:

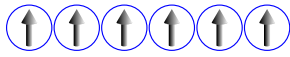





$$\tilde{Z} = \sum_j e^{\beta(JE_j + HM'_j)}, \quad (5.2)$$

onde a soma é sobre todas as possíveis configurações. Em termos da densidade de estados conjunta  $g_L(E, M')$  para uma rede de tamanho finito  $L$  temos:

$$\tilde{Z}_L = \sum_{E=-L}^L \sum_{M=0}^L g_L(E, M') e^{\beta(JE + HM')}, \quad (5.3)$$

sendo somente válida quando  $H = 0$ .

Para o tamanho de rede  $L = 6$ , utilizamos a Equação (5.3) para determinar a energia de interação dos spins e o módulo da magnetização de cada sub-rede para todas as possíveis configurações dos spins, conforme a Figura 5.7, e obtivemos a seguinte função de partição:

	$g(E, M)$	$g(E, M')$
	$g(-6, 6) = 1$	$g(-6, 6) = 1$
	$g(6, -6) = 1$	$g(6, 6) = 1$
	}	
	$g(6, 2) = 3$	$g(6, 6) = 3$
	$g(-6, -2) = 3$	$g(-6, 6) = 3$
	}	
	$g(-2, 2) = 6$	$g(-2, 2) = 6$
	$g(2, 2) = 6$	$g(2, 2) = 6$
	}	
	$g(2, 2) = 6$	$g(2, 2) = 6$
	$g(-2, -2) = 6$	$g(-2, 2) = 6$
	}	
	$g(0, 4) = 6$	$g(0, 4) = 12$
	$g(0, -4) = 6$	$g(0, 4) = 12$
	}	
	$g(0, 0) = 8$	$g(0, 0) = 8$
	$g(0, 0) = 12$	$g(0, 4) = 12$
	}	

**Figura 5.7:** As densidades de estados para o modelo de Baxter-Wu unidimensional para o tamanho de rede  $L = 6$ . As densidades representadas por  $g(E, M)$  usam a magnetização como a soma dos spins, enquanto que  $g(E, M')$  usam a soma dos módulos da magnetização das sub-redes. As densidades de estados para as cinco primeiras configurações estão representadas acima e a configuração invertendo todos os spins em baixo. Para a sexta configuração, em cima estão as configurações em que a magnetização é nula independente do parâmetro de ordem e em baixo as que dependem da escolha.

$$\tilde{Z}_6 = 4e^{6\beta J} e^{6\beta H} + 12e^{2\beta J} e^{2\beta H} + 24e^{4\beta H} + 12e^{-2\beta J} e^{2\beta H} + 4e^{-6\beta J} e^{6\beta H} + 8. \quad (5.4)$$

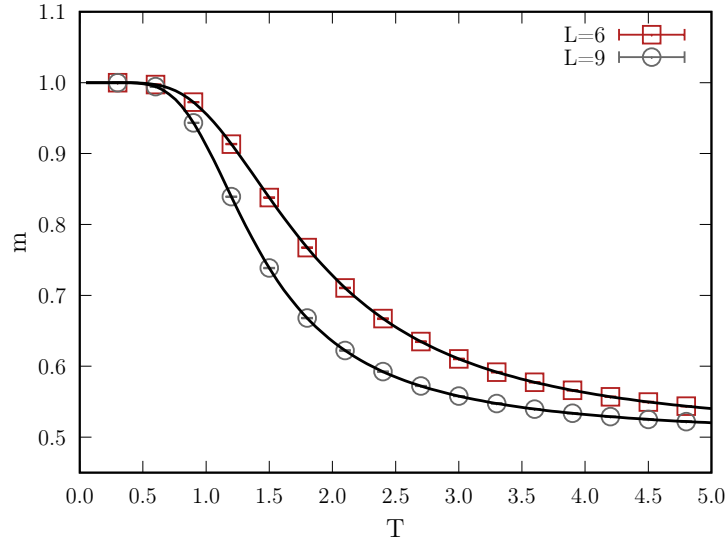
Qualquer função termodinâmica pode ser obtida uma vez conhecida a função de partição. Portanto, utilizando a Equação (2.8) para definir a energia livre de Helmholtz para este tamanho de rede, calculamos o parâmetro de ordem como:

$$\tilde{M}_L = \lim_{H \rightarrow 0} \left( -\frac{\partial F_L}{\partial H} \right), \quad (5.5)$$

onde obtemos:

$$\tilde{M}_6 = 6 \left[ \frac{\cosh(6\beta J) + \cosh(2\beta J) + 2}{\cosh(6\beta J) + 3 \cosh(2\beta J) + 4} \right]. \quad (5.6)$$

Para o tamanho de rede  $L = 9$ , utilizamos o mesmo processo anterior e obtivemos



**Figura 5.8:** Parâmetro de ordem como uma função da temperatura. Observa-se que o comportamento do parâmetro de ordem exibe um comportamento de escala de tamanho finito. As linhas representam o comportamento analítico para as redes e os pontos os resultados simulados. Os erros são menores que os símbolos.

a função de partição como:

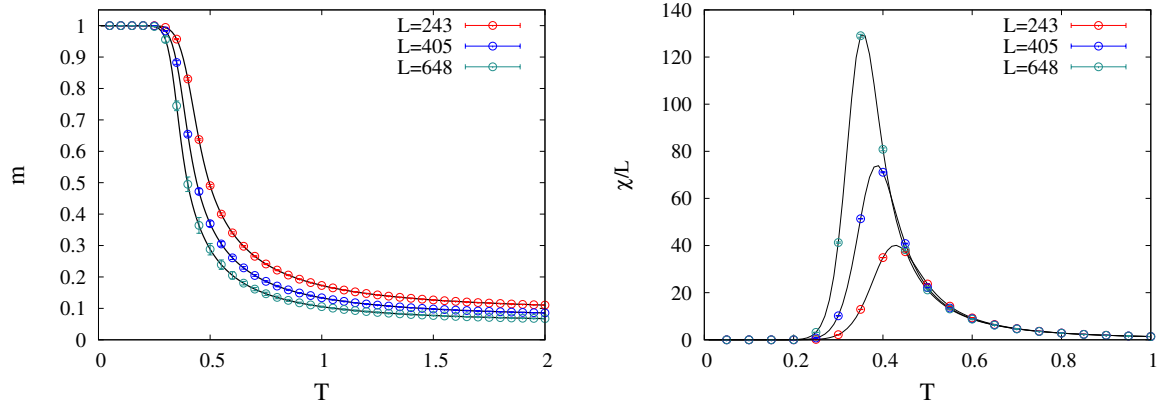
$$\begin{aligned}
\tilde{Z}_9 = & 4e^{9\beta J} e^{9\beta H} + 36e^{5\beta J} e^{5\beta H} + 36e^{3\beta J} e^{7\beta H} + 36e^{3\beta J} e^{5\beta H} \\
& + 36e^{3\beta J} e^{3\beta H} + 36e^{\beta J} e^{5\beta H} + 72e^{\beta J} e^{3\beta H} + 36e^{-\beta J} e^{5\beta H} \\
& + 72e^{-\beta J} e^{3\beta H} + 36e^{-3\beta J} e^{7\beta H} + 36e^{-3\beta J} e^{5\beta H} + 36e^{-3\beta J} e^{3\beta H} \\
& + 36e^{-5\beta J} e^{5\beta H} + 4e^{-9\beta J} e^{9\beta H},
\end{aligned} \tag{5.7}$$

onde a magnetização é dada por:

$$\tilde{M}_9 = 9 \left[ \frac{\cosh(9\beta J) + 5 \cosh(5\beta J) + 15 \cosh(3\beta J) + 11 \cosh(\beta J)}{\cosh(9\beta J) + 6 \cosh(5\beta J) + 27 \cosh(3\beta J) + 27 \cosh(\beta J)} \right]. \tag{5.8}$$

O processo de determinar a função de partição de forma analítica está limitado as redes de tamanhos pequenos, contudo, a simulação entrópica pode ir a qualquer tamanho de rede que for necessário. Então, realizamos para os tamanhos de rede  $L = 6$  e  $L = 9$ , o número de 50 rodadas de simulações de amostragem entrópica gerando uma densidade de estados conjunta. Uma vez obtida a densidade de estados, calculamos a média do parâmetro de ordem spin. Na Figura 5.8 observa-se que o comportamento do parâmetro de ordem obtida através das simulações e o comportamento analítico combinam com uma boa precisão e que exibem efeitos de tamanho finito, sugerindo um estudo de escala de tamanho finito.

Realizamos as nossas simulações com os tamanhos de rede  $L = 243, 324, 405, 486, 567, 648$  com  $N = 24, 24, 20, 20, 20, 16$  rodadas independentes,

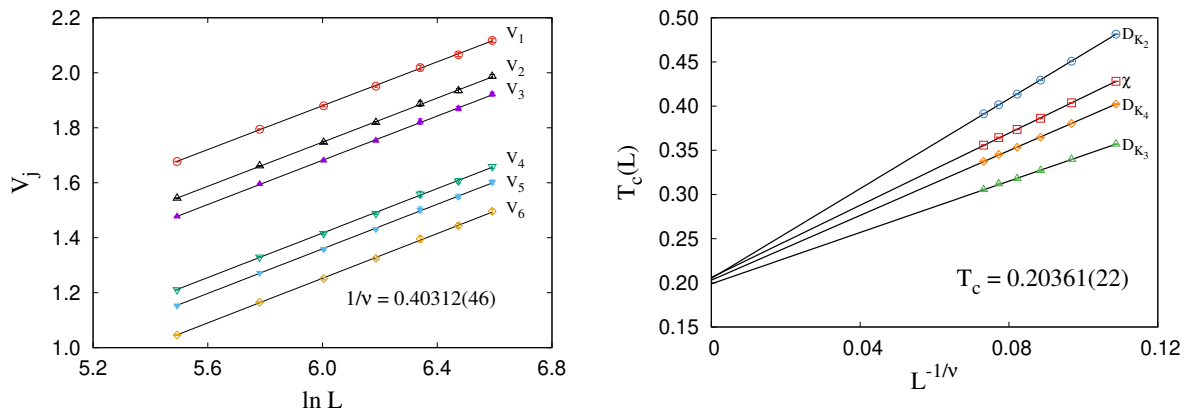


**Figura 5.9:** Comportamento do parâmetro de ordem (a esquerda) e da susceptibilidade magnética (a direita) como função da temperatura para os tamanhos de rede  $L = 243, 405, 648$  obtidos pelas simulações entrópicas. Os erros são menores que os símbolos.

respectivamente. As médias termodinâmicas foram calculadas para campo externo nulo,  $H = 0$ .

A Figura 5.9 apresenta o comportamento do parâmetro de ordem (a esquerda) e da susceptibilidade magnética (a direita) como função da temperatura para os tamanhos de rede  $L = 243, 405, 648$ . Observa-se o mesmo efeito de tamanho finito no parâmetro de ordem que na Figura 5.8. Para a susceptibilidade magnética, observa-se que à medida que ocorre um aumento do tamanho da rede, o seu máximo sofre um aumento da sua intensidade e a sua posição é deslocada para a esquerda em direção à temperatura crítica do sistema para uma rede de tamanho infinito. Este comportamento sugere que para uma rede de tamanho infinito, observaremos uma divergência na susceptibilidade magnética na temperatura crítica, ou seja, uma evidência de transição de fase contínua.

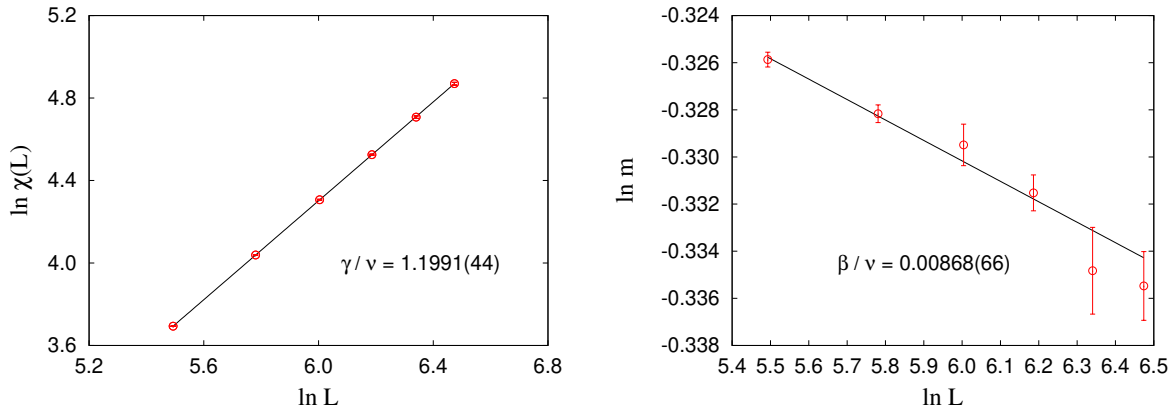
Lançando mão das equações (2.46)-(2.51) obtemos  $1/\nu$  com a inclinação das retas  $V_j$  como função de  $\ln L$  na temperatura crítica. Cada inclinação fornece o coeficiente an-



**Figura 5.10:** Dependência de  $V_j$  com o logaritmo do tamanho de rede na temperatura crítica, na qual as inclinações fornecem  $1/\nu$  (a esquerda). Dependência de tamanho das localizações dos extremos em diferentes quantidades termodinâmicas (a direita). As barras de erro são menores que os símbolos.

gular  $1/\nu$  e então realizamos uma média destes valores e o erro desta média é determinado a partir dos erros individuais. No lado esquerdo da Figura 5.10 apresentamos os ajustes desses pontos e em nosso trabalho estimamos que  $1/\nu = 0.40312(46)$ . Conseqüentemente, o valor do expoente crítico é  $\nu = 1/(1/\nu) \pm (1/\nu)^2 \Delta(1/\nu) = 2.480651(75)$ . Após estimarmos o expoente crítico  $\nu$  podemos utilizar a Equação (2.58) para determinar  $T_c$  como a extrapolação para uma rede de tamanho infinito ( $L \rightarrow \infty$ , em que  $L^{-1/\nu} = 0$ ) dos ajustes lineares das localizações dos máximos das funções definidas pelas equações (2.54)-(2.57), conforme o lado direito da Figura 5.10, onde este conjunto de ajustes convergem para  $T_c$ . O valor final para a temperatura crítica encontrado foi  $T_c = 0.20361(22)$ .

Com a estimativa do expoente crítico  $\nu$  e da temperatura crítica  $T_c$ , podemos calcular os expoentes críticos  $\gamma$  e  $\beta$ . Segundo a Equação (2.43), o máximo da susceptibilidade numa rede de tamanho finito definida pela Equação (2.54) é assintoticamente proporcional a  $L^{\gamma/\nu}$ . No lado esquerdo da Figura 5.11 está o gráfico do ajuste linear e obtemos  $\gamma/\nu = 1.1991(44)$  e calculamos então  $\gamma = \nu(\gamma/\nu) \pm \Delta\gamma = 2.974(11)$ , em que  $\Delta\gamma = (\gamma/\nu)\Delta\nu + \nu\Delta(\gamma/\nu)$ . De modo análogo, para calcular o expoente crítico  $\beta$  utilizamos a Equação (2.45) para estimar a razão  $\beta/\nu$  a partir das propriedades de escala do parâmetro de ordem. No lado direito da Figura 5.11 apresentamos o ajuste linear destes pontos e encontramos um coeficiente de inclinação  $\beta/\nu = 0.00868(66)$  e, portanto, calculamos  $\beta = \nu(\beta/\nu) \pm \Delta\beta = 0.0215(16)$ , onde  $\Delta\beta$  é calculada da mesma maneira que  $\Delta\gamma$ . Dessa forma, vemos que os expoentes críticos não obedecem uma lei de escala e não se encaixam em nenhuma classe de universalidade, indicando a necessidade de um estudo teórico para sistemas unidimensionais.



**Figura 5.11:** Dependência do logaritmo da susceptibilidade magnética (a esquerda) e da magnetização (a direita) com o logaritmo do tamanho de rede na temperatura crítica.

---

## CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS FUTURAS

---

Neste trabalho estudamos o modelo de Baxter-Wu em uma rede unidimensional através de simulações entrópicas pelo comportamento das quantidades termodinâmicas como função da temperatura e campo externo. Os diagramas de fases do modelo de Baxter-Wu unidimensional apresentam três regiões de configurações de estados ordenados, formadas pelas fases ferromagnética positiva, ferromagnética negativa e as fases ferrimagnéticas. As regiões de interface entre as configurações de estados ordenados, encontram-se em torno dos valores de campo  $H = 0$  e  $H = -3$ . No regime de altas temperaturas, o modelo se encontra na fase paramagnética. Neste trabalho também adotamos uma nova abordagem para estudar o modelo na região de campo externo  $H = 0$ , no qual definimos um parâmetro de ordem como sendo a soma dos módulos da magnetização das sub-redes do sistema. Isto nos permitiu diferenciar as quatro fases ordenadas da fase desordenada em campo externo nulo e calcular diretamente a função de partição para redes de tamanhos pequenos. O nosso sistema apresentou um efeito de tamanho finito no comportamento do parâmetro de ordem e da susceptibilidade e uma transição de fase contínua. Com o uso de simulações entrópicas e da teoria de escala de tamanho finito, calculamos a temperatura crítica que apresenta o valor  $T_c = 0.20361(22)$  e obtivemos os expoentes críticos  $\nu = 2.480651(75)$ ,  $\gamma = 2.974(11)$  e  $\beta = 0.0215(16)$ , sendo que esses expoentes não obedecem uma lei de escala e não se encaixam em nenhuma classe de universalidade, indicando a necessidade de um estudo teórico para sistemas unidimensionais. A natureza do tipo de transição entre as fases de estados ordenados ainda é desconhecida, sendo necessário mais estudos para a sua determinação. Portanto, como perspectiva futura do trabalho, buscaremos determinar a natureza das transições entre as configurações ferromagnética positiva e ferrimagnética e entre as configurações ferrimagnética e ferromagnética negativa.

---

## REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

---

- [1] JORGE, L. N. **Simulações Entrópicas do Modelo de Baxter-Wu**. Tese (Doutorado), 2017. Citado 2 vezes nas páginas 13 e 36.
- [2] WOOD, D. W.; GRIFFITHS, H. P. A self dual relation for an Ising model with triplet interactions. **Journal of Physics C: Solid State Physics**, IOP Publishing, v. 5, n. 18, p. L253–L255, sep 1972. Disponível em: <<https://doi.org/10.1088%2F0022-3719%2F5%2F18%2F001>>. Citado 3 vezes nas páginas 17, 34 e 35.
- [3] BAXTER, R. J.; WU, F. Y. Exact solution of an Ising model with three-spin interactions on a triangular lattice. **Phys. Rev. Lett.**, American Physical Society, v. 31, p. 1294–1297, Nov 1973. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.31.1294>>. Citado 2 vezes nas páginas 17 e 34.
- [4] BAXTER, R.; WU, F. Ising model on a triangular lattice with three-spin interactions. i. the eigenvalue equation. **Australian Journal of Physics**, CSIRO, v. 27, n. 3, p. 357–368, 1974. Citado 2 vezes nas páginas 17 e 34.
- [5] BAXTER, R. Ising model on a triangular lattice with three-spin interactions. ii. free energy and correlation length. **Australian Journal of Physics**, CSIRO, v. 27, n. 3, p. 369–382, 1974. Citado 2 vezes nas páginas 17 e 34.
- [6] JORGE, L. N.; FERREIRA, L. S.; CAPARICA, A. A. Three-dimensional Baxter-Wu model. **Phys. Rev. E**, American Physical Society, v. 100, p. 032141, Sep 2019. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.100.032141>>. Citado 3 vezes nas páginas 17, 28 e 36.
- [7] CAVALCANTE, M.; PLASCAK, J. Baxter–Wu model according to a mean-field approach. **Physica A: Statistical Mechanics and its Applications**, v. 518, p. 111 – 118, 2019. ISSN 0378-4371. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0378437118315000>>. Citado 2 vezes nas páginas 17 e 37.
- [8] NEWMAN, M.; BARKEMA, G. **Monte Carlo methods in statistical physics**. [S.l.]: Oxford University Press: New York, USA, 1999. Citado 2 vezes nas páginas 17 e 20.
- [9] 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: <<https://doi.org/10.1063/1.1699114>>. Citado 2 vezes nas páginas 17 e 30.
- [10] WANG, F.; LANDAU, D. P. Determining the density of states for classical statistical models: A random walk algorithm to produce a flat histogram. **Phys. Rev. E**, American Physical Society, v. 64, p. 056101, Oct 2001. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.64.056101>>. Citado 2 vezes nas páginas 17 e 30.

- [11] 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: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.86.2050>>. Citado 3 vezes nas páginas 17, 18 e 30.
- [12] LANDAU, D. P.; TSAI, S.-H.; EXLER, M. A new approach to Monte Carlo simulations in statistical physics: Wang-Landau sampling. **American Journal of Physics**, v. 72, n. 10, p. 1294–1302, 2004. Disponível em: <<https://doi.org/10.1119/1.1707017>>. Citado 2 vezes nas páginas 18 e 32.
- [13] HUANG, K. **Statistical mechanics**. [S.l.: s.n.], 1987. 512 p. Citado 2 vezes nas páginas 19 e 25.
- [14] LANDAU, D. P.; BINDER, K. **A guide to Monte Carlo simulations in statistical physics**. [S.l.]: Cambridge university press, 2014. Citado 2 vezes nas páginas 20 e 23.
- [15] BINNEY, J. J. et al. **The theory of critical phenomena: an introduction to the renormalization group**. [S.l.]: Oxford University Press, 1992. Citado na página 22.
- [16] UZUNOV, D. I. **Introduction to the theory of critical phenomena: mean field, fluctuations and renormalization**. [S.l.]: World Scientific, 1993. Citado na página 23.
- [17] PATHRIA, R.; BEALE, P. D. **Statistical mechanics, 1996**. [S.l.: s.n.]. v. 32. Citado na página 24.
- [18] 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: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.28.1516>>. Citado na página 27.
- [19] CAPARICA, A. A.; CUNHA-NETTO, A. G. Wang-Landau sampling: Improving accuracy. **Phys. Rev. E**, American Physical Society, v. 85, p. 046702, Apr 2012. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.85.046702>>. Citado 3 vezes nas páginas 27, 31 e 32.
- [20] JORGE, L. et al. Critical behavior of the spin-1/2 baxter-wu model: Entropic sampling simulations. **Brazilian Journal of Physics**, Springer, v. 46, n. 5, p. 556–564, 2016. Citado na página 27.
- [21] CHEN, K.; FERRENBERG, A. M.; LANDAU, D. P. Static critical behavior of three-dimensional classical Heisenberg models: A high-resolution Monte Carlo study. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 48, p. 3249–3256, Aug 1993. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.48.3249>>. Citado 2 vezes nas páginas 27 e 28.
- [22] 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: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.62.9458>>. Citado 2 vezes nas páginas 27 e 28.

- [23] CAPARICA, A.; LEÃO, S. A.; DASILVA, C. J. Static critical behavior of the  $q$ -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 na página 27.
- [24] VLADIMIR, P. **Finite Size Scaling and Numerical Simulation of Statistical Systems**. [S.l.]: World Scientific, 1990. Citado 2 vezes nas páginas 28 e 29.
- [25] CHALLA, M. S. S.; LANDAU, D. P.; BINDER, K. Finite-size effects at temperature-driven first-order transitions. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 34, p. 1841–1852, Aug 1986. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.34.1841>>. Citado na página 29.
- [26] LEE, J.; KOSTERLITZ, J. M. Finite-size scaling and Monte Carlo simulations of first-order phase transitions. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 43, p. 3265–3277, Feb 1991. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.43.3265>>. Citado na página 29.
- [27] JORGE, L.; FERREIRA, L.; CAPARICA, A. On the order of the phase transition in the spin-1 Baxter–Wu model. **Physica A: Statistical Mechanics and its Applications**, v. 542, p. 123417, 2020. ISSN 0378-4371. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0378437119319089>>. Citado 2 vezes nas páginas 29 e 35.
- [28] SCHNABEL, S. et al. Microcanonical entropy inflection points: Key to systematic understanding of transitions in finite systems. **Phys. Rev. E**, American Physical Society, v. 84, p. 011127, Jul 2011. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.84.011127>>. Citado na página 29.
- [29] MARTINOS, S.; MALAKIS, A.; HADJIAGAPIOU, I. Finite-size scaling at first- and second-order phase transitions of Baxter–Wu model. **Physica A: Statistical Mechanics and its Applications**, v. 355, n. 2, p. 393 – 407, 2005. ISSN 0378-4371. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0378437105001895>>. Citado na página 35.
- [30] NOVOTNY, M. A.; LANDAU, D. P. Critical behavior of the Baxter-Wu model with quenched impurities. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 24, p. 1468–1481, Aug 1981. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.24.1468>>. Citado na página 35.
- [31] SANTOS, M.; FIGUEIREDO, W. Critical dynamics of the Baxter-Wu model. **Phys. Rev. E**, American Physical Society, v. 63, p. 042101, Mar 2001. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.63.042101>>. Citado na página 35.
- [32] MERMIN, N. D.; WAGNER, H. Absence of ferromagnetism or antiferromagnetism in one- or two-dimensional isotropic Heisenberg models. **Phys. Rev. Lett.**, American Physical Society, v. 17, p. 1133–1136, Nov 1966. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.17.1133>>. Citado na página 37.
- [33] SALINAS, S. R. **Introdução a física estatística vol. 09**. [S.l.]: Edusp, 1997. Citado na página 37.

- [34] BAXTER, R. J. **Exactly solved models in statistical mechanics**. [S.l.]: Elsevier, 2016. Citado na página 37.
- [35] FERREIRA, L. S. et al. **Unveiling phase transitions in 1D systems with short-range interactions**. 2019. Disponível em: <<https://arxiv.org/abs/1911.05475>>. Citado na página 37.