



Universidade Federal de Goiás
Instituto de Física

LUCAS NUNES JORGE

Simulações Entrópicas do Modelo de Baxter-Wu

Goiânia - GO
2017

**TERMO DE CIÊNCIA E DE AUTORIZAÇÃO 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 nº 9610/98, 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.

1. Identificação do material bibliográfico: Dissertação Tese

2. Identificação da Tese ou Dissertação:

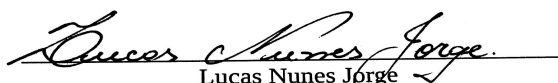
Nome completo do autor: Lucas Nunes Jorge

Título do trabalho: **Simulações Entrópicas do Modelo de Baxter-Wu**

3. Informações de acesso ao documento:

Concorda com a liberação total do documento SIM NÃO

Havendo concordância com a disponibilização eletrônica, torna-se imprescindível o envio do(s) arquivo(s) em formato digital PDF da tese ou dissertação.



Lucas Nunes Jorge
Professor do IFMT- Campus Cáceres/Prof. Olegário Baldo
Doutorando em Física – IF/UFG

Ciente e de acordo:



Prof. Dr. Álvaro de Almeida Caparica

Data: 28/ 07/ 2017

LUCAS NUNES JORGE

Simulações Entrópicas do Modelo de Baxter-Wu

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

Área de pesquisa: Física Estatística

Orientador: Prof. Dr. Álvaro de Almeida Caparica

Goiânia - GO
2017

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

Nunes Jorge, Lucas
Simulações Entrópicas do Modelo de Baxter-Wu [manuscrito] / Lucas
Nunes Jorge. - 2017.
CXXII, 122 f.: il.

Orientador: Prof. Álvaro de Almeida Caparica.
Tese (Doutorado) - Universidade Federal de Goiás, Instituto de
Física (IF), Programa de Pós-Graduação em Física, Goiânia, 2017.
Bibliografia.
Inclui gráfico, tabelas.

1. Amostragem Entrópica. 2. Modelo de Baxter-Wu. 3. Classe de
Universalidade. 4. Temperatura Crítica. I. Caparica, Álvaro de Almeida,
orient. II. Título.

CDU 531.21



Universidade Federal de Goiás
Instituto de Física
Programa de Pós-Graduação em Física

Ata Nº 32 de defesa de tese de
Lucas Nunes Jorge para obtenção
do título de Doutor em Física.

Aos 04 dias do mês de agosto de 2017, às 09h00min, no Miniauditório do Instituto de Física da UFG, reuniu-se a Banca Examinadora designada pela Coordenadoria do Programa de Pós-Graduação em Física, composta pelo Prof. Dr. Álvaro de Almeida Caparica (orientador e presidente da Banca – IF/UFG), Prof. Dr. José Ricardo de Sousa (ICE/UFAM), Prof. Dr. Maurício Godoy (IF/UFMT), Prof. Dr. Hermann Freire Ferreira Lima e Silva (IF/UFG) e Prof. Dr. Renato Pessoa Vale (IF/UFG) para julgar a tese de doutorado de Lucas Nunes Jorge, intitulada: “Simulações entrópicas do modelo de Baxter-Wu”. O Presidente abriu os trabalhos agradecendo a presença dos membros da Banca Examinadora e concedeu a palavra a Lucas Nunes Jorge, que expôs detalhadamente seu trabalho. Em seguida, os membros da Banca fizeram suas considerações e procederam à arguição do candidato. Concluída essa etapa, a Banca, em sessão fechada, deu prosseguimento ao julgamento do trabalho, atribuindo os seguintes conceitos:

Prof. Dr. Álvaro de Almeida Caparica (orientador)

Aprovado

Prof. Dr. José Ricardo de Sousa (ICE/UFAM)

APROVADO

Prof. Dr. Maurício Godoy (IF/UFMT)

APROVADO

Prof. Dr. Hermann Freire Ferreira Lima e Silva (IF/UFG)

APROVADO

Prof. Dr. Renato Pessoa Vale (IF/UFG)

APROVADO

Novamente em sessão aberta, o presidente da Banca anunciou o resultado final do julgamento, declarando o candidato **Lucas Nunes Jorge** aprovado pela Banca Examinadora. Nada mais havendo a tratar, a sessão foi encerrada e lavrou-se a presente ata que segue assinada pelos membros da Banca Examinadora.

Goiânia, 04 de agosto de 2017.

Prof. Dr. Álvaro de A. Caparica

Prof. Dr. José R. de Sousa

Prof. Dr. Maurício Godoy

Prof. Dr. Hermann F. F. Lima e Silva

Prof. Dr. Renato Pessoa Vale

A meus pais, Carlos e Denise.

AGRADECIMENTOS

Agradeço primeiramente a Deus por me levar à caminhos maiores do que eu poderia imaginar. Pela oportunidade de conhecer pessoas extraordinárias;

Ao professor Álvaro Caparica pela paciência, dedicação na excelente orientação neste doutorado e pela amizade que criamos ao longo destes quatro anos de trabalho;

Ao Lucas Souza pela companhia, pelas longas horas de discussão enquanto tentávamos compreender os mistérios do modelo de Baxter-Wu. Um grande amigo, conselheiro, dotado de uma perspicácia peculiar. Minha gratidão;

À Samára Jorge, minha amada esposa, pelo apoio e pela paciência que tem tido com minha ansiedade nestes quatro anos. Só o amor é o que ajudou-nos a nos manter firmes e pacientes um com o outro;

Aos professores Salviano Leão, Nicodemos Teixeira e Maria Lúcia de Moares Costa, pelas nossas conversas que muito enriqueceram este trabalho;

Aos amigos, Gustavo Capistrano, Victor Romero, Emanuel Melo, Fernando Carvalho, Leandro Tolentino e outros tantos, com os quais compartilhei o RU, momentos no café e a Copa do Mundo de 2014;

Aos irmãos da Congregação Cristã no Brasil, da Vila Itatiaia, pelo apoio e orações;

À Adriel Silva, Jones Queiroz, Wesley Souza, certo de que contei com o apoio e orações de vocês;

À minha família pelo apoio, paciência e por suportarem a saudade que a distância proporciona.

À UFG e ao programa de Pós-Graduação em Física pela oportunidade.

Ao Instituto Federal de Educação de Mato Grosso - Campus Cáceres - Prof. Olegário Baldo, por me conceder o afastamento sem o qual seria impossível fazer este doutorado;

Ao Instituto de Física da Universidade Federal de Mato Grosso por ter me dado acesso ao cluster de computadores, sem o qual dificilmente eu realizaria as numerosas simulações;

Em especial ao contribuinte brasileiro que, através da Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de Goiás - FAPEG, financiou a minha pesquisa.

“As portas do espírito só se abrem à perfeita sinceridade de propósitos.”

– Prof. Olavo de Carvalho

RESUMO

Neste trabalho, utilizamos uma técnica de amostragem entrópica com refinamentos baseada no método de Wang-Landau e técnicas de escala de tamanho finito para estudar variações do modelo de Baxter-Wu, a saber: spin-1/2, spin-1, spin-1 na presença de anisotropia de campo cristalino, onde também foi feita uma proposta tridimensional para o modelo. Foram verificadas também características no parâmetro de ordem a ser adotado nas simulações. A classe de universalidade e a temperatura crítica foram calculadas para o caso spin-1/2, e os resultados encontrados tiveram boa concordância com os resultados exatos que constam na literatura. Buscou-se determinar o tipo de transição de fase que o modelo descreve para o caso spin-1, sendo feito um detalhado estudo para transições de fases contínua e descontínua. O modelo de Baxter-Wu com interação do campo cristalino, D , teve o seu diagrama de fases construído, bem como a determinação do ponto em que terminam as transições descontínuas. O expoente crítico, ν , foi avaliado para diversos valores do campo cristalino, onde verificamos a sua variação ao longo da linha crítica, com o aparecimento de um pico, corroborando a existência de um comportamento multicrítico do modelo. Observamos também uma anomalia no calor específico, que pode ser associada ao defeito Schottky. Essa anomalia aparece de maneira mais significativa para valores de $D \geq 1.990$. No estudo do parâmetro de ordem, verificamos que nas simulações não se deve, ao considerar tamanhos de redes múltiplos de três, utilizar o parâmetro de ordem como a magnetização total da rede, mas tomar a magnetização por sub-redes. Ao se trabalhar com tamanhos de redes que não sejam múltiplos de três, não há problema em adotá-lo como a magnetização total da rede. Foi feita também uma proposta tridimensional para o modelo de Baxter-Wu, e foi caracterizada a sua transição de fases.

Palavras - chave: Amostragem Entrópica, Modelo de Baxter-Wu, Classe de Universalidade, Temperatura Crítica.

ABSTRACT

In this work, we used a refined entropy sampling technique based on the Wang-Landau method and finite-size scaling techniques to study variations of the Baxter-Wu model, namely: spin-1/2, spin-1, spin-1 with the crystal field interaction and was done a three-dimensional proposal for the model. It was also verified characteristics in the order parameter to be adopted in the simulations. The universality class and the critical temperature were calculated for the spin-1/2 case, and the results founded were in good agreement with the exact ones found in the literature. We sought to determine the kind of the phase transition that the model suffers for the spin-1 case, being carried out a detailed study for continuous and discontinuous phase transitions. The Baxter-Wu model with crystal field, D , had its phase diagram constructed, as well as the determination of the point at which discontinuous transitions finalizes. The critical exponent, ν , was evaluated for several values of the crystal field, where we verified is variation along the critical line, with the existence of a peak, corroborating the existence of a multicritical behavior of the model. We also observed the existence of an anomaly in the specific heat, associated to the Schottky defect. This anomaly appears more clearly for values of $D \geq 1.990$. In the study of the order parameter, we verified that in the simulations one should not, when considering lattice sizes multiple of three, use the order parameter as the total magnetization of the lattice, but to consider the magnetization by sub-lattices. When working with sizes of lattices that are not multiples of three, it is not a problem to adopt the order parameter as the total magnetization of the lattice. A three-dimensional proposal was also made for the Baxter-Wu model, and its phase transition was characterized.

Key - words: Entropic Sampling, Baxter-Wu Model, Universality Class, Critical Temperature.

SUMÁRIO

| | |
|---|-----------|
| Capítulo 1: Introdução | 23 |
| Capítulo 2: Revisão da Literatura | 27 |
| 2.1 Amostragem de Grandezas Físicas e o Método de Monte Carlo | 27 |
| 2.2 Transições de Fases e Fenômenos Críticos | 30 |
| 2.2.1 Expoentes Críticos | 32 |
| 2.3 Teoria de Escala de Tamanho Finito | 33 |
| 2.4 Transição de fase de primeira ordem | 37 |
| 2.5 Pontos de Inflexão Microcanônicos da Entropia | 40 |
| Capítulo 3: Simulação Entrópica | 43 |
| 3.1 O Princípio da Simulação Entrópica | 43 |
| 3.2 Simulação entrópica e o método de Wang-Landau | 44 |
| 3.2.1 Médias termodinâmicas | 48 |
| 3.3 Simulação entrópica para uma densidade de estados conjunta | 49 |
| Capítulo 4: Modelo de Baxter-Wu | 51 |
| 4.1 O Modelo de Baxter-Wu spin-1/2 | 52 |
| 4.1.1 Parâmetro de Ordem no Modelo de Baxter-Wu | 55 |
| 4.1.2 Simulações | 57 |
| 4.2 O Modelo de Baxter-Wu spin -1 | 59 |
| 4.3 O Modelo de Baxter-Wu spin-1 com interação do campo cristalino | 59 |
| 4.4 O Modelo de Baxter-Wu 3D | 61 |
| Capítulo 5: Resultados | 65 |
| 5.1 Modelo de Baxter-Wu Spin-1/2 | 65 |
| 5.1.1 Coeficientes a e b da divergência do inverso da temperatura microcanônica | 70 |
| 5.2 Modelo de Baxter-Wu Spin-1 Puro | 72 |
| 5.2.1 Comportamento de Transição Contínua | 78 |
| 5.2.2 Comportamento de Transição Descontínua | 80 |
| 5.2.3 Configurações na temperatura de transição | 85 |
| 5.3 O Modelo de Baxter-Wu Spin-1 com Interação do Campo Cristalino | 87 |

| | | |
|--------------------|---|------------|
| 5.3.1 | Diagrama de Fases | 92 |
| 5.3.2 | Interpretação do Diagrama de Fases | 95 |
| 5.3.3 | Evolução do expoente crítico ν ao longo da linha crítica | 97 |
| 5.3.4 | Anomalia no calor específico para campo cristalino grande na região de primeira ordem | 99 |
| 5.4 | Modelo de Baxter-Wu $3D$ Spin-1/2 | 102 |
| Capítulo 6: | Considerações Finais e Projetos Futuros | 109 |

INTRODUÇÃO

Os modelos de spins têm importantes papéis na Mecânica Estatística uma vez que proporcionam a representação de sistemas ideais para o estudo das transições de fases e dos fenômenos críticos em materiais reais [1]. Historicamente, temos o modelo de Ising, que foi proposto por Lenz a seu aluno de doutorado Ernst Ising [2, 3], sendo precursor para o estudo e caracterização de sistemas magnéticos. Como modelo inicial, o modelo de Ising trata da transição de fase que ocorre em um ferromagneto simples cujas interações entre os momentos magnéticos, ou spins, ocorrem aos pares. A solução exata em uma rede quadrada com campo externo nulo foi resolvida por Onsager, em 1944 [4]. Posteriormente, vários modelos foram propostos, por exemplo o modelo de oito vértices, resolvido exatamente por Baxter [5], o modelo de Heisenberg [6], Blume-Capel (BC) [7, 8] e o modelo de Baxter-Wu (BW) [9].

Embora menos conhecido que o modelo de Ising, o modelo BW tem grande importância na Física Estatística. Exibindo uma transição contínua para o caso spin-1/2, ele teve a sua solução exata para a temperatura crítica e expoentes críticos obtida por Baxter e Wu em 1973 [10, 11, 12]. A temperatura crítica encontrada foi a mesma do modelo de Ising na rede quadrada e os expoentes críticos os mesmos do modelo de Potts de 4-estados. Ao longo do tempo o modelo BW tem sido estudado considerando tamanhos de redes múltiplos de três, e a rede como um todo sendo dividida em três sub-redes. Nunca havia sido considerado trabalhar com redes que não fossem múltiplas de três. É feita a divisão em sub-redes porque desta forma pode-se definir o seu parâmetro de ordem como a raiz quadrada média da magnetização por sub-redes [13, 14]. Entretanto, em outros trabalhos [15, 16, 17, 18, 19, 20], considerou-se apenas a magnetização total da rede. Deste modo, tem-se a vantagem de não ter que dividir o sistema em sub-redes. Sendo assim, neste trabalho, teceremos algumas considerações quanto ao tipo de rede e qual o parâmetro de ordem ideal a ser utilizado. Diversos modelos de spins possuem análogos em três dimensões, porém, desde que foi proposto o modelo BW não possui nenhuma formulação deste tipo. Sendo assim, neste trabalho, também será proposta uma extensão tridimensional para este modelo. Para o caso spin-1, onde $s_i = \pm 1, 0$, ao se

considerar a anisotropia do campo cristalino, trabalhos anteriores [21, 22], concordam com um diagrama de fases muito parecido com o do modelo de Blume-Capel [21, 22], que tem um diagrama de fases da temperatura versus campo cristalino que apresenta um ponto onde três fases se tornam iguais, o ponto tricrítico. Este ponto é bem determinado na literatura com diversos trabalhos que o corroboram [23, 24]. Para o modelo BW, a presença de um ponto multicrítico em seu diagrama de fases, no entanto, ainda não é bem determinada. Dois trabalhos teóricos foram realizados na busca da sua localização exata. Utilizando técnicas de grupo de renormalização, teoria de escala de tamanho finito e invariância conforme, Costa e colaboradores, em 2004 [21], e Dias e colaboradores, em 2017 [22], construíram o diagrama de fases do modelo e estimar a localização do ponto multicrítico. Neste trabalho, utilizaremos simulações entrópicas e teoria de escala de tamanho finito, e construiremos também um diagrama de fases para o modelo de Baxter-Wu com spin-1.

A simulação entrópica é um procedimento de Monte Carlo (MC) em que as simulações computacionais podem ser realizadas sem fixar uma temperatura, como é o caso do método de amostragem por importância de Metropolis [25]. Algumas das vantagens da simulação entrópica são evitar a desaceleração crítica que ocorre nas transições contínuas e superar o tunelamento das barreiras de energia livre existentes entre fases coexistentes na temperatura de transições descontínuas. Para citar alguns trabalhos, temos o método multicanônico [26, 27], a amostragem entrópica de Lee [28] e o método *broad histogram* [29, 30]. Nestes métodos, busca-se estimar $\ln g(E)$, onde $g(E)$ é a densidade de estados. Esta sequência de trabalhos favoreceu a formulação do método de amostragem entrópica de Wang-Landau (WL) [31, 32]. O método de WL estima diretamente a densidade de estados através de um caminho aleatório no espaço das energias e amostra as configurações com uma probabilidade proporcional ao recíproco da densidade de estados. Quando comparado com soluções exatas, seus resultados são impressionantes, de modo que é impossível distinguir visualmente um do outro [33]. Devido à sua capacidade de lidar com uma paisagem de energia complexa, juntamente com a facilidade de implementação para aplicações, este método tem sido amplamente utilizado em diferentes áreas de física e química, incluindo sistemas magnéticos [23], dobramento de proteína [34, 35], simulações de fluidos [36], e também sistemas quânticos [37, 38]. Particularmente para o estudo das transições de fase, o método de WL sugere uma maneira eficiente de superar a questão da dinâmica lenta nas simulações convencionais de MC. No entanto, se a densidade de estados é usada para calcular médias canônicas, por exemplo, para a temperatura do pico do calor específico, diferentes rodadas levam a resultados bastante diferentes com uma distribuição gaussiana [39]. A precisão do método aumenta se a densidade de estados for atualizada somente após cada passo de Monte Carlo (MCS), evitando tomar configurações correlacionadas e as médias microcanônicas começam a ser acumuladas a partir do oitavo nível de WL (f_7), uma vez que, no início, as configurações

não correspondem às de máxima entropia [39]. Devido a esse comportamento, para se obter bons resultados nos procedimentos de escala de tamanho finito, é necessário realizar pelo menos dez estudos independentes e, em seguida, tomar uma média sobre todos os conjuntos [40]. Essas melhorias foram aplicadas a modelos simples com soluções analíticas exatas como polímeros [41, 42] e dímeros [43], o comportamento de escala de tamanho finito da temperatura inversa no estado fundamental [44] e em estudos de alta resolução do modelo de Potts q -estados [45].

Neste trabalho, nos concentramos nos fenômenos críticos e examinaremos a eficácia do método de WL com melhorias na análise do comportamento crítico do modelo BW. Para isso, no Capítulo 2, faremos uma revisão da amostragem de grandezas físicas e o método de MC, bem como da teoria de escala de tamanho finito. Os detalhes dos procedimentos da simulação entrópica serão apresentados no Capítulo 3. A descrição do Modelo BW e as suas variações aqui estudadas serão detalhadas no Capítulo 4. Os resultados serão apresentados no Capítulo 5 e discutidos a medida que estão sendo mostrados. Por último, no Capítulo 6, serão feitas as considerações gerais sobre os projetos futuros.

REVISÃO DA LITERATURA

2.1 Amostragem de Grandezas Físicas e o Método de Monte Carlo

A simulação computacional tornou-se essencial para a física da matéria condensada, principalmente no estudo das transições de fases e fenômenos críticos. Uma das razões é que ela abre as portas para a análise de modelos teóricos mais sofisticados, mais realistas e mais complexos, cujas soluções analíticas podem ser difíceis de serem obtidas. Desta maneira, a simulação computacional, em conjunto dos métodos experimentais e teóricos têm contribuído para uma melhor compreensão da natureza. Os métodos computacionais mais comuns são a Dinâmica Molecular (DM) [46] e o método de Monte Carlo [47, 48, 49, 25]. O primeiro está associado a situações de caráter determinístico via integração direta das equações de movimento do sistema, ao passo que o segundo tem como característica ser um método estocástico, onde pode-se obter os valores esperados das grandezas físicas do sistema a partir das probabilidades das configurações do próprio sistema. As simulações de MC são utilizadas para calcular valores esperados $\langle Q \rangle$ de grandezas termodinâmicas tais como energia interna e a magnetização em sistemas magnéticos. Para uma quantidade Q , que pode variar no tempo, podemos escrever o seu valor esperado como

$$\langle Q \rangle = \sum_m Q_m \omega_m(t), \quad (2.1)$$

onde Q_m é o valor do observável Q quando o sistema se encontra no estado m e $\omega_m(t)$ denota um conjunto de pesos que representam a probabilidade do sistema estar em um estado m num instante t . Uma vez que para qualquer valor no tempo o sistema deve estar necessariamente em algum estado, temos que as probabilidades $\omega_m(t)$ devem obedecer às condições

$$\omega_m(t) \geq 0, \quad \sum_m \omega_m(t) = 1. \quad (2.2)$$

Como os pesos probabilísticos carregam a informação de como o sistema evolui, podemos escrever também uma equação que representa a evolução temporal de $\omega_m(t)$ em termos da probabilidade do sistema transicionar de um estado inicial m para um estado final l em um intervalo dt , definida na forma $P(m \rightarrow l)dt$, com $P(m \rightarrow l)$ sendo a taxa de transição do estado m para o estado l . Assim temos a equação mestra para a evolução de $\omega_m(t)$ em termos de $P(m \rightarrow l)$, escrita por

$$\frac{d\omega_m(t)}{dt} = \sum_l [\omega_l(t)P(l \rightarrow m) - \omega_m(t)P(m \rightarrow l)]. \quad (2.3)$$

No lado direito dessa equação, o primeiro termo representa a taxa com que o sistema sofre transições para o estado m , e o segundo termo representa a taxa com que o sistema muda do estado m para um outro estado l .

Se o sistema alcançar um patamar em que os dois termos no lado direito da equação 2.3 se cancelam para todo l , os pesos $\omega_m(t)$ serão constantes no tempo. Neste caso é considerado que o sistema se encontra no estado *estacionário*, que matematicamente é representado por

$$\omega_l(t)P(l \rightarrow m) = \omega_m(t)P(m \rightarrow l). \quad (2.4)$$

Esta equação representa a condição do *balanço detalhado*. Os valores que os pesos ω_m assumem no equilíbrio são chamados de probabilidades de ocupação de equilíbrio [48] e, para um estado qualquer m , são dados por

$$p_m = \lim_{t \rightarrow \infty} \omega_m(t). \quad (2.5)$$

Uma escolha adequada para os pesos das probabilidades de ocupação é a distribuição de Boltzmann. Inicialmente, Gibbs, em 1902 [50], demonstrou pelo ensemble canônico que para um sistema em equilíbrio térmico com um reservatório à temperatura absoluta T , as probabilidades de ocupação (conhecidas como probabilidades de Boltzmann) são dadas por

$$p_m = \frac{1}{Z} e^{-E_m/kT}, \quad (2.6)$$

onde E_m é a energia do estado m e k é a constante de Boltzmann, cujo valor é $1,38 \times 10^{-23} JK^{-1}$. É comum utilizar a notação abreviada $\beta = 1/kT$. Z é uma constante de normalização associada a probabilidade p_m , conhecida como *função de partição*. Para que a condição $\sum_m p_m = 1$ seja obedecida, temos que a função de partição deve ser definida por

$$Z = \sum_m e^{-\beta E_m}, \quad (2.7)$$

cuja soma é sobre todos os microestados m do sistema.

Substituindo a Eq. 2.6 na 2.1, temos que o valor esperado de uma quantidade Q

para um sistema em equilíbrio é

$$\langle Q \rangle = \frac{1}{Z} \sum_m Q_m e^{-\beta E_m}. \quad (2.8)$$

Uma vez que a somatória na Eq. 2.8 é feita sobre todos os estados do sistema, é praticamente impossível calcular $\langle Q \rangle$ para um sistema com um número muito grande de estados. Por exemplo, no modelo de Ising em uma rede quadrada com N sítios, a soma deve ser feita sobre as 2^N configurações possíveis. Se considerarmos N grande, é praticamente impossível utilizar a Eq. 2.8 para realizar cálculos numéricos. Um dos meios possíveis para realizarmos tal medida é o seguinte: em vez de tomarmos todas as configurações possíveis, pode-se realizar a soma considerando apenas as configurações mais importantes, onde cada estado do sistema pode ser escolhido com uma certa probabilidade. Esse método é conhecido como amostragem por importância [47, 48]. Por exemplo, podemos construir uma amostra de estados de um sistema, onde qualquer estado pode ser escolhido para compô-la com uma probabilidade proporcional ao peso de Boltzmann. Escolhendo um subconjunto com M estados $(\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_M)$, o cálculo do valor esperado $\langle Q \rangle$ se reduz a uma média aritmética simples sobre os M estados escolhidos:

$$Q_M = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M Q_{\mu_i}. \quad (2.9)$$

Para que a média Q_M forneça estados de acordo com a distribuição de Boltzmann, Eq. 2.6, utiliza-se o processo de Markov a fim de escolher um conjunto de configurações independentes umas das outras. O processo markoviano consiste em gerar de modo aleatório um novo estado l a partir de um estado inicial m de acordo com a probabilidade de transição $P(m \rightarrow l)$. A energia dos estados m e l são respectivamente E_m e E_l e a probabilidade de transição deve satisfazer as seguintes condições:

- não variar com o tempo;
- depender somente dos estados m e l e não dos estados anteriores;
- o processo deve evoluir de modo que obedeça a condição de ergodicidade. A condição ergódica impõe que um determinado estado seja alcançado, a partir de um estado inicial qualquer, para um tempo computacional suficiente.
- a condição de equilíbrio define que a taxa com que o sistema sofre transições de m para qualquer outro estado e de qualquer estado para m deve ser a mesma.

Como as probabilidades p_m e p_l são dadas pela Eq. 2.6, a equação do balanço detalhado resulta em

$$\frac{P(m \rightarrow l)}{P(l \rightarrow m)} = e^{-\beta(E_l - E_m)}, \quad (2.10)$$

garantindo assim a distribuição de Boltzmann no equilíbrio.

2.2 Transições de Fases e Fenômenos Críticos

Alguns dos precursores do estudo das transições de fases e fenômenos críticos foram Joseph Black [51], que, por volta de 1762 na Escócia, mediu o calor específico e o calor latente. Charles de la Tour [51] publicou na Irlanda um artigo em 1822 em que reportava a descoberta de uma fase fluida supercrítica, iniciando, assim, o estudo dos fenômenos críticos. Thomas Andrews em seu trabalho “On the Continuity of the Gaseous and Liquid States of Matter” [52] estudou a curva pressão-volume da linha de coexistência líquido-vapor do gás carbônico e encontrou o seu ponto crítico. Quatro anos depois, Johannes Diderik Van der Waals propôs uma generalização para a equação de estado do gás ideal [53]. James Clerk Maxwell refinou esta teoria em 1875 [54, 55], propondo a lei das áreas iguais, para explicar o comportamento experimental de um fluido real.

Ainda no que concerne aos fluidos, temos o trabalho de Josiah Williard Gibbs [56], em que ele desenvolveu um método brilhante para descrever as fases sólida, líquida e gasosa de fluidos simples, conhecida como a regra de fases de Gibbs. Seu método é capaz de prever a existência de linhas de coexistência, linhas triplas, pontos triplos e pontos críticos. No ferromagnetismo, temos o trabalho de Pierre Curie [57] com a descoberta da desmagnetização de um material acima de uma determinada temperatura, atualmente denominada de temperatura Curie, ou ponto de Curie. Lev Landau, posteriormente, introduziu o conceito de parâmetro de ordem [58, 59], com a formulação de uma expressão para o potencial termodinâmico escrito como uma série de potências do parâmetro de ordem. Ehrenfest fez uma classificação das transições de fases conforme a descontinuidade no menor grau da energia livre. Segundo ele as transições de fase são classificadas de acordo com a descontinuidade na derivada de menor ordem da energia livre. Deste modo, se a descontinuidade for na primeira derivada, denomina-se uma transição de primeira ordem. Caso a descontinuidade seja na segunda derivada, temos uma transição de segunda ordem. Uma classificação mais moderna [60] separa as transições em contínuas, que correspondem às transições de segunda ordem quando o calor latente se anula e a variação do parâmetro de ordem é contínua, e em descontínuas, que corresponde às transições de primeira ordem que apresentam calor latente não nulo e variação descontínua no parâmetro de ordem.

No século XX o estudo dos fenômenos críticos se tornou cada vez mais profundo. Podemos mencionar diversos pesquisadores, tais como, Widom, Domb e Hunter, Kadanoff, Fisher e muitos outros. Uma das maiores descobertas reside no fato de que algumas quantidades físicas macroscópicas nas vizinhanças da temperatura crítica são descritas por leis de potência. Fisher, em 1971, propôs a teoria de escala de tamanho finito [61]. Nela, temos que nas proximidades das transições de fases, o comprimento de correlação é restrito ao tamanho do sistema L .

Um sistema canônico no estudo das transições de fases, é um ferromagneto. Ele pode ser concebido como uma rede cristalina onde dipolos magnéticos - ou spins - estão fixos em seus vértices. Os spins são capazes de alterar a energia do sistema através da simples interação entre eles. Isto pode ser visto se escrevermos em termos das variáveis dos momentos magnéticos, s_i , o hamiltoniano de spin, dado por

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j - H \sum_i s_i. \quad (2.11)$$

A Eq. 2.11 é conhecida como o hamiltoniano do modelo de Ising [2]. Nela as variáveis de spin podem assumir os valores ± 1 , a soma deve ser feita sobre os pares de sítios de primeiros vizinhos e J é a constante de acoplamento que fixa a energia da rede. Além disso deve-se conceber um estado ordenado ferromagnético quando $J > 0$ e H é o campo magnético externo. Para um tempo suficientemente longo, o equilíbrio é estabelecido no sistema, e pode-se definir uma temperatura T onde os graus de liberdade são descritos por essa temperatura. Para altas temperaturas e campo externo nulo, se acompanharmos a evolução no tempo de qualquer spin veremos que ele aponta em todas as direções com igual frequência. Assim, o momento magnético resultante é zero e o sistema reside está desordenado (estado paramagnético). Abaixo de uma temperatura crítica, no entanto, os spins tendem a se alinhar ao longo de uma direção específica no espaço, mesmo na ausência de um campo externo. Neste caso, há uma magnetização resultante, $M(T)$, e o sistema está na fase ferromagnética.

O diagrama de fases do campo externo aplicado versus a temperatura ao longo da linha $H = 0$ é mostrado na Fig. 2.1. Para simplificar definiremos as magnetizações ferromagnéticas por ferro-1 (“spins ordenados para cima”) e ferro-2 (“spins ordenados para baixo”).

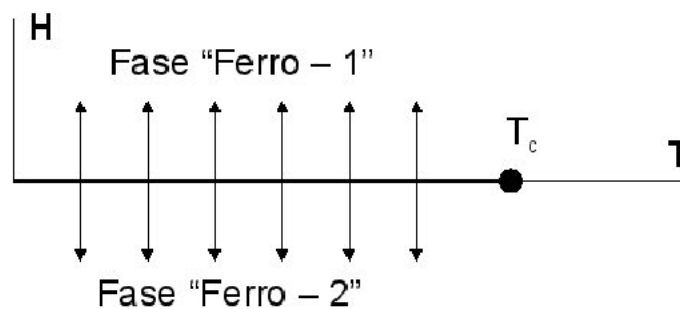


Figura 2.1: Diagrama de fases para um ferromagneto $H \times T$. A linha de coexistência entre as fases ferro-1 e ferro-2 é dada por $H = 0$ e $T < T_c$

Para $H = 0$ temos uma linha de transição descontínua entre os estados ordenados ferro-1 e ferro-2. Estes estados tornam-se indistinguíveis em uma transição de segunda ordem a uma determinada temperatura, a temperatura crítica $T = T_c$. Acima desta

temperatura o sistema está em uma fase paramagnética. Ao longo da curva de coexistência ($H = 0$, $T < T_c$) as fases ordenadas ferro-1 e ferro-2 possuem a mesma energia livre, as suas magnetizações espontâneas são iguais em módulo.

Nas fases ferro-1 ou ferro-2, o sistema exibe uma magnetização espontânea, na qual os spins se alinham preferencialmente em uma direção ou em outra. Acima da temperatura crítica a magnetização espontânea vai a zero, conforme mostra a Fig. 2.2. Grandezas físicas desse tipo são chamadas de *parâmetro de ordem* [62]. Este conceito foi introduzido por Landau [58, 59]. De modo geral, parâmetros de ordem são grandezas que estão associadas à quebra de simetria do sistema. É uma quantidade que é zero de um lado da transição de fase e diferente de zero no outro lado. No caso de um ferromagneto, o parâmetro de ordem é a magnetização do sistema. Em um sistema líquido-gás, ele será a diferença na densidade entre as fases líquida e gasosa na coexistência, que tende a zero no ponto crítico. Uma transição de fase na qual o parâmetro de ordem varia continuamente na temperatura crítica chamaremos de transição de fase contínua.

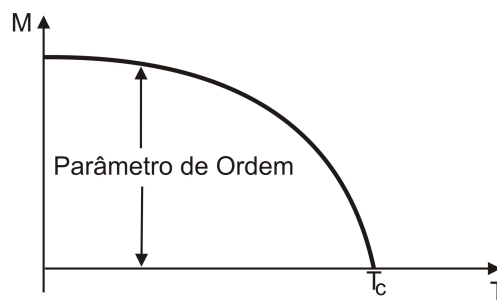


Figura 2.2: Magnetização espontânea versus temperatura para um ferromagneto uniaxial simples, na ausência de campo externo.

2.2.1 Expoentes Críticos

O estudo de fenômenos críticos consiste na compreensão do comportamento das grandezas termodinâmicas nas proximidades do ponto crítico [60]. Dados derivados de experimentos e de modelos resolvidos exatamente mostram que determinadas grandezas termodinâmicas possuem um comportamento particular, sendo bem descritas por leis de potência nas vizinhanças do ponto crítico [63, 64, 65]. É definida uma quantidade adimensional que “mede” a distância à temperatura crítica, denominada de temperatura reduzida, isto é,

$$t \equiv \frac{T - T_c}{T_c}, \quad (2.12)$$

que é igual a zero quando $T = T_c$.

No sistema de tamanho infinito, isto é, no limite termodinâmico, por definição, a região crítica é caracterizada pela divergência do comprimento de correlação, ξ

$$\xi \sim |t|^{-\nu}. \quad (2.13)$$

Em um ferromagneto, na ausência de um campo externo, a magnetização espontânea se comporta como

$$m \sim |t|^\beta. \quad (2.14)$$

Isto é válido apenas abaixo da temperatura crítica, pois acima dela a magnetização é nula. A susceptibilidade magnética χ e o calor específico C possuem comportamento de divergência na forma

$$\chi \sim |t|^{-\gamma}, \quad (2.15)$$

$$C \sim |t|^{-\alpha}. \quad (2.16)$$

Ao longo da isoterma crítica, a magnetização m e o campo externo H estão relacionados do seguinte modo:

$$m \sim H^{1/\delta}, t = 0. \quad (2.17)$$

O fato de dois sistemas físicos aparentemente diferentes, mas que possuam o mesmo conjunto de expoentes críticos é conhecido como classe de universalidade. Os expoentes críticos também estão relacionados entre si, obedecendo a relações de escala [66, 67, 68, 69, 70]:

$$\alpha + 2\beta + \gamma = 2, \quad \text{Relação de Rushbrooke}, \quad (2.18)$$

$$\alpha + \beta(\delta + 1) = 2, \quad \text{Relação de Griffiths}, \quad (2.19)$$

$$\gamma = \beta(\delta - 1), \quad \text{Relação de Widom}, \quad (2.20)$$

$$d\nu = 2 - \alpha, \quad \text{Relação de Josephson}. \quad (2.21)$$

2.3 Teoria de Escala de Tamanho Finito

A Teoria de Escala de Tamanho Finito [61, 66] atualmente é tida como referência no estudo do comportamento crítico. É um método que nos permite calcular os expoentes críticos a partir do estudo de como certas quantidades termodinâmicas se comportam com a variação do tamanho do sistema estudado. Em transições contínuas, o comprimento de correlação depende fortemente da temperatura nas proximidades da transição, divergindo para o infinito. Conforme vimos, isto dá origem a uma lei de escala. No entanto, em um sistema finito, o comprimento de correlação não diverge para o infinito, uma vez que ele é limitado pelo tamanho L do sistema (pois não pode excedê-lo).

Podemos escrever uma relação entre o comprimento de correlação e a susceptibilidade eliminando t nas expressões $\xi \sim |t|^{-\nu}$ e $\chi \sim |t|^{-\gamma}$, resultando em

$$\chi \sim \xi^{\gamma/\nu}. \quad (2.22)$$

Analogamente, para o calor específico e para a magnetização obtemos

$$c \sim \xi^{\alpha/\nu}, \quad (2.23)$$

$$m \sim \xi^{-\beta/\nu}. \quad (2.24)$$

Nas simulações computacionais, trabalha-se com sistemas finitos, consequentemente o comprimento de correlação é limitado pelo tamanho do sistema

$$\xi(T_c) \sim L. \quad (2.25)$$

Para sistemas finitos, é associada uma temperatura de transição pseudocrítica, $T_c(L)$, para cada tamanho de rede simulado, pois a temperatura crítica para um sistema finito difere da temperatura crítica no limite termodinâmico, por isso a nomenclatura “pseudocrítica”.

Combinando a Eq. 2.25 com as Eqs. 2.22, 2.23 e 2.24, obtemos

$$\chi \sim L^{\gamma/\nu}, \quad (2.26)$$

$$c \sim L^{\alpha/\nu}, \quad (2.27)$$

$$m \sim L^{-\beta/\nu}. \quad (2.28)$$

Podemos definir uma função em que haja termos referentes a ξ e χ e que contenha a dependência em L , ou seja,

$$\chi \equiv \xi^{\gamma/\nu} \chi_0(L/\xi), \quad (2.29)$$

onde o termo χ_0 é uma função adimensional com uma única variável que possui as seguintes propriedades:

$$\chi_0 = \text{constante}, \quad \text{quando } L/\xi \gg 1, \quad (2.30)$$

e

$$\chi_0 \sim x^{\gamma/\nu}, \quad \text{quando } L/\xi \rightarrow 0. \quad (2.31)$$

onde

$$x = L/\xi. \quad (2.32)$$

Vamos reorganizar a Eq. 2.29 de modo que se tenha de forma explícita uma

dependência em L . Define-se uma outra variável, também adimensional

$$\tilde{\chi}(x) = x^{-\gamma/\nu} \chi_0(x^\nu). \quad (2.33)$$

Isolando o termo $\chi_0(x^\nu)$ temos

$$\chi_0(x^\nu) = \tilde{\chi}(x) x^{\gamma/\nu}. \quad (2.34)$$

Substituindo a equação acima na expressão para a susceptibilidade, Eq. 2.29 resulta em

$$\chi = \xi^{\gamma/\nu} \tilde{\chi}(x) x^{\gamma/\nu}, \quad (2.35)$$

mas, $x = L/\xi$, ou seja, $\xi^{\gamma/\nu} \cdot x^{\gamma/\nu} = L^{\gamma/\nu}$. Portanto, temos uma expressão que representa a dependência da susceptibilidade magnética com o tamanho L da rede, isto é,

$$\chi = L^{\gamma/\nu} \tilde{\chi}(x). \quad (2.36)$$

Usando a Eq. 2.13 obtemos, finalmente, o resultado

$$\chi_L(t) = L^{\gamma/\nu} \tilde{\chi}(L^{1/\nu} t). \quad (2.37)$$

A equação acima representa o comportamento da susceptibilidade magnética em sistemas com tamanho finito, sendo

$$x = L^{1/\nu} t. \quad (2.38)$$

No entanto, há o termo $\tilde{\chi}(x)$ que não é totalmente descrito. $\tilde{\chi}(x)$ é conhecida como função de escala da susceptibilidade magnética. A função de escala nos diz que

$$\tilde{\chi}(x) \rightarrow x^{-\gamma} (x^\nu)^{\gamma/\nu} = \text{constante}, \quad \text{quando } x \rightarrow 0, \quad (2.39)$$

ou seja, com $L/\xi \rightarrow 0$. Portanto, $\tilde{\chi}$ é finito nas proximidades do ponto crítico. Outro fato importante é que toda a dependência em L de χ é exibida explicitamente na Eq. 2.35, pois a função de escala não contém qualquer dependência em L , e disso resulta que $\tilde{\chi}(x)$ terá sempre o mesmo valor independente do tamanho do sistema.

De modo análogo, podemos estender a equação que representa a susceptibilidade magnética em sistemas de tamanho finito para a magnetização e o calor específico, obtendo respectivamente:

$$m_L(t) = L^{-\beta/\nu} \tilde{m}(tL^{1/\nu}), \quad (2.40)$$

$$c_L(t) = L^{\alpha/\nu} \tilde{c}(tL^{1/\nu}). \quad (2.41)$$

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

$$T_c(L) = T_c + a_q L^{-1/\nu}, \quad (2.42)$$

em que a_q é uma constante a ser determinada, permitindo então a determinação de T_c . O gráfico de $T_c(L)$ contra $L^{-1/\nu}$, atribuído a um conjunto de tamanhos, produz uma estimativa para T_c a partir da extrapolação para $L \rightarrow \infty$. Assim, com as relações de escala de tamanho finito é possível determinar a classe de universalidade de um sistema e a sua temperatura crítica em uma transição de fase contínua. No entanto, é necessário primeiramente determinar o valor do expoente crítico ν , para então calcular a temperatura crítica do sistema infinito, através de T_c^L como função de $L^{-1/\nu}$ na Eq. 2.42.

O expoente crítico ν está associado à divergência do comprimento de correlação no limite termodinâmico. Em geral ele não é conhecido, portanto precisamos de uma maneira de avaliá-lo. No entanto, na abordagem do método de Monte Carlo, existem poucas quantidade das quais podemos estimar este expoente crítico diretamente. Uma maneira é utilizar quantidades termodinâmicas pouco usuais. Pode-se obtê-lo diretamente de quantidades oriundas de derivadas logarítmicas de potências de n -ésima ordem da magnetização, as quais exibem uma escala com $L^{1/\nu}$ [71, 72, 45]. Essas derivadas são apresentadas na relação

$$[m^n] \equiv \ln \frac{\partial \langle m^n \rangle}{\partial T} = \left[\frac{\langle m^n E \rangle}{\langle m^n \rangle} - \langle E \rangle \right]. \quad (2.43)$$

Desta maneira, podemos definir um conjunto de quantidades termodinâmicas provenientes dessas derivadas logarítmicas da magnetização, ou seja,

$$V_1 \equiv 4[m^3] - 3[m^4], \quad (2.44)$$

$$V_2 \equiv 2[m^2] - [m^4], \quad (2.45)$$

$$V_3 \equiv 3[m^2] - 2[m^3], \quad (2.46)$$

$$V_4 \equiv (4[m] - [m^4])/3, \quad (2.47)$$

$$V_5 \equiv (3[m] - [m^3])/2, \quad (2.48)$$

e

$$V_6 \equiv 2[m] - [m^2], \quad (2.49)$$

e combiná-las com a Eq. 2.40, as expressões acima obtém-se a seguinte expressão:

$$V_j \approx (1/\nu) \ln L + \mathcal{V}_j (tL^{1/\nu}), \quad (2.50)$$

para $j = 1, 2, \dots, 6$.

Na temperatura crítica $T_c(t = 0)$, os \mathcal{V}_j serão constantes e independentes do tamanho do sistema. Assim, podemos determinar o expoente crítico ν através dos máximos dessas funções. A temperatura crítica T_c pode ser determinada a partir dos picos do calor específico e da susceptibilidade pois, nessa posição, as Eqs. 2.37 e 2.41 variam assintoticamente conforme a expressão

$$T_c^L = T_c + aL^{-1/\nu}.$$

Ainda no que concerne às transições de segunda ordem, a temperatura crítica também pode ser estimada utilizando o método da intersecção do cumulante de quarta ordem [47, 49, 73], ou seja,

$$U_M = 1 - \frac{\langle M^4 \rangle_L}{3\langle M^2 \rangle_L^2}. \quad (2.51)$$

As curvas dos cumulantes construídas para diversos tamanhos de redes, como uma função da temperatura, se interceptam em um ponto comum, U^* , que corresponde à temperatura crítica. Algumas características do cumulante da magnetização é que, acima da temperatura crítica, ele tende a zero proporcional a L^{-d} , e para temperaturas abaixo de T_c temos que $U_M \rightarrow 2/3$.

2.4 Transição de fase de primeira ordem

Em um sistema que sofre uma transição de fase descontínua, a energia interna, o parâmetro de ordem, ou qualquer outra quantidade oriunda da derivada de primeira ordem da energia livre apresenta uma descontinuidade. No caso da energia interna, um gap aparece devido à existência do calor latente, conforme mostra a Fig. 2.3. Neste tipo de transição, o comprimento de correlação, ξ , não diverge, de modo que não temos uma região em que $\xi \gg L$, por conseguinte, nas transições de fases de primeira ordem as leis de escalas não são as mesmas das de segunda ordem. Imry em 1980 [74] mostrou pela primeira vez que a escala de tamanho finito nas proximidades da temperatura de transição de primeira ordem, é proporcional a L^{-d} , onde L é o tamanho linear do sistema e d a sua dimensionalidade.

Na análise dos efeitos de tamanho finito nas transições de primeira ordem, Challa e colaboradores [75] propuseram um cumulante de quarta ordem da energia do tipo

$$U_E = 1 - \frac{\langle E^4 \rangle_L}{3\langle E^2 \rangle_L^2}, \quad (2.52)$$

que apresenta um mínimo proeminente em uma temperatura característica, que diminui conforme aumenta-se o tamanho de rede e deve tender a $2/3$ para $L \rightarrow \infty$. A temperatura do mínimo de U_E não é necessariamente a mesma do pico do calor específico ou

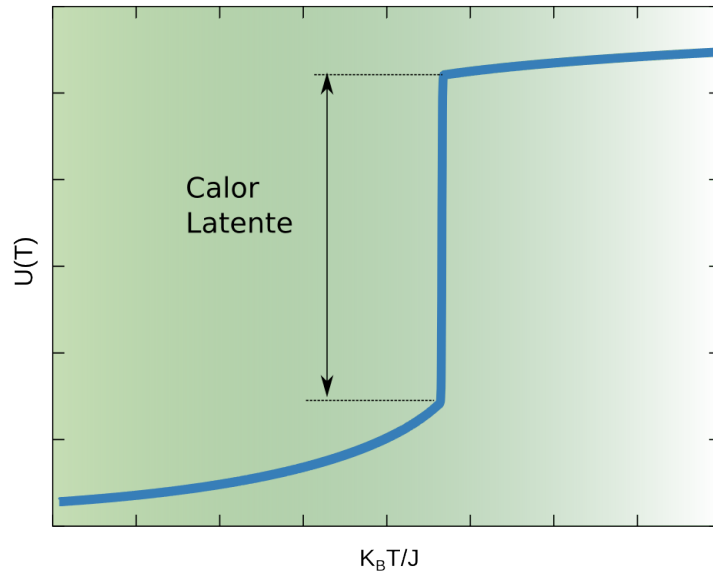


Figura 2.3: Energia interna típica nas proximidades de uma transição de primeira ordem. Tem-se uma descontinuidade de $U(T)$ na temperatura crítica.

da susceptibilidade para o mesmo tamanho de rede, no entanto, ela se aproxima da temperatura característica com L^{-d} , ou seja,

$$T_{min}^{U_E} = T_c + bL^{-d}. \quad (2.53)$$

Em uma transição contínua este cumulante apresenta um mínimo muito suave em uma temperatura pseudocrítica.

O cumulante de quarta ordem do parâmetro de ordem como função da temperatura em uma transição de primeira ordem apresenta um mínimo em uma temperatura característica. Essa divergência também é inversamente proporcional a L^d [47, 76, 77].

Para o calor específico e para a susceptibilidade, os respectivos máximos apresentam-se agudos conforme o aumento de rede, como mostrado na Fig. 2.4. Os máximos obedecem à uma lei de escala proporcional a L^d [78, 79], do tipo,

$$C_{max} = a_0 + a_1 L^d; \quad \chi_{max} = a'_0 + a'_1 L^d, \quad (2.54)$$

onde a_0 , a_1 , a'_0 e a'_1 são constantes.

Embora os máximos do calor específico e da susceptibilidade se apresentem exponenciais, a temperatura dos respectivos máximos, obedece à seguinte lei de escala com L^{-d} :

$$T_c(L) = T_c^\infty + a_2 L^{-d}, \quad (2.55)$$

onde T_c^∞ é a temperatura crítica no limite termodinâmico e a_2 é uma constante.

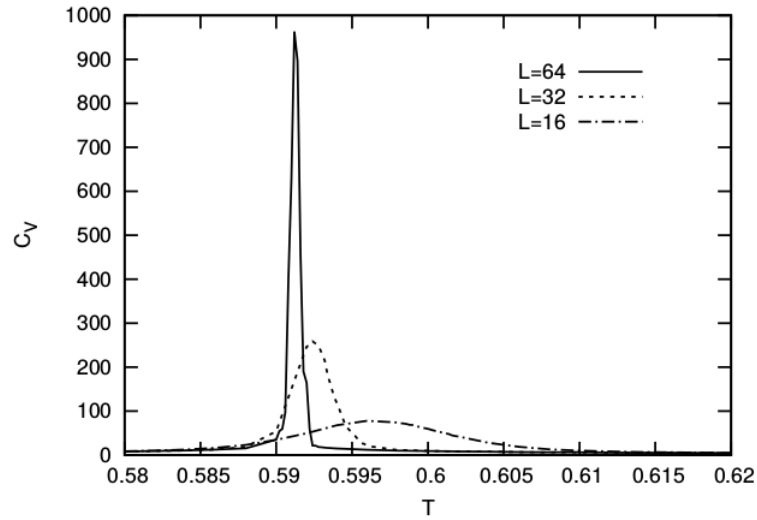


Figura 2.4: Calor específico como função da temperatura, retirado da Ref. [80]. O máximo torna-se mais agudo conforme o aumento do tamanho de rede.

Outro modo de avaliar qual o tipo de transição de um sistema é através da distribuição canônica de probabilidades da energia [81], $P_L(E, T)$. Na simulação entrópica, é possível acessar diretamente a densidade de estados, de modo que pode-se calcular $P_L(E, T)$ como

$$P(E, T) = \frac{g(E)e^{-\frac{E}{k_B T}}}{\sum_E g(E)e^{-\frac{E}{k_B T}}}. \quad (2.56)$$

Lee e Kosterlitz [81] propuseram um método para identificar a ordem de uma transição através da distribuição de probabilidades da energia em função da energia por partícula $P(E)$. Observa-se a sua distribuição para um valor fixo da temperatura. Caso apareçam dois picos (não necessariamente com a mesma altura), muda-se o valor da temperatura, até que ambos os picos tenham a mesma altura. Neste ponto, a temperatura correspondente é a temperatura de transição, $T_c(L)$. Em uma transição de primeira ordem, na temperatura de transição, a função $P_L(E)$ exibe um comportamento com um pico duplo [82, 83], Fig. 2.5. Em uma transição deste tipo, há a coexistência entre as fases ordenada, associada ao pico à esquerda, e desordenada, associada ao pico à direita. Em uma transição contínua, há apenas um pico em $P_L(E)$ quando o sistema passa da fase ordenada para a fase desordenada.

Este método desenvolvido por Lee e Kosterlitz também permite calcular o calor latente da transição. Ele é a diferença ΔE_L entre os dois picos, onde, no limite termodinâmico, $\Delta E(L \rightarrow \infty)$, o calor latente é obtido por uma lei de escala na forma L^{-d} .

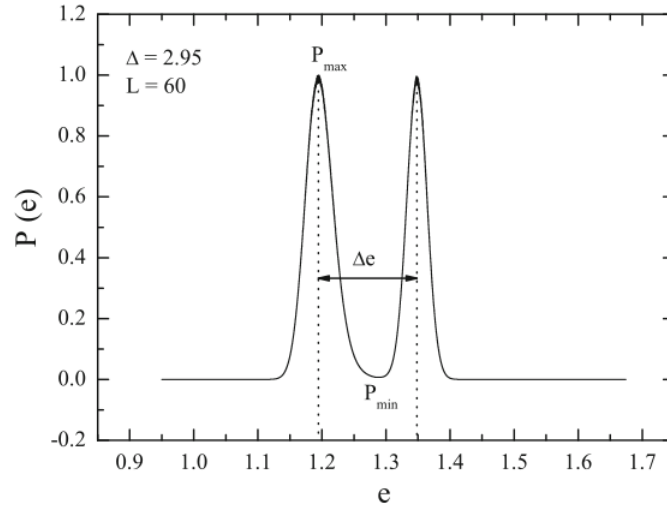


Figura 2.5: Estrutura de pico duplo da distribuição de probabilidades da energia $P_L(E)$ [84].

2.5 Pontos de Inflexão Microcanônicos da Entropia

Um novo método para avaliar as propriedades de sistemas de tamanho finito é a análise microcanônica direta das quantidades termodinâmicas obtidas a partir da entropia microcanônica, $S(E) = k_B \ln g(E)$ [49, 85]. Simplesmente considera-se que a relação entre a energia e a entropia, bem com as mudanças ocorridas nesta última, sinalizam o comportamento do sistema, indicando a direção da transição de fase no limite termodinâmico. Portanto, a primeira e as demais derivadas de $S(E)$ revelam situações importantes no sistema, tais como pontos de transições do sistema no espaço de energia. Uma vez que a primeira derivada de $S(E)$ é o inverso da temperatura microcanônica

$$\beta(E) = T^{-1}(E) = \left[\frac{\partial S(E)}{\partial E} \right]_{N,V}, \quad (2.57)$$

os pontos de transições da energia podem ser associados à temperaturas de transição. Os pontos de inflexão da derivada de $\beta(E)$ com relação à E podem ser usados para diferenciar as transições de primeira e segunda ordem. Se a quantidade

$$\gamma(E) = \left[\frac{\partial \beta(E)}{\partial E} \right]_{N,V} = \left[\frac{\partial^2 S(E)}{\partial E^2} \right]_{N,V} \quad (2.58)$$

exibir um pico com valor positivo no ponto de inflexão, a transição é considerada como de primeira ordem, ao passo que um pico com valor negativo indica uma transição de segunda ordem [85]. A Fig. 2.6 mostra o inverso da temperatura microcanônica e a sua derivada como função da energia para um polímero elástico. Do gráfico temos que, $\beta(E)$

entre A e B não apresenta ponto de inflexão e o máximo de $\gamma(E)$ entre esses pontos é negativo, o que corresponde à uma transição de segunda ordem. Entre B e C, o inverso da temperatura microcanônica possui um ponto de inflexão e a sua derivada neste ponto é positiva, indicando uma transição de primeira ordem.

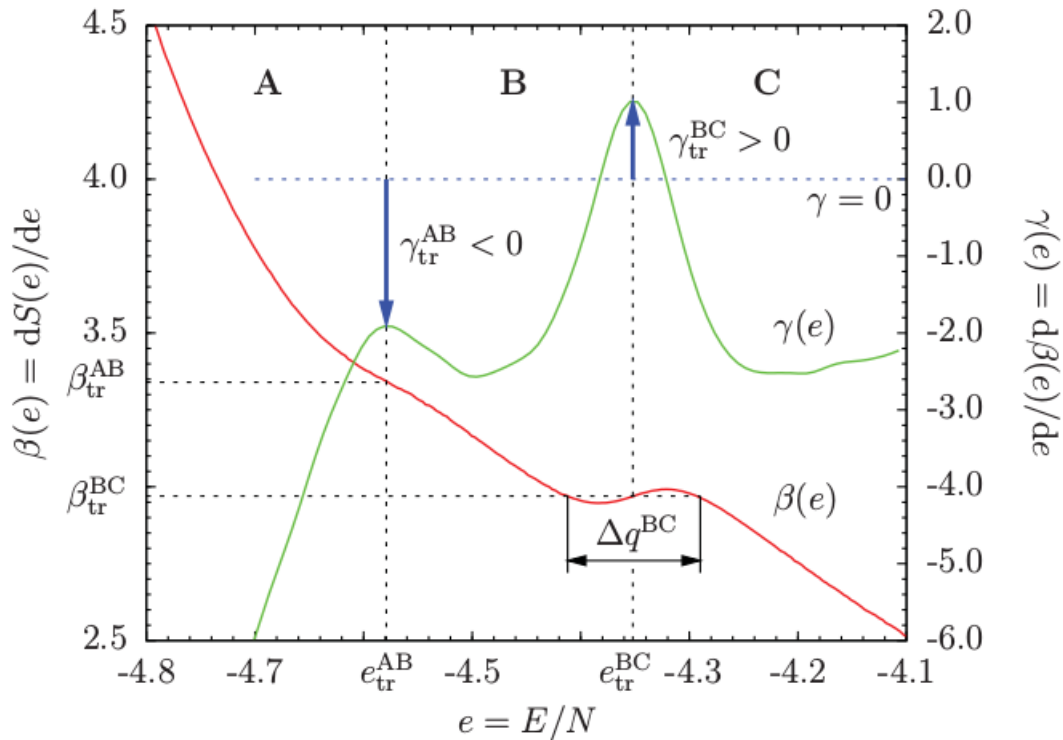


Figura 2.6: Inverso da temperatura microcanônica e a sua derivada como função da energia para um polímero elástico. $\beta(E)$ entre A e B não apresenta ponto de inflexão e o máximo de $\gamma(E)$ entre A e B é negativo, o que corresponde à uma transição de segunda ordem, ao passo que entre B e C $\beta(E)$ possui um ponto de inflexão e $\gamma(E)$ é positivo o que indica uma transição de primeira ordem [85].

SIMULAÇÃO ENTRÓPICA

3.1 O Princípio da Simulação Entrópica

Imagine que tenhamos um tabuleiro quadrado e que este seja dividido em 100 casinhas. Se dispusermos de R\$100,00 divididos em cem moedas de R\$1,00, podemos ir preenchendo as casinhas do tabuleiro com moedas. Suponha que cada moeda esteja integralmente dentro de uma casinha, não tendo, portanto, uma moeda ocupando parcialmente duas ou mais casas vizinhas, e que dentro de cada casa caiba somente uma moeda. Atribuindo quantidades V_i ao número de moedas, i , adicionadas no tabuleiro, teremos o seguinte: vazio, o tabuleiro é representado por V_0 , colocando uma moeda no tabuleiro, independente da casa em que ela estiver alocada, é representada por V_1 . A presença de duas moedas é representada por V_2 , e assim por diante. Podemos alocar as moedas uma a uma, formando assim diversas configurações, até que as cem moedas estejam dispostas no tabuleiro. Perceba que temos apenas uma configuração com as 100 moedas presentes pois, mesmo que troquemos duas moedas de posição, ainda teremos R\$100,00 no tabuleiro. Podemos dizer também que o tabuleiro não identifica quando trocamos uma moeda por outra se a colocarmos no mesmo lugar.

Agora vamos adotar o seguinte protocolo para a distribuição das moedas no tabuleiro: Considere que o sorteio das configurações, ou o modo com que as moedas serão distribuídas no tabuleiro, seja feito por uma máquina. Ela sorteia a quantidade de moedas a serem colocadas no tabuleiro e a posição de cada uma. Esta máquina também conta a quantidade de vezes que determinado valor V_i foi sorteado. Assim, se o valor V_{23} for muitas vezes sorteado, independentemente de quais forem as configurações escolhidas, a máquina diminui a probabilidade de que configurações com valores V_{23} apareçam, dando assim, mais oportunidade para as configurações e valores pouco visitados - ou sorteados. Se a máquina for escolhendo configurações aleatoriamente, entretanto segundo o critério descrito acima, depois de um tempo suficientemente longo, praticamente todos os valores e suas respectivas configurações serão visitadas. Estabelecendo um histograma de valores

$H(V)$ e somando 1 cada aceitação de valor no histograma, depois de muitos sorteios, aceitações e rejeições, teremos que o histograma dos valores praticamente preenchido, com algo próximo de 100% dos valores V_s possíveis. A simulação entrópica segue o mesmo princípio. A diferença é que a visitação aleatória é feita sobre as energias com a criação de um histograma de energia $H(E)$.

3.2 Simulação entrópica e o método de Wang-Landau

Na Mecânica Estatística, as simulações de Monte Carlo são de grande importância para o estudo das transições de fases e fenômenos críticos [49, 86]. O histórico trabalho de Metropolis e colaboradores [25], cujo algoritmo é um dos mais utilizados nas simulações de MC, fornece uma amostragem satisfatória de quantidades físicas e é de fácil implementação. Contudo, o algoritmo de Metropolis gera uma distribuição canônica $P(E, T) = g(E)e^{-E/k_B T}$ a uma temperatura fixa, de modo que é necessário realizar muitas simulações para obter as quantidades físicas de interesse, ao longo de um intervalo de temperatura. Outra dificuldade encontrada neste tipo de abordagem é que não se pode obter diretamente algumas quantidades tais como a energia livre e a entropia.

Entretanto, novos e mais eficientes algoritmos baseados em acumulação de entradas em histogramas, têm substituído a amostragem por importância de Metropolis, especialmente, no estudo de regiões próximas às transições de fases, onde a técnica de Metropolis também falha. Podemos citar o método do histograma de Ferrenberg e Swendsen [87], a amostragem entrópica de Lee [28], o método do “*broad histogram*” [29, 30] e o método de Wang-Landau [32, 31, 88]. Nesses métodos, busca-se reescrever a função de partição, que anteriormente apresentava uma soma sobre as configurações, para uma soma sobre as energias. Assim, pode-se agrupar todos os microestados com a mesma energia e reescrevê-la na forma

$$Z = \sum_i e^{-E_i/k_B T} = \sum_E \sum_i \delta_{EE_i} e^{-E/k_B T}, \quad (3.1)$$

que resulta em

$$Z = \sum_E g(E) e^{-E/k_B T}, \quad (3.2)$$

sendo $g(E)$ a densidade de estados. Uma vantagem de utilizar este método em relação à amostragem por importância é que a densidade de estados independe da temperatura, portanto, uma vez obtida, podemos estudar as propriedades termodinâmicas de um sistema em qualquer temperatura.

Nesse sentido, o método de amostragem entrópica, o chamado método de Wang-Landau, faz uma estimativa da densidade de estados através de um passeio aleatório no espaço de energia, pela mudança de modo imparcial nas configurações do sistema, com

uma probabilidade proporcional ao recíproco da densidade de estados, o que produz um histograma para a distribuição de energia. Se, em vez de utilizar o peso de Boltzmann $p(E) \propto e^{-\beta E}$, utilizarmos o inverso da densidade de estados $p(E) \propto 1/g(E)$, a probabilidade de encontrar um nível de energia altera-se de

$$p_{\text{Boltzmann}} \propto g(E) \cdot p(E) = g(E)e^{-\beta E}, \quad (3.3)$$

para

$$p_{\text{Wang-Landau}} \propto g(E) \cdot 1/g(E) = \text{constante}. \quad (3.4)$$

Utilizar o peso de Boltzmann significa escolher uma configuração com energia E com uma probabilidade proporcional a $e^{-\beta E}$, enquanto que para o peso do WL todas as energias serão equiprováveis. Em outras palavras, as chances para escolher um estado com uma dada energia são as mesmas para qualquer outra energia. Isto não significa dizer que todos os estados são igualmente prováveis, pois isso produziria mais amostras em um intervalo de energia que possuísse muitos estados, ao passo que em um intervalo de energia com poucos estados seriam produzidas poucas amostras.

Ao longo do passeio aleatório, o número de visitas em um nível de energia particular é controlado pelo histograma $H(E)$. Sempre que um nível de energia E for visitado, atualiza-se o histograma com uma entrada [$H(E) \rightarrow H(E) + 1$]. O que garante que $g(E)$ irá convergir para o seu valor real é um refinamento feito ao longo do passeio aleatório com o uso de um fator modificador, f , cuidadosamente controlado. A densidade de estados é modificada pelo fator modificador na forma

$$g(E) \rightarrow f \cdot g(E), \quad (3.5)$$

sempre que uma configuração é aceita. A atualização da densidade de estados a cada aceitação de uma nova configuração consta no WL original, entretanto, no trabalho de Caparica e Cunha-Neto [39], é demonstrado que, para evitar tomar configurações correlacionadas na construção da densidade de estados, deve-se atualizá-la a cada passo de Monte Carlo (em um sistema como o de Ising, um MCS corresponde a escolher L^2 spins e gerar L^2 tentativas de estados).

Como a densidade de estados produz números muito grandes, então, em vez de calcularmos diretamente $g(E)$, a simulação é realizada utilizando o seu logaritmo

$$S(E) \equiv \ln g(E), \quad (3.6)$$

em que $S(E)$ é, a menos de uma constante, a entropia microcanônica.

No início da simulação, a densidade de estados é desconhecida, então, na maioria das vezes escolhe-se $g(E) = 1$, ou $S(E) = 0$. O passeio aleatório é realizado no espaço

de energia passando por todos os níveis de energia desde E_{min} até E_{max} . Considerando E_1 a energia atual e E_2 a energia de uma possível nova configuração, a probabilidade de transição de E_1 para E_2 é expressa como:

$$p(E_1 \rightarrow E_2) = \min(\exp[S(E_1) - S(E_2)], 1). \quad (3.7)$$

Se $S(E_2) \leq S(E_1)$ a nova configuração é aceita. Sempre que há uma aceitação de uma nova configuração, o histograma e a densidade de estados são atualizados, $H(E_2) \rightarrow H(E_2) + 1$ e $S(E_2) \rightarrow S(E_2) + F_i$, respectivamente, onde, $F_i = \ln f_i$, e f_i é o fator de modificação. Este fator de modificação é atualizado como $f_{i+1} = \sqrt{f_i}$, sempre que o histograma atingir a condição de nivelamento. Uma boa escolha para o fator de modificação inicial é $f = f_0 = e^1 = 2.71828$ [88].

Esse procedimento é repetido por vários passos de Monte Carlo, e então realiza-se a verificação de nivelamento do histograma exigindo que $H(E) > x\% \langle H \rangle$ para todas as energias, onde $\langle H \rangle$ é a média sobre todas as energias. A escolha do parâmetro x depende do tamanho e complexidade do sistema estudado, quão precisa a densidade de estados deve ser, entre outras características. Contudo, a escolha do parâmetro visa obter uma boa estimativa da densidade de estados em um tempo computacional viável. Geralmente escolhe-se $x = 80\%$. Quando o histograma atender à condição de nivelamento, então atualiza-se o fator de modificação na forma $f_{i+1} = \sqrt{f_i}$ e o histograma é zerado.

Caparica demonstrou que as médias microcanônicas somente devem ser acumuladas a partir de um $\ln f \geq \ln f_{micro}$ [39], sendo que o $\ln f_{micro}$ é definido por um estudo prévio das médias microcanônicas durante a simulação. Em nossos estudos, as médias microcanônicas foram acumuladas a partir do $f_{micro} = f_7$. As simulações são realizadas até um $\ln f = \ln f_{final}$, que é também definido por médias canônicas ao longo das simulações. Isso diminui o tempo computacional, descartando simulações desnecessariamente longas. A partir do fator de modificação f_7 , quando o histograma é considerado nivelado, calcula-se a temperatura do pico do calor específico $T_c(0)$, utilizando a densidade de estados atual ao final de cada nível de WL, e sempre que o nivelamento de $H(E)$ é verificado, seu valor é atualizado. Calcula-se, então, o parâmetro ε definido por:

$$\varepsilon = |T_c(t) - T_c(0)|. \quad (3.8)$$

Se o valor de ε permanecer menor que 10^{-4} e o histograma estiver nivelado para um mesmo nível de WL, então armazena-se as médias microcanônicas e a densidade de estados e finaliza-se a simulação. Utilizando este critério para finalizar as simulações, diferentes rodadas podem ser finalizadas em diferentes f_{final} .

O cálculo do pico do calor específico a partir do f_7 foi utilizado no estudo do Baxter-Wu spin-1/2 [89]. Entretanto, como todas as rodadas sempre finalizavam depois do f_{14} , nos demais estudos passamos a calcular a temperatura do pico do calor específico

sempre a partir do f_{13} , diminuindo mais o tempo computacional. Outro melhoramento adotado segue os seguintes passos: realiza-se uma única simulação até o sétimo nível de Wang-Landau (f_6) e salvam-se a atual densidade de estados, a configuração, as somas realizadas para as médias microcanônicas (magnetização, quadrado da magnetização e o número de entradas), a temperatura do pico do calor específico e o próximo fator modificador. Todas as demais simulações são realizadas utilizando os dados desta primeira simulação. Estudos prévios garantem uma economia no tempo computacional por volta de 60%. O modelo de Baxter-Wu com interação do campo cristalino e o modelo de Baxter-Wu 3D foram simulados utilizando este novo esquema.

Um esquema dos passos seguidos em nossas simulações está abaixo:

- Inicie a simulação com $\ln g(E) = 0$, $\ln f_0 = 1$ e $H(E) = 0$;
- Inicie as configurações de spin no estado fundamental, escolha uma nova configuração e aceite com probabilidade $p(E_1 \rightarrow E_2) = \min(\exp[S(E_1) - S(E_2)], 1)$;
- Atualize $\ln g(E)$ e $H(E)$ após cada passo de Monte Carlo;
 $\ln g(E) \rightarrow \ln g(E) + \ln f$; $H(E) \rightarrow H(E) + 1$;
- Continue até que o histograma esteja nivelado $\forall H(E) > 0.8\langle H \rangle$;
- Atualize f : $f_{i+1} \rightarrow \sqrt{f_i}$;
- Zere o histograma: $H(E) = 0$;
- Ao final de $f_{micro} = f_6$ armazene o valor da densidade de estados, a configuração, as médias microcanônicas da magnetização e do quadrado da magnetização, a temperatura do pico do calor específico, e o próximo fator modificador;
- A partir do nível de WL f_7 comece a acumular as médias microcanônicas;
- Sempre que verificar o nivelamento do histograma calcule o parâmetro
 $\varepsilon = |T_c(t) - T_c(0)|$;
- Finalize quando o parâmetro ε permanecer menor que 10^{-4} durante todo o nível de WL.

3.2.1 Médias termodinâmicas

Com a densidade de estados devidamente calculada, pode-se calcular a média canônica para uma variável termodinâmica X como

$$\langle X \rangle_T = \frac{\sum_E \langle X \rangle_E g(E) e^{-E/k_B T}}{\sum_E g(E) e^{-E/k_B T}}, \quad (3.9)$$

e $\langle X \rangle_E$ é a média microcanônica acumulada ao longo da simulação. A média microcanônica da magnetização é

$$\langle M \rangle_T = \frac{\sum_E \langle M \rangle g(E) e^{-E/k_B T}}{\sum_E g(E) e^{-E/k_B T}} \equiv \langle m \rangle, \quad (3.10)$$

A energia interna é dada por

$$U(T) = \frac{\sum_E \langle E \rangle g(E) e^{-E/k_B T}}{\sum_E g(E) e^{-E/k_B T}} \equiv \langle E \rangle, \quad (3.11)$$

o calor específico $C(T)$ é obtido a partir de flutuações da energia interna

$$C(T) \equiv \frac{\partial U(T)}{\partial T} = \frac{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2}{k_B T^2}, \quad (3.12)$$

e a susceptibilidade é dada por

$$\chi(T) = L^2(\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2)/T, \quad (3.13)$$

onde E é a energia de uma dada configuração e m é a magnetização por spin correspondente.

Nos métodos de Monte Carlo usuais a energia livre e a entropia são calculadas a partir de outras quantidades termodinâmicas, por exemplo, do calor específico. Porém, os resultados não são muito precisos, uma vez que o próprio calor específico não é fácil de ser estimado precisamente. No entanto, a energia livre $F(T)$ pode ser calculada diretamente da função de partição Z

$$F(T) = -k_B T \ln(Z) = -k_B T \ln \sum_E g(E) e^{-E/k_B T}, \quad (3.14)$$

sendo assim, a entropia pode ser calculada por

$$S(T) = \frac{U(T) - F(T)}{T}. \quad (3.15)$$

3.3 Simulação entrópica para uma densidade de estados conjunta

Em muitos casos, é desejável estudar o efeito de um campo magnético externo aplicado em um sistema magnético, ou considerar o efeito da anisotropia de spin no sistema. Nesses casos, uma abordagem adequada é construir uma densidade de estados conjunta da energia com um segundo parâmetro que caracterize o sistema, ($g(E, N)$, por exemplo), ou uma densidade de estados que dependa da energia e da magnetização, $g(E, M)$. Nesse processo, é acumulado um histograma bidimensional $H(E, N)$ dos estados visitados.

Do mesmo modo que na simulação original, o histograma no início da simulação é zerado e $g(E, N) = \text{constante}$. A probabilidade de mudança de uma antiga configuração de spins (E_1, N_1) para uma nova configuração (E_2, N_2) é dada pela condição

$$p[(E_1, N_1) \rightarrow (E_2, N_2)] = \min\left(\frac{g(E_1, N_1)}{g(E_2, N_2)}, 1\right). \quad (3.16)$$

Caso a nova configuração seja aceita, prossegue-se com o procedimento usual. A densidade de estados conjunta e o histograma são atualizados após cada MCS, conforme $\ln g(E, N) \rightarrow \ln g(E, N) + \ln f$ e $H(E, N) \rightarrow H(E, N) + 1$, respectivamente. Este procedimento prossegue até que o histograma esteja nivelado segundo a condição 80% dos valores possíveis de E e M , e, por fim, diminui o fator modificador ($f_{i+1} \rightarrow \sqrt{f_i}$) e zera-se o histograma. As simulações também são finalizadas com o uso do parâmetro ε , definido na Eq. 3.8.

Após construir a densidade de estados conjunta pode-se calcular todas as propriedades termodinâmicas do sistema sem que seja necessário realizar uma nova simulação.

MODELO DE BAXTER-WU

As transições ordem-desordem em sistemas bidimensionais têm sido estudadas experimentalmente em estruturas constituídas por átomos adsorvidos ou moléculas em cristais e sua classe de universalidade sendo determinada experimentalmente. Entre eles, temos alguns materiais reais com interações em tripletos que pertencem à mesma classe de universalidade do modelo de Potts 4-estados. Como exemplos podemos citar a camada quimissorvida de $p(2 \times 2)$ oxigênio em Ni(111) [90], o sistema de adsorção de O/Ru(0001) [91] e a $1/4$ monocamada e a estrutura (2×2) - $2H$ em Ni(111) [92]. Todos eles são descritos por um modelo que considera interações em tripletos entre os spins em uma rede triangular. Em 1972, Woods e Griffiths [9] propuseram tal modelo. Um sistema magnético descrito por um sistema de spins do tipo Ising definidos em uma rede bidimensional triangular, que estão localizados sobre os vértices dos triângulos da rede podendo assumir os valores inteiros ± 1 . Um fato interessante deste sistema de spins é que eles exibem uma transição do tipo ordem-desordem, mas não exibem simetria de inversão de spins. Este modelo, hoje conhecido como modelo de Baxter-Wu (BW), foi resolvido exatamente para o caso spin- $1/2$ por Baxter e Wu [10, 11, 12] e apresentaram resultados interessantes. A temperatura crítica é a mesma do modelo de Ising na rede quadrada, isto é, $k_B T_c / J = 2 / \ln(1 + \sqrt{2}) = 2.2691853\dots$, e expoentes críticos que pertencentes à mesma classe de universalidade do modelo de Potts 4-estados, com $\alpha = \nu = 2/3$, $\beta = 1/12$, $\gamma = 7/6$. [5, 48, 93] Estes resultados obtidos para o modelo de BW são previamente esperados, uma vez que ambos modelos possuem a mesma simetria e grau de degenerescência no estado fundamental. Entretanto, diferentemente do modelo de BW, o Potts 4-estados requer correções logarítmicas, o que torna a sua análise difícil.

Assim, para investigar essa aparente contradição, Kinzel e colaboradores [94] estudaram uma generalização do modelo com a inserção de vacâncias ou diluições. Neste novo cenário, temos o modelo de Baxter-Wu spin-1, no qual as variáveis de spins agora podem assumir três valores discretos 0 e ± 1 . Eles encontraram, pela análise do comportamento do comprimento de correlação através das técnicas de escala de tamanho finito, que uma transição de segunda ordem somente pode ocorrer para o modelo de BW

puro. Não obstante, outro estudo do BW spin-1 feito por Costa e Plascak [95], usando simulações de Monte Carlo com o algoritmo de Metropolis e aplicando a técnica de escala de tamanho finito, obtiveram um comportamento diferente do primeiro trabalho com uma transição de segunda ordem com expoentes críticos bem definidos.

Temos na natureza diversos arranjos hexagonais. O caso mais famoso é a estrutura honeycomb, ou favo de mel, que constitui a rede do grafeno. Entretanto, no que tange aos materiais magnéticos tridimensionais, baseado em simulações de Monte Carlo, Ma e colaboradores [96], apresentaram resultados para um modelo de um filme que é descrito por uma rede de camadas honeycomb. Este tipo de rede foi utilizada por Wang e colaboradores na caracterização de um filme magnético de moléculas $AFe^{II}Fe^{III}(C_2O_4)_3$ [97]. A maioria dos materiais magnéticos com arranjos hexagonais são descritos via modelo de Ising em uma rede triangular, como é o caso do composto $Ca_3CO_2O_6$, onde a magnetização do tipo degrau é fortemente dependente do campo externo e da temperatura [98, 99, 100]. Nanopartículas e nanotubos hexagonais com uma estrutura de camadas, ou core-shell, como CuS/Cu_2S com spins mistos (1/2; 1) e Zn/Se spin-1, foram previstos e sintetizados com sucesso [101, 102, 103, 104, 105, 106, 107] também tem sua caracterização feita via modelo de Ising em uma rede triangular. Muito embora existam diversos modelos tridimensionais com estruturas hexagonais, tanto na natureza como na literatura, não existe nenhuma abordagem destes tipos de redes com interações do tipo Baxter-Wu.

4.1 O Modelo de Baxter-Wu spin-1/2

O modelo de Baxter-Wu foi proposto inicialmente por Wood e Griffiths [9], em 1972. Em vez de interações duplas entre os pares de spins (interações apenas entre os primeiros vizinhos: $-Js_i s_j$) como no modelo de Ising, consideram-se termos de acoplamentos triplos ($-Js_i s_j s_k$). O modelo inicialmente proposto consistiu em um sistema magnético definido em uma rede cristalina triangular, como mostrado na Fig. 4.1, onde, para o caso spin-1/2, as variáveis de spin assumem os valores ± 1 e estão localizados sobre os vértices da rede. A energia de interação é dada por

$$H_{BW} = -J \sum_{\langle i,j,k \rangle} s_i s_j s_k, \quad (4.1)$$

sendo que J é a constante de acoplamento que fixa a escala de energia e a soma se estende sobre todas as faces triangulares da rede.

A rede triangular de Baxter-Wu pode ser vista como a composição de três sub-redes, como pode ser visto na Fig. 4.2, onde cada sítio interage somente com spins das outras sub-redes. O estado fundamental do modelo de Baxter-Wu é quatro vezes degenerado, Fig. 4.3. Um dos estados é o ferromagnético, onde todos os sítios da rede

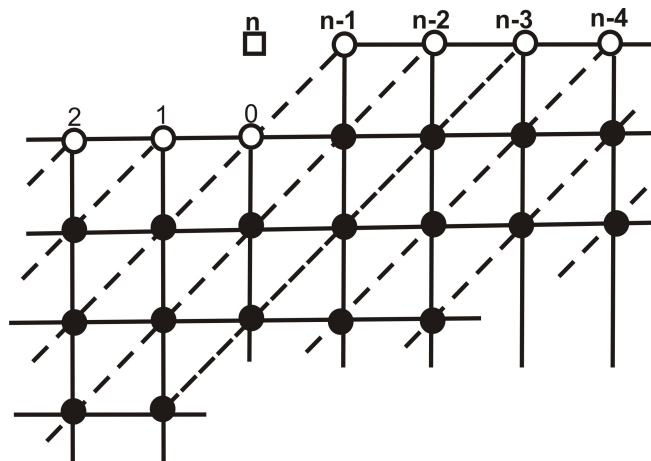


Figura 4.1: Rede triangular inicial proposta por Wood e Griffiths [9].

são preenchidos com spins positivos (+ + +). As outras três configurações são tais que duas sub-redes têm spins negativos e a terceira positivos (+ - -), (- + -) e (- - +), o resultando em três estados ferrimagnéticos.

As configurações na rede triangular podem ser transpostas em configurações isomórficas uma rede quadrada $L \times L$ como mostra a Fig. 4.2. Podemos então trabalhar com este modelo considerando os spins $s_i \equiv s_{ij}$ em uma rede quadrada e utilizar condições periódicas de contorno adequadas. Cada spin é cercado por seis faces triangulares, como mostrado na Fig. 4.2. Se percorrermos todos os spins contando seis faces para cada spin, cada face triangular será contada três vezes. Portanto, a energia de uma dada configuração de uma rede L definida pelo hamiltoniano, Eq. 4.1 pode ser calculada na rede quadrada como

$$E = -\frac{J}{3} \sum_{i=1}^L \sum_{j=1}^L s_{i,j} (s_{i-1,j} s_{i,j-1} + s_{i,j-1} s_{i+1,j-1} + s_{i+1,j-1} s_{i+1,j} + s_{i+1,j} s_{i,j+1} + s_{i,j+1} s_{i-1,j+1} + s_{i-1,j+1} s_{i-1,j}). \quad (4.2)$$

Nas simulações foram utilizadas este esquema na rede quadrada sempre partindo do estado fundamental e com a configuração ferromagnética.

Um dos motivos que levaram à construção do modelo de BW foi a elaboração de um modelo magnético onde não houvesse simetria de inversão dos spins e que exibisse uma transição do tipo ordem-desordem. A solução exata da temperatura crítica de transição para o caso spin-1/2 foi obtida por Wood e Griffiths, em 1972, e apresentou resultados interessantes: o valor da temperatura crítica para a transição de fase contínua resultou no mesmo valor de T_c do modelo de Ising na rede quadrada,

$$\frac{k_B T_c}{J} = \frac{2}{\ln(1 + \sqrt{2})} = 2.2691853..., \quad (4.3)$$

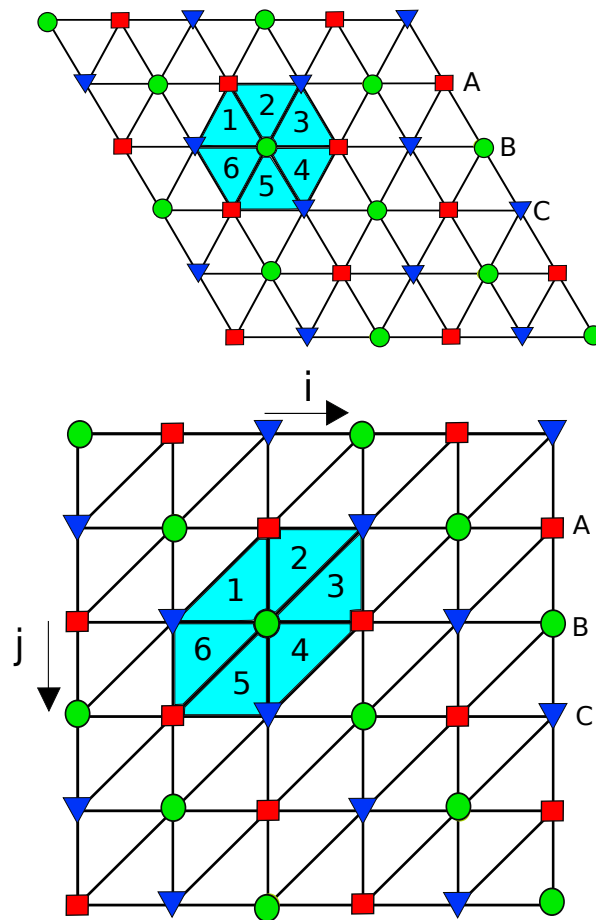


Figura 4.2: Rede triangular do modelo de Baxter-Wu. A subrede A é denotada pelo quadrado vermelho, a subrede B pelo círculo verde e a subrede C pelo triângulo azul.

porém, sem a mesma classe de universalidade. Baxter e Wu [10, 11, 12] encontraram, para os expoentes críticos α , β e ν os seguintes valores: $\alpha = \nu = 2/3$ e $\beta = 1/2$, que são os mesmos valores dos expoentes críticos α , β e ν do modelo de Potts 4-estados [5, 48, 93], pertencendo portanto, à mesma classe de universalidade.

O modelo de Baxter-Wu foi extensivamente estudado, sendo abordado por uma diversidade de técnicas. Muitos trabalhos teóricos foram desenvolvidos acerca do modelo BW spin-1/2 por grupo de renormalização [108], Monte Carlo [14] e grupo de renormalização de Monte Carlo [13, 109], seja em modelos puros ou diluídos, pelo método de escalonamento de tamanho finito e invariância conforme [110, 111], nos quais a criticalidade obtida é sempre a mesma do modelo de Potts 4-estados em uma rede bidimensional. Trabalhos mais atuais determinam a distribuição crítica do parâmetro de ordem [16] e analisam o BW puro e diluído por meio do algoritmo de Wang-Landau [112], também concordam com a existência de uma criticalidade no modelo com a mesma classe de universalidade do modelo de Potts 4-estados.

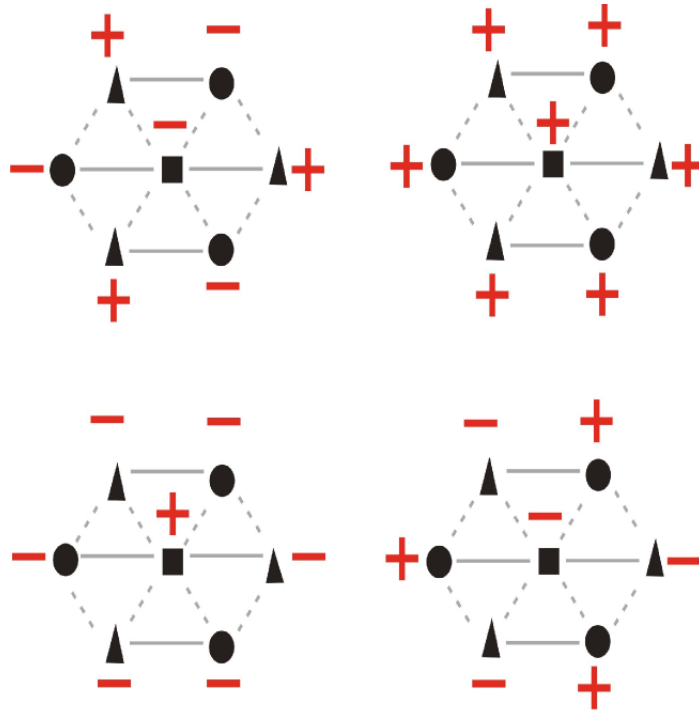


Figura 4.3: Os quatro estados fundamentais do modelo de Baxter-Wu.

4.1.1 Parâmetro de Ordem no Modelo de Baxter-Wu

O parâmetro de ordem para o modelo BW pode ser definido de diferentes formas. A fim de estudar o modelo puro e com impurezas, Novotny e Landau [13, 14] definiram como a raiz quadrada média da magnetização por sub-redes, ou seja

$$M_1 = \sqrt{\frac{m_A^2 + m_B^2 + m_C^2}{3}}, \quad (4.4)$$

sendo m_A , m_B e m_C as magnetizações das sub-redes A , B e C , respectivamente. A magnetização de qualquer subrede é dada por

$$m_\alpha = \sum_{i \in \alpha} s_i, \quad (4.5)$$

onde $\alpha = A, B$ ou C .

A média microcanônica da magnetização é a razão entre a soma das magnetizações das configurações de um nível energético e a degenerescência do respectivo nível. No caso do estado fundamental, a média microcanônica da magnetização é dada por

$$\langle M_1 \rangle = \frac{\langle m \rangle_{ferro} + 3\langle m \rangle_{ferri}}{4}, \quad (4.6)$$

onde a magnetização da configuração ferromagnética é

$$\langle m \rangle_{ferro} = \sqrt{\frac{(N/3)^2 + (N/3)^2 + (N/3)^2}{3}} = N/3, \quad (4.7)$$

e a magnetização de cada uma das configurações ferrimagnéticas é

$$\langle m \rangle_{ferri} = \sqrt{\frac{(N/3)^2 + (-N/3)^2 + (-N/3)^2}{3}} = N/3. \quad (4.8)$$

Portanto, resulta que $\langle M_1 \rangle = N/3$ e a média $\langle M_1^2 \rangle$ vale

$$\langle M_1^2 \rangle = \frac{\langle m^2 \rangle_{ferro} + 3\langle m^2 \rangle_{ferri}}{4} = \left(\frac{N}{3}\right)^2, \quad (4.9)$$

Analisando agora a expressão da susceptibilidade, Eq. 3.13, temos que para temperaturas próximas de zero a susceptibilidade tende a zero.

O parâmetro de ordem descrito na forma acima somente pode ser utilizado para redes múltiplas de três. Caso considere um tamanho de rede que não seja múltiplo de três, o número de sítios em cada sub-rede serão diferentes fazendo com que o parâmetro de ordem se comporte de maneira errada, pois, não distingue claramente a fase ordenada da fase desordenada.

Outra possibilidade é escolher como parâmetro de ordem a magnetização total da rede [15, 16, 17, 18, 19, 20], definida por

$$M_2 = \text{abs} \left(\sum_i s_i \right). \quad (4.10)$$

Uma vantagem de usar o parâmetro de ordem nesta forma é que não dividi-se a rede em três sub-redes. No entanto, esta escolha traz ao modelo BW algumas particularidades.

Se escolhermos redes que não sejam múltiplas de três, temos que apenas a configuração com todos os spins para cima (+ + +) existirá no estado fundamental, e as outras três (+ - -), (- + -) e (- - +) pertencerão a um nível de energia diferente da energia do estado fundamental. Neste caso, o numerador na Eq. 3.13, $\langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2 \rightarrow 0$, para baixas temperaturas, uma vez que $\langle m^2 \rangle = \langle m \rangle^2 = 1$ e, portanto, temos que $\chi \rightarrow 0$ quando $T \rightarrow 0$.

Adotando redes que sejam múltiplas de três, resulta-se que as quatro configurações (+ + +), (+ - -), (- + -) e (- - +) estão presentes no estado fundamental. Para a configuração ferromagnética, temos que $\langle m \rangle_{ferro} = N$ e $\langle m \rangle_{ferri} = N/3$ para as ferrimagnéticas, de forma que $\langle M_2 \rangle = \langle m \rangle_{ferro} + 3\langle m \rangle_{ferri} = \frac{N+3N/3}{4}$ o que resulta em $\langle M_2 \rangle = N/2$. Nesta situação $\langle m^2 \rangle_{ferro} = N^2$ e $\langle m^2 \rangle_{ferri} = N^2/9$ resultando em $\langle M_2^2 \rangle = N^2/3$. Consequentemente, pode-se ver pelo numerador da Eq. 3.13 que a susceptibilidade no estado fundamental não é zero e que para $T \rightarrow 0$ ela diverge. Para

contornar este problema, definimos uma pseudo-susceptibilidade na forma

$$\tilde{\chi}(T) = L^2(3\langle m^2 \rangle - 4\langle m \rangle^2)/T, \quad (4.11)$$

que tende a zero no estado fundamental. Esta quantidade termodinâmica também escala com

$$\tilde{\chi} \approx L^{\gamma/\nu} \tilde{\chi}(tL^{1/\nu}). \quad (4.12)$$

Assim, a pseudo-susceptibilidade substitui a susceptibilidade nos procedimentos de escala de tamanho finito quando adotamos as redes múltiplas de três.

4.1.2 Simulações

No procedimento da simulação entrópica para construir a densidade de estados, deve-se haver a visitação das configurações para um dado nível energético. Por exemplo, em uma rodada de uma simulação entrópica para o modelo de Baxter-Wu bidimensional, as configurações do estado fundamental devem ser visitadas nas seguintes proporções: a configuração (+ + +) (que possui magnetização $N = L^2$), por ser 1/4 das configurações do estado fundamental deve ser visitada 25% das vezes. As outras três ferrimagnéticas, (que possuem magnetização $L^2/3$) que correspondem a 3/4 das configurações deste nível energético devem, conseqüentemente, ser visitadas 75% das vezes. Se isto ocorrer, temos que a média microcanônica da magnetização no estado fundamental será dada por

$$\langle M_2 \rangle = 25\% \langle m \rangle_{ferromagnética} + 75\% \langle m \rangle_{ferrimagnéticas}, \quad (4.13)$$

que é igual a $N/2$.

Porém, as simulações apresentam resultados interessantes. Resulta-se que as configurações não são visitadas nas exatas proporções de 25% e 75% para cada caso, ferromagnético e ferrimagnéticas, respectivamente, e quando calcula-se a média microcanônica da magnetização, os valores obtidos são diferentes dos reais.

Para ilustrar mais claramente, está representado na Fig. 4.4 o comportamento da magnetização por spin de 12 rodadas para o tamanho de rede 84. Primeiramente, nota-se que, para nenhuma das rodadas, a magnetização começa exatamente em 1/2, mas abaixo dela, e somente uma rodada começa acima de 1/2. Fato que resulta em um comportamento duvidoso também para a pseudo-susceptibilidade magnética, conforme mostra a Fig. 4.5, com uma divergência para temperaturas próximas a zero. Mesmo que os máximos tenham caído próximos uns aos outros, acreditamos que a altura dos mesmos não se encontram no lugar correto, fato este que pode influenciar na determinação do expoente crítico γ . Tendo em vista este comportamento observado, concluímos que o parâmetro de ordem dado pela Eq. 4.10 somente deve ser utilizado para tamanhos de redes que não sejam múltiplos de

três. Caso deseje-se trabalhar com redes múltiplas de três, deve-se então usar o parâmetro de ordem como na Eq. 4.4.

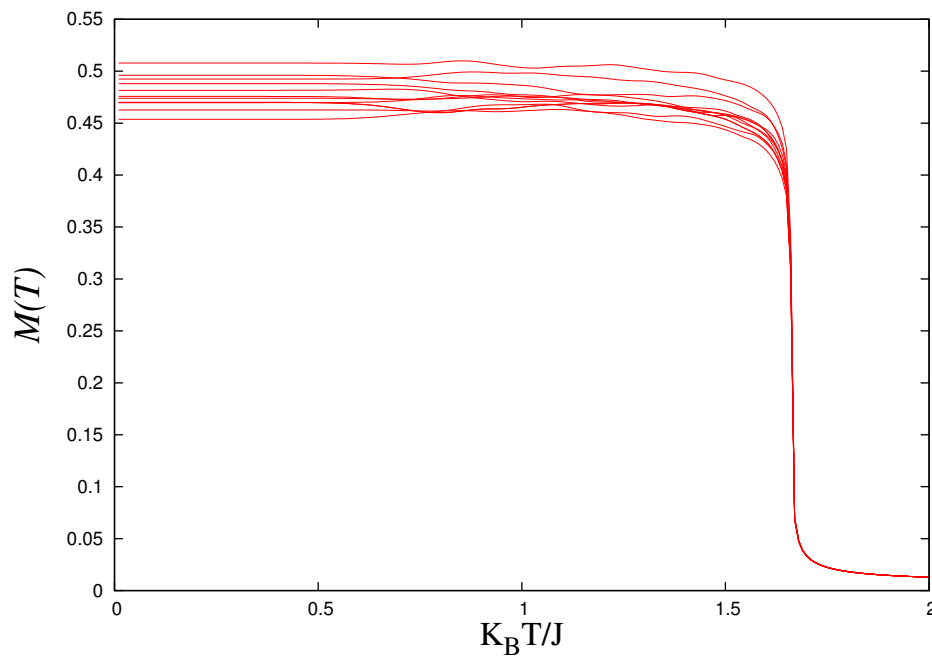


Figura 4.4: Magnetização para o tamanho de rede $L = 84$.

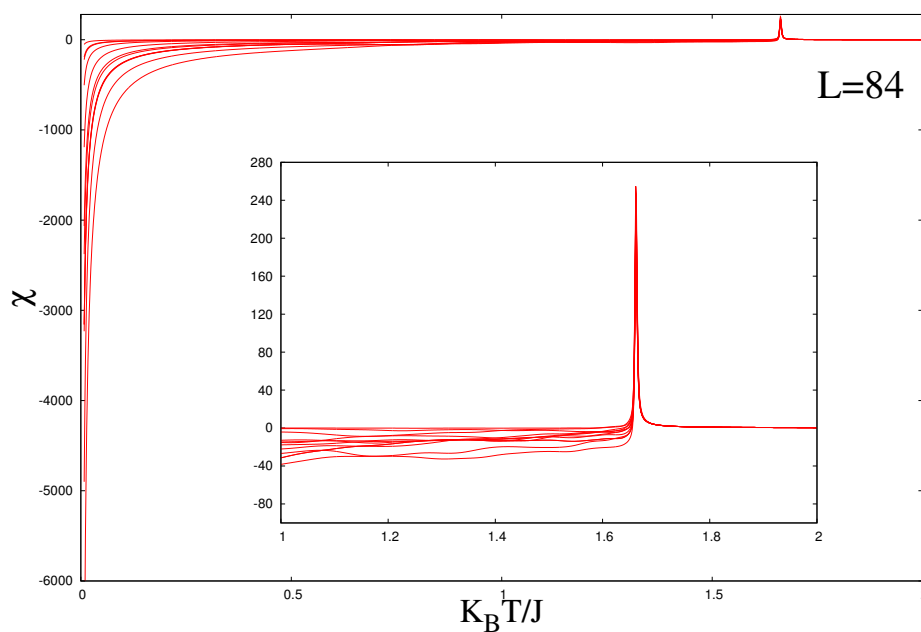


Figura 4.5: Pseudo-susceptibilidade magnética para o tamanho de rede $L = 84$.

4.2 O Modelo de Baxter-Wu spin -1

Conforme mencionado, a classe de universalidade do modelo BW é a mesma do modelo de Potts 4-estados, com $\alpha = \nu = 2/3$, $\beta = 1/12$, $\gamma = 7/6$. Este comportamento é esperado, uma vez que ambos modelos possuem a mesma simetria e o mesmo grau de degenerescência no estado fundamental. Contudo, diferente do modelo aqui estudado, o Potts $q = 4$ necessita de correções logarítmicas. Portanto, a fim de investigar essa aparente contradição, Kinzel e colaboradores [94] estudaram uma generalização do BW com a inserção de vacâncias. Nesse novo cenário, temos o modelo de Baxter-Wu spin-1, onde agora, as variáveis de spin podem assumir três valores discretos 0 e ± 1 , e a interação entre eles é descrita pelo mesmo hamiltoniano do caso spin-1/2, Eq. 4.1. Eles concluíram através do comportamento do comprimento de correlação e usando procedimentos de escala de tamanho finito, que uma transição de segunda ordem pode acontecer apenas para o modelo puro, spin-1/2.

Não obstante, outro estudo do spin-1 foi feito por Costa e Plascak [21], usando simulações de Monte Carlo com o algoritmo de Metropolis. Aplicando as técnicas de escala de tamanho finito, eles obtiveram uma transição de fase diferente do primeiro trabalho. Eles avaliaram o comportamento dos máximos de derivadas logarítmicas da magnetização, onde obtiveram um valor para o expoente crítico ν próximo ao do modelo puro, caso spin-1/2. Obtiveram os demais expoentes críticos também e uma temperatura crítica igual a $T_c = 1.6607(3)$. Interpretaram isso considerando que, mesmo com a inserção de vacâncias, o modelo sofre uma transição de fases descontínua.

Objetivando verificar qual das duas abordagens acima está correta e caracterizar a ordem da transição de fases que o modelo Baxter-Wu spin-1 descreve, foi feito um estudo entrópico deste modelo, com a análise de algumas quantidades que podem revelar a ordem da transição de fase, tais como a magnetização total, a energia média por spin, a distribuição de probabilidades da energia, e os cumulantes de quarta ordem da magnetização e da energia.

4.3 O Modelo de Baxter-Wu spin-1 com interação do campo cristalino

O Modelo de Baxter-Wu spin-1 com interação do campo cristalino é uma generalização do modelo de Baxter-Wu spin-1/2, onde considera-se, além do termo de interação entre spins vizinhos, o termo do campo cristalino. O seu hamiltoniano é dado por

$$H_{BWD} = -J \sum_{\langle i,j,k \rangle} s_i s_j s_k + D \sum_i^N s_i^2, \quad (4.14)$$

onde D é o campo cristalino e a segunda somatória é sobre todos os N sítios da rede. (Se $s_i = \pm 1$ temos que o segundo termo na Eq. 4.14 se torna apenas uma constante). Em seu aspecto, o hamiltoniano descrito acima parece-se muito com o do modelo de Blume-Capel, modelo este que foi introduzido de modo independente por Blume [7] e Capel [8] em 1966. O seu comportamento crítico é descrito por um diagrama de fases que apresenta uma linha de transição contínua e uma linha descontínua separadas por um ponto tricrítico, ou seja, a fase ordenada ferromagnética e a fase desordenada paramagnética são separadas por uma linha de transições que ora é contínua ora descontínua, separadas por um ponto tricrítico.

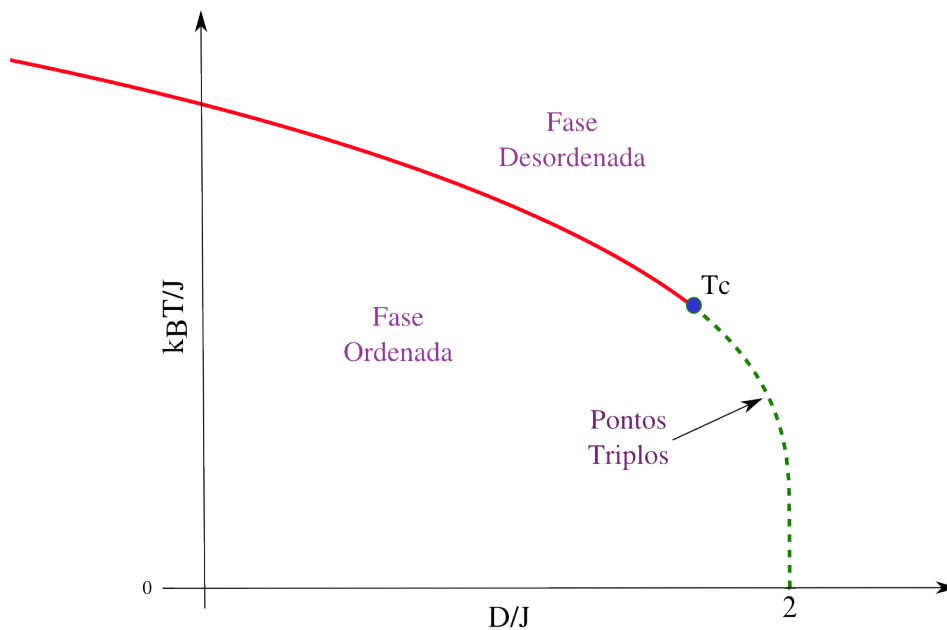


Figura 4.6: Diagrama de fases esquemático para o modelo de Baxter-Wu com interação do campo cristalino.

O modelo de Baxter-Wu com interação do campo cristalino foi estudado por Costa e colaboradores [21] com o uso de técnica de grupo de renormalização, teoria de escala de tamanho finito e invariância conforme. Mais recentemente, Dias e colaboradores [22] utilizaram escala de tamanho finito e invariância conforme para caracterizar os casos spin-1 e spin-3/2. Em ambos os trabalhos, foi obtido um diagrama de fases parecido com o do modelo de Blume-Capel, porém, com a presença de um ponto pentacrítico: No limite para temperaturas próximas a zero, as quatro fases ordenadas $(+++)$, $(+--)$, $(--+)$ e $(-+-)$ coexistem. Conforme aumenta-se a temperatura, encontra-se uma linha de transição, a partir da qual o sistema torna-se paramagnético. Ora a transição é contínua, e as quatro fases são indistinguíveis, ora de primeira ordem com a coexistência de cinco fases (uma fase ferromagnética, três ferrimagnéticas e a fase (000)). A linha contínua é separada da linha de primeira ordem por um ponto pentacrítico. Valores do campo cristalino $D/J > 2$, o estado que minimiza a energia é o microestado com $s_i = 0$.

Exatamente em $D/J = 2$, uma transição de primeira ordem ocorre com as cinco fases coexistindo, e para valores negativos do campo $D/J \rightarrow -\infty$ somente os estados $s_i = \pm 1$ estão ocupados, de modo que recuperamos o BW spin-1/2, e em $D = 0$ temos o BW spin-1. A determinação do ponto pentacrítico ainda é incerta, e ao estudar este modelo desejamos caracterizar completamente o seu diagrama de fases determinando exatamente a localização do ponto pentacrítico, e compará-lo aos resultados obtidos por Costa e Dias.

No trabalho de [113], utilizando simulações de MC, buscou-se determinar a localização do ponto pentacrítico. Analisou-se o cumulante do parâmetro de ordem como função do campo cristalino para diversos valores de temperatura, onde, o cumulante apresenta um mínimo agudo no campo crítico. Os valores encontrados estiveram nos intervalos de temperatura [1.000; 1.100] e de campo cristalino [1.60; 1.70].

4.4 O Modelo de Baxter-Wu 3D

Desde a sua definição em 1973, para o modelo de Baxter-Wu não há nenhuma proposta de uma expansão para três dimensões. No entanto, se adotarmos corretas condições de contorno, pode-se expandir as interações de uma rede bidimensional para um sistema tridimensional onde as interações entre os spins da rede são do tipo Baxter-Wu. Deste modo nesta seção será apresentada uma construção do modelo de Baxter-Wu em três dimensões.

Tomando um hexágono de uma rede bidimensional triangular, temos que três eixos passam pelo seu centro. Para cada um dos eixos, podemos associar um hexágono, o qual faça um ângulo de 60° com o plano inicial, conforme mostra a Fig. 4.7.a. Nela, temos que o hexágono inicial é formado pelos pontos (1, 2, 3, 4, 5, 6) e o seu centro está o zero. Os outros três hexágonos serão formados pelos pontos (1, 9, 8, 4, 12, 10), (2, 9, 7, 5, 12, 11) e (3, 8, 7, 6, 10, 11). Assim, um spin, que no caso 2D tem seis primeiros vizinhos, e é circundado por seis faces triangulares, passa a ter agora 12 primeiros vizinhos e conta com 24 faces triangulares que o circunda.

Neste esquema, os três sítios dos planos superiores se localizarão no centro de três faces triangulares, ao passo que os outros três sítios inferiores estão no centro das outras três faces triangulares, como mostra a Fig. 4.7.b.

Este modelo passa a ser definido então, em uma rede tridimensional, com interações triangulares, de modo que a interação é dada por

$$H_{BW3D} = -J \sum_{\langle i,j,k \rangle} s_i s_j s_k, \quad (4.15)$$

onde a soma se estende sobre todas as possíveis faces triangulares, e as variáveis de spin estão localizadas nos vértices dos triângulos, podendo assumir os valores $\sigma = \pm 1$. J é a

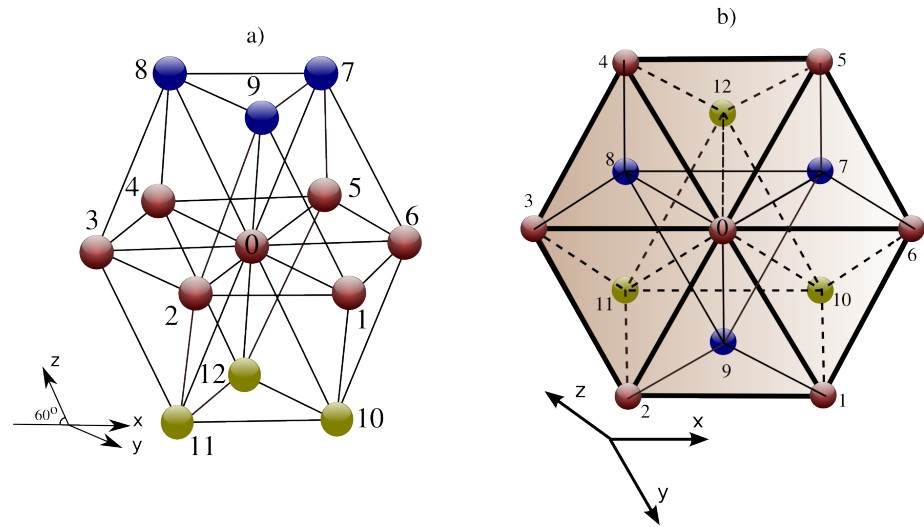


Figura 4.7: a) Rede tridimensional do modelo de Baxter-Wu. b) Perspectiva do plano XY da rede tridimensional do modelo de Baxter-Wu. As linhas contínuas indicam as ligações na frente do plano e as linhas pontilhadas denotam as ligações atrás do plano.

constante de acoplamento que fixa a escala de energia da rede, e é a mesma para as interações em quaisquer dos planos.

Essa rede pode ser transposta isomorficamente em uma rede cúbica, de modo que dois planos, o $(3, 8, 7, 6, 10, 11)$ e o $(1, 9, 8, 4, 12, 10)$, serão coincidentes aos planos XZ e YZ , conforme mostra a Fig. 4.8.a. Porém o plano $(2, 9, 7, 5, 12, 11)$ consistirá em um plano oblíquo aos planos XZ e YZ , conforme mostra a Fig. 4.8.b. Sendo assim, o hamiltoniano, Eq. 4.15, toma a forma

$$H_{BW3D} = -J \left[\sum_{\langle i,j,k \rangle} s_i s_j s_k \right]_{XY} - J \left[\sum_{\langle i,j,k \rangle} s_i s_j s_k \right]_{XZ} - J \left[\sum_{\langle i,j,k \rangle} s_i s_j s_k \right]_{YZ} - J \left[\sum_{\langle i,j,k \rangle} s_i s_j s_k \right]_{Oblíquo},$$

onde as somas se estendem sobre os triângulos da rede em cada plano XY , XZ , YZ e o plano oblíquo, respectivamente.

Seguindo a transposição da rede triangular para a rede quadrada, neste cenário tridimensional, a energia de uma configuração para uma rede cúbica definido pelo hamiltoniano 4.1 pode ser calculado como

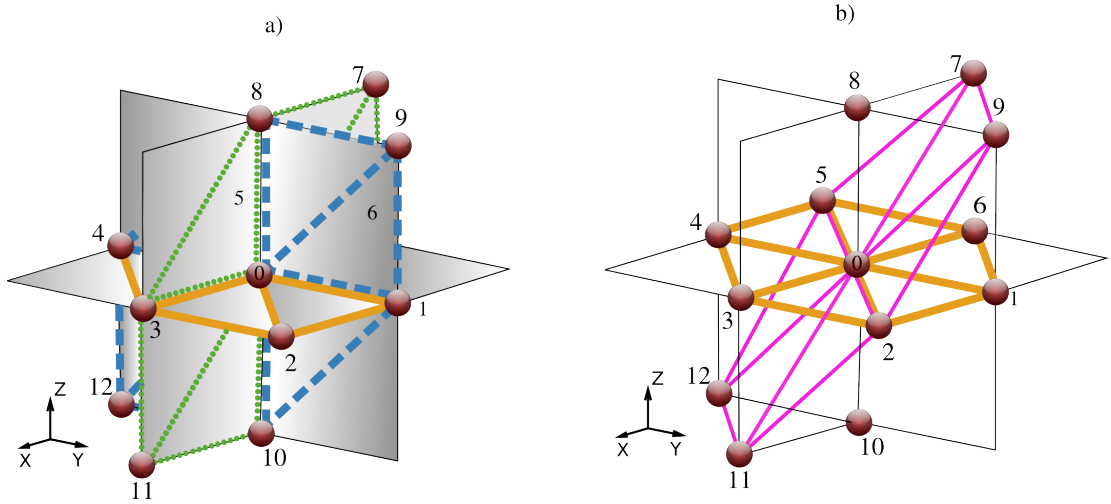


Figura 4.8: a) Rede tridimensional do modelo de Baxter-Wu transposta para uma rede cúbica. b) Ligações no plano oblíquo.

$$\begin{aligned}
E = & \frac{J}{3} \left[\sum_{i=1}^L \sum_{j=1}^L s_{i,j,k} (s_{i+1,j,k} s_{i,j-1,k} + s_{i,j-1,k} s_{i-1,j-1,k} \right. \\
& + s_{i-1,j-1,k} s_{i,j-1,k} + s_{i,j-1,k} s_{i,j+1,k} \\
& + s_{i,j+1,k} s_{i+1,j+1,k} + s_{i+1,j+1,k} s_{i+1,j,k} \left. \right) \\
& + \sum_{i=1}^L \sum_{k=1}^L s_{i,j,k} (s_{i+1,j,k} s_{i,j,k+1} + s_{i,j,k+1} s_{i-1,j,k+1} \\
& + s_{i-1,j,k-1} s_{i+1,j,k} + s_{i-1,j,k} s_{i,j,k-1} \\
& + s_{i,j,k-1} s_{i+1,j,k-1} + s_{i+1,j,k-1} s_{i+1,j,k} \left. \right) \\
& + \sum_{j=1}^L \sum_{k=1}^L s_{i,j,k} (s_{i,j,k+1} s_{i,j-1,k} + s_{i,j-1,k} s_{i,j-1,k-1} \\
& + s_{i,j+1,k} s_{i,j+1,k+1} + s_{i,j+1,k+1} s_{i,j,k+1} \\
& + s_{i,j-1,k-1} s_{i,j,k-1} + s_{i,j,k-1} s_{i,j+1,k} \left. \right) \\
& + \sum_{i=1}^L \sum_{j=1}^L \sum_{k=1}^L s_{i,j,k} (s_{i-1,j-1,k} s_{i-1,j,k+1} + s_{i-1,j,k+1} s_{i,j+1,k+1} \left. \right) \\
& + s_{i,j+1,k+1} s_{i+1,j+1,k} + s_{i+1,j+1,k} s_{i+1,j,k-1} \\
& + s_{i+1,j,k-1} s_{i,j-1,k-1} + s_{i,j-1,k-1} s_{i-1,j-1,k} \left. \right].
\end{aligned} \tag{4.16}$$

Nessa formulação tridimensional, foi adotado como parâmetro de ordem a magnetização total do sistema, Eq. 4.10, de modo que nas simulações serão utilizadas tamanhos de redes que não sejam múltiplos de três.

RESULTADOS

5.1 Modelo de Baxter-Wu Spin-1/2

Para estudar o modelo de Baxter-Wu no caso spin-1/2 puro, foram realizadas extensivas simulações com a abordagem em duas frentes, a saber, para os tamanhos de redes $L = 32, 40, 44, 52, 56, 64, 76, 80, 86$ e 92 , as quais não são múltiplas de três, e para $L = 36, 42, 48, 54, 60, 66, 72, 78, 84$ e 90 , estas sendo múltiplas de três. Para ambas as abordagens foram feitas o total de $n = 24, 20, 20, 16, 16, 16, 12, 12, 12$ e 12 rodadas independentes para cada tamanho de rede respectivamente, o que caracteriza uma amostra. No trabalho da Ref. [40], notou-se que dois procedimentos de escala de tamanho finito podem levar a diferentes resultados para a temperatura crítica e expoentes críticos cujas barras de erros podem não concordar entre si. Assim, para superar essa dificuldade é necessário realizar 10 rodadas independentes de simulações de escala de tamanho finito e então tomar uma média entre eles. A média final é obtida sobre dez amostras.

Nas simulações realizadas, adotou-se o MCS para atualizar a densidade de estados e as médias microcanônicas foram acumuladas somente a partir do fator de modificação $f_{micro} = f_7$. Para finalizar as simulações, foi utilizado o parâmetro ε , (definido na Eq. 3.8). Na parte superior da Fig. 5.1, observa-se a evolução da temperatura do máximo do calor específico ao longo da amostragem de Wang-Landau após o $f_{micro} = f_7$ para o tamanho de rede $L = 52$ para uma única rodada em função do tempo de MC. Os pontos representam onde o fator de modificação foi atualizado. Na parte inferior da mesma figura temos a evolução da quantidade $\log_{10}(\varepsilon)$ ao longo da mesma simulação. No último nível de WL nota-se que o logaritmo de ε permanece abaixo do valor -4 , indicando que a simulação pode ser finalizada no final do f_{16} .

Para facilitar a exposição dos resultados, serão estabelecidos os seguintes rótulos. As quantidades obtidas a partir das redes não-múltiplas de três serão $\alpha_1, \beta_1, \gamma_1, \nu_1$, e T_{c1} , e para as redes múltiplas de três usaremos $\alpha_2, \beta_2, \gamma_2, \nu_2$, e T_{c2} .

Lançando mão das funções termodinâmicas definidas nas Eqs. 2.44 - 2.49, pode-

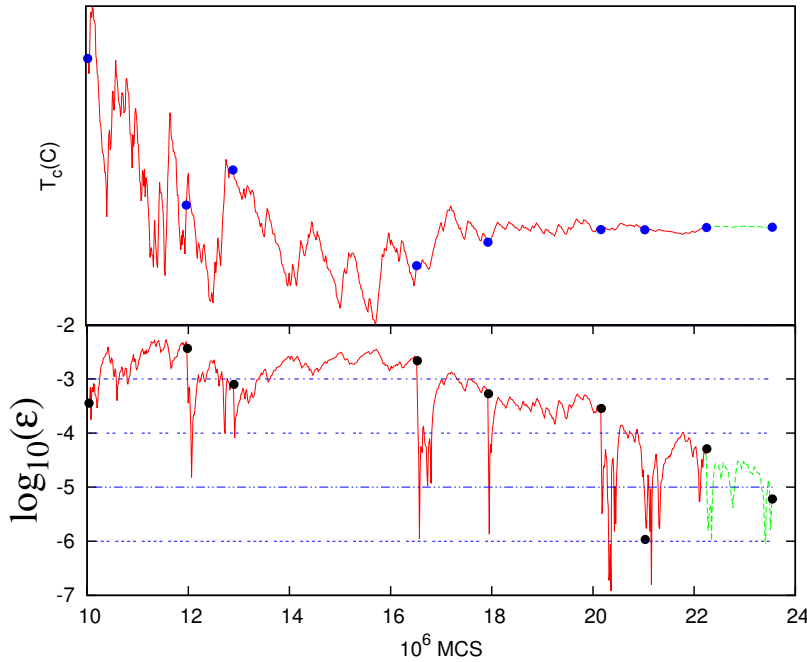


Figura 5.1: Painel superior: Evolução da temperatura do pico do calor específico durante um nível de WL partindo do f_7 para uma única rodada. Os pontos mostram onde o fator de modificação foi atualizado. Painel inferior: Evolução do logaritmo do parâmetro de checagem ϵ durante a mesma simulação.

se obter o expoente crítico ν mesmo ainda não tendo calculado a temperatura crítica. Localizando os máximos destas funções, determina-se o expoente ν como a inclinação das retas dadas na Eq. 2.50, uma vez que à temperatura crítica $T_c(t = 0)$, os coeficientes \mathcal{V}_j devem ser constantes, independentemente do tamanho do sistema.

De cada uma das seis retas resulta em um coeficiente angular, $\frac{1}{\nu}$, cujo erro é $\Delta\nu = \Delta(\frac{1}{\nu})/(\frac{1}{\nu})^2$, com a média tomada sobre incertezas desiguais [114].

A Fig. 5.2 mostra os ajustes desses pontos cujos ajustes lineares dão $1/\nu_1 = 1.5027(11)$ e $1/\nu_2 = 1.5485(45)$, resultando em $\nu_1 = 0.66564(47)$ e $\nu_2 = 0.6456(19)$. Os gráficos mostram apenas um dos dez conjuntos de escala de tamanho finito realizados. Os expoentes críticos ν_1 e ν_2 foram calculados sobre os dez conjuntos de rodadas a fim de obtermos melhor precisão em seu resultado. O valor obtido em cada conjunto de rodadas é mostrado na Tab. 5.1 e seu resultado final aparece na última linha.

Após o expoente crítico ν ser devidamente estimado, usamos a Eq. 2.42 para determinar T_c como a extrapolação de $L \rightarrow \infty$ ($L^{-1/\nu} = 0$) dos ajustes lineares dos máximos do calor específico e da susceptibilidade, definidos nas Eqs. 3.12 e 3.13. Temos que $T_c(L)$ é a temperatura dos máximos do calor específico e da susceptibilidade e o valor para a temperatura crítica é o coeficiente linear da reta que melhor se ajusta aos dados. Como pode-se perceber na Fig. 5.3, os ajustes lineares convergem para T_c em $L^{-1/\nu} = 0$. O resultado para cada conjunto é a média dos valores obtidos para a susceptibilidade e o calor específico. O valor final para a temperatura crítica encontrado foi $T_c = 2.269194(45)$.

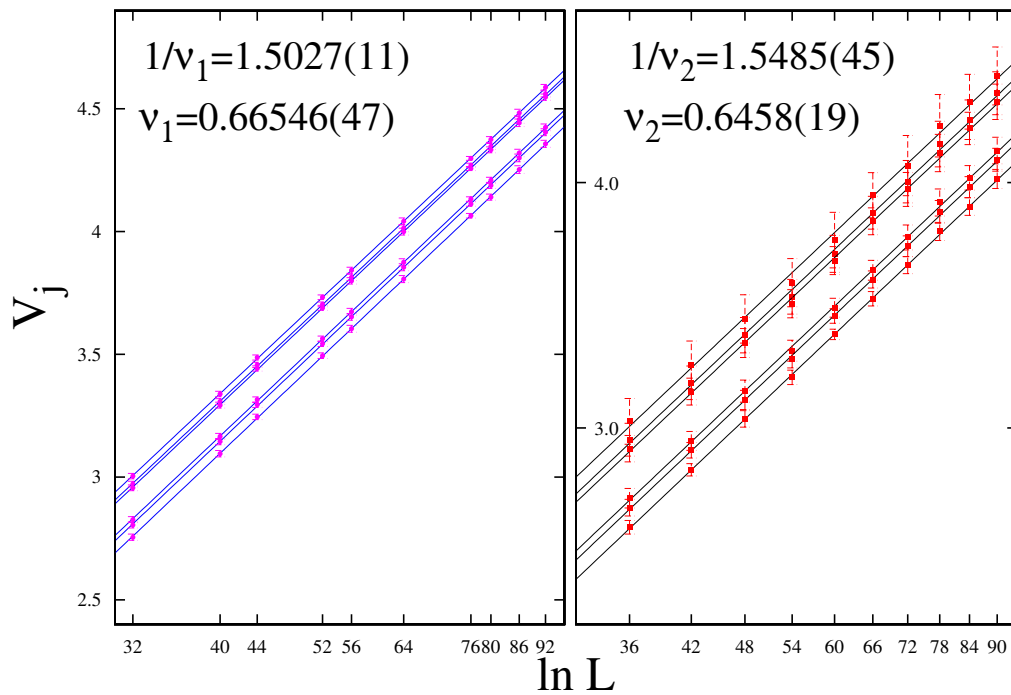


Figura 5.2: Dependência de V_j com o logaritmo do tamanho de rede. As inclinações fornecem $1/\nu$.

Os números entre parênteses são as barras de erros que devem ser somadas sobre as duas últimas casas decimais.

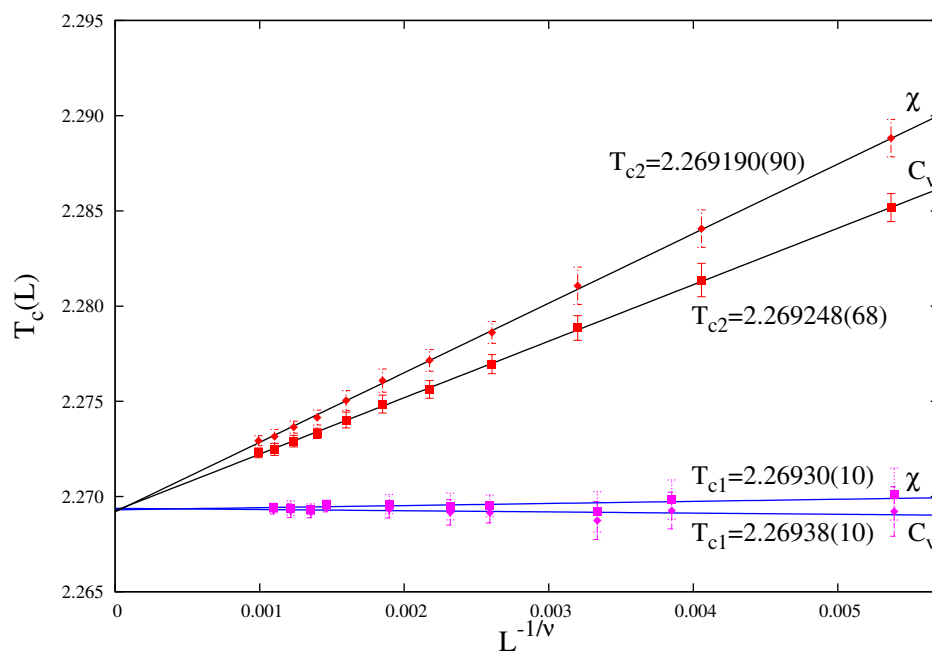


Figura 5.3: Dependência das temperaturas dos máximos do calor específico e da susceptibilidade com o tamanho de rede, com $\nu_1 = 0.6635$ e $\nu_2 = 0.6514$.

Após calcularmos o expoente crítico ν e a temperatura crítica, utilizamos as Eqs. 2.40, 2.37 e 2.41 para calcularmos as razões $\frac{\beta}{\nu}$, $\frac{\gamma}{\nu}$ e $\frac{\alpha}{\nu}$ a partir das propriedades de escala da magnetização, da susceptibilidade e do calor específico respectivamente, uma vez que são proporcionais a $L^{\beta/\nu}$, $L^{\gamma/\nu}$ e $L^{\alpha/\nu}$ de modo assintótico.

Nas Figs. 5.4, 5.5 e 5.6, estão os gráficos dos ajustes lineares para cada expoente. Obtemos $\frac{\beta_1}{\nu_1} = 0.109(12)$, $\frac{\beta_2}{\nu_2} = 0.115(12)$, $\frac{\gamma_1}{\nu_1} = 1.7725(33)$, $\frac{\gamma_2}{\nu_2} = 1.832(32)$, e $\frac{\alpha_1}{\nu_1} = 1.0140(29)$, $\frac{\alpha_2}{\nu_2} = 1.235(54)$, respectivamente.

Calculamos então $\beta = \nu \frac{\beta}{\nu}$ com $\Delta\beta = \frac{\beta}{\nu}\Delta\nu + \nu\Delta\frac{\beta}{\nu}$, e do mesmo modo para γ e $\Delta\gamma$ e α e $\Delta\alpha$. Os valores obtidos são $\beta_1 = 0.0725(80)$, $\beta_2 = 0.0752(85)$, $\gamma_1 = 1.1761(46)$, $\gamma_2 = 1.194(30)$, e $\alpha_1 = 0.6728(32)$, $\alpha_2 = 0.6667(86)$.

Mais uma vez, frisamos que estes valores são calculados apenas para o primeiro conjunto de rodadas. Os resultados finais para os expoentes críticos e para a temperatura crítica são apresentados nas Tabs. 5.1 e 5.2.

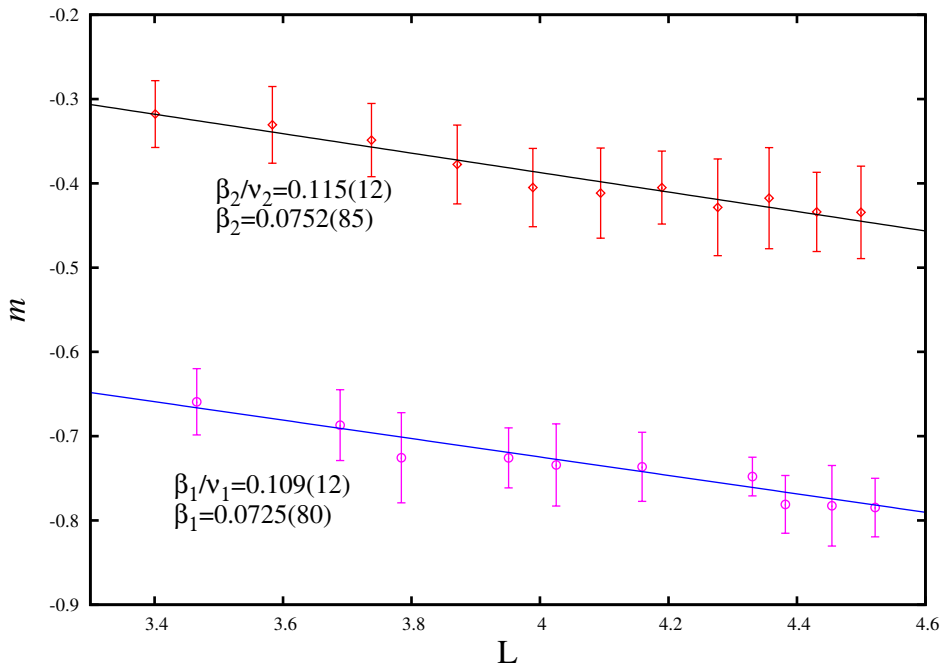


Figura 5.4: Resultado de escala de tamanho finito para o expoente β para $T_c = 2.269194$.

Examinando as duas abordagens, vemos que as respectivas barras de erros concordam na mesma ordem de magnitude, exceto para γ_1 e γ_2 , onde o segundo é quase dez vezes maior que o primeiro. Calculando o erro relativo, $\epsilon = \frac{X_{sim} - X_{exato}}{X_{exato}}$, para os expoentes obtemos para α , 0.0126, 0.0038, β , 0.0048, 0.00432, γ , 0.0118, 0.0060 e para ν , 0.0052, 0.0229, respectivamente. Podemos perceber que β e ν estão mais próximos no primeiro caso, ao passo que α e γ no segundo.

Calculando $\alpha + 2\beta + \nu$ e comparando com a Eq. 2.18, obtemos, $(\alpha + 2\beta + \nu)_1 = 2.021(23)$ e $(\alpha + 2\beta + \nu)_2 = 1.998(52)$, cujos erros relativos são $\epsilon_1 = 0.011$ e $\epsilon_2 = 0.001$. Percebe-se que ora uma, ora outra é a melhor abordagem, porém, as barras de erros são

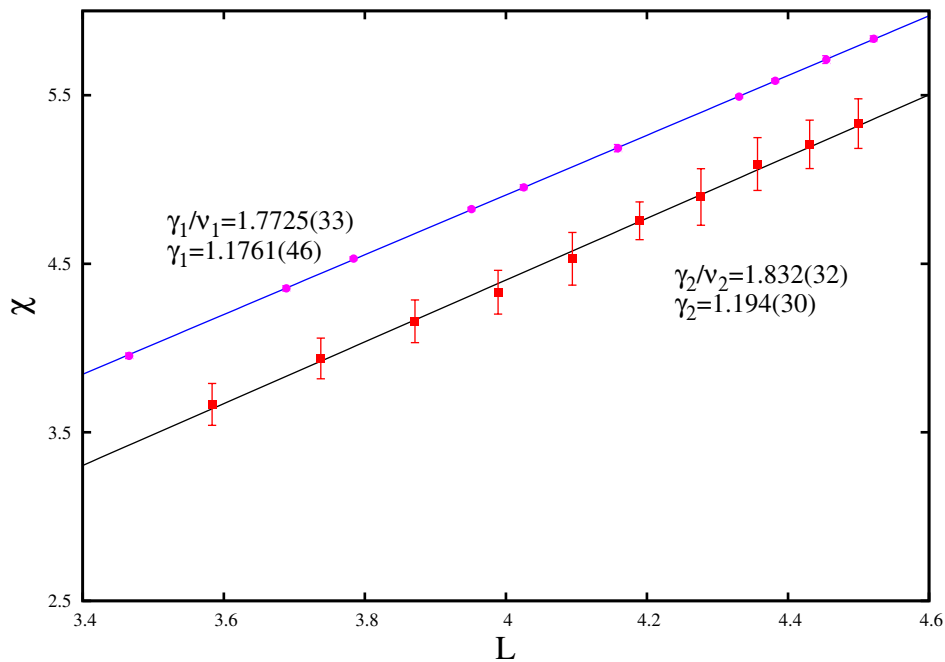


Figura 5.5: Resultado de escala de tamanho finito para o expoente γ para $T_c = 2.269194$.

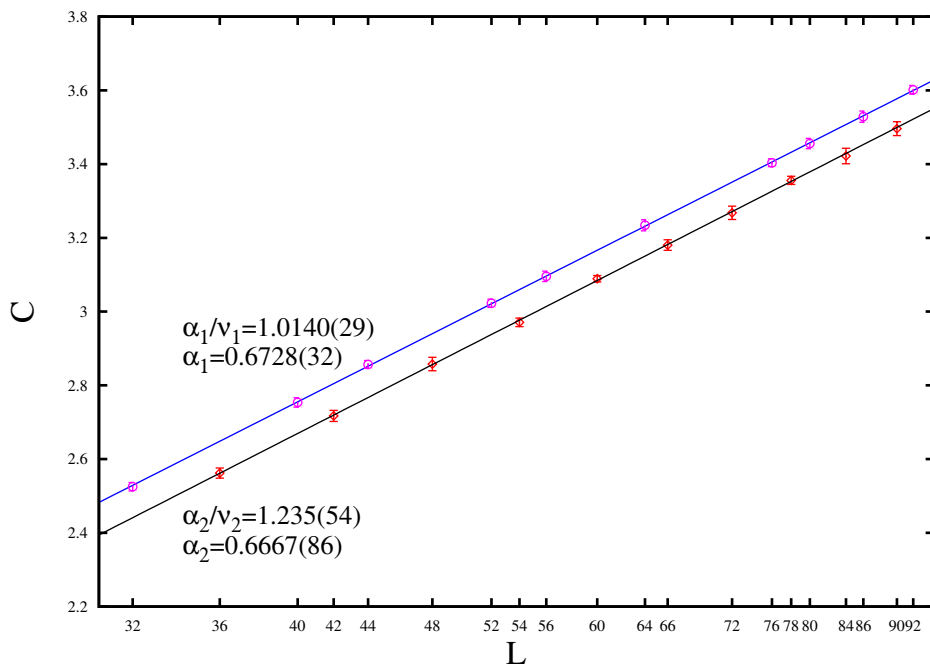


Figura 5.6: Resultado de escala de tamanho finito para o expoente α para $T_c = 2.269194$.

pequenas de modo que os resultados não caem longe do intervalo $\pm\sigma$. Em vista disso, para chegarmos aos resultados finais das nossas simulações, calculamos para cada caso médias simples e médias com barras de erros desiguais e escolhemos aquela com maior barra de erro. Fazendo assim, obtemos: $\nu = 0.6574(61)$, $\beta = 0.0812(67)$, $\gamma = 1.1772(33)$, $\alpha = 0.6697(54)$ e $T_c = 2.26924(2)$.

| Tamanhos de redes não-múltiplas de três | | | | |
|---|------------|------------|------------|--------------|
| ν | β | γ | α | T_c |
| 0.66546(47) | 0.0725(80) | 1.1761(46) | 0.6728(32) | 2.269345(72) |
| 0.66244(53) | 0.0812(52) | 1.1805(47) | 0.6767(34) | 2.269257(49) |
| 0.66241(39) | 0.0851(57) | 1.1816(41) | 0.6776(28) | 2.269175(48) |
| 0.66332(25) | 0.0916(67) | 1.1824(45) | 0.6758(22) | 2.269135(65) |
| 0.66273(43) | 0.0955(92) | 1.1827(49) | 0.6764(31) | 2.269047(86) |
| 0.66224(47) | 0.0868(93) | 1.1841(49) | 0.6763(33) | 2.269187(88) |
| 0.66416(45) | 0.0685(74) | 1.1776(42) | 0.6752(31) | 2.269408(66) |
| 0.66303(61) | 0.0904(66) | 1.1835(42) | 0.6750(38) | 2.269118(65) |
| 0.66608(54) | 0.0828(75) | 1.1791(46) | 0.6699(38) | 2.269242(79) |
| 0.66350(36) | 0.0713(79) | 1.1773(47) | 0.6758(30) | 2.269367(70) |
| 0.6635(13) | 0.0826(92) | 1.1805(28) | 0.6752(22) | 2.269228(37) |

Tabela 5.1: Dez resultados de escala de tamanho finito para os expoentes críticos ν , β , γ e α , e para a temperatura crítica T_c para redes não-múltiplas de três. A média sobre todas as rodadas é mostrada na última linha da tabela.

| Tamanhos de redes múltiplas de três | | | | |
|-------------------------------------|------------|-----------|------------|--------------|
| ν | β | γ | α | T_c |
| 0.6458(19) | 0.0752(85) | 1.194(30) | 0.6667(86) | 2.269227(54) |
| 0.6551(22) | 0.0851(81) | 1.159(29) | 0.6665(72) | 2.269309(53) |
| 0.6419(24) | 0.059(11) | 1.229(35) | 0.6635(80) | 2.269223(68) |
| 0.6560(19) | 0.0860(71) | 1.161(22) | 0.6586(71) | 2.269332(54) |
| 0.6497(28) | 0.079(12) | 1.182(41) | 0.6672(82) | 2.269182(73) |
| 0.6545(20) | 0.0788(69) | 1.174(24) | 0.6648(85) | 2.269241(57) |
| 0.6486(16) | 0.0750(68) | 1.191(30) | 0.6628(67) | 2.269227(80) |
| 0.6582(32) | 0.098(13) | 1.118(48) | 0.6612(79) | 2.269260(57) |
| 0.6533(21) | 0.0808(89) | 1.158(26) | 0.6668(78) | 2.269265(61) |
| 0.6506(19) | 0.080(10) | 1.172(34) | 0.6637(81) | 2.269153(44) |
| 0.6514(50) | 0.0797(99) | 1.174(29) | 0.6642(28) | 2.269242(17) |

Tabela 5.2: Dez resultados de escala de tamanho finito para os expoentes críticos ν , β , γ e α , e para a temperatura crítica T_c para redes múltiplas de três. A média sobre todas as rodadas é mostrada na última linha da tabela.

Na Tab. 5.3, mostramos a comparação dos nossos resultados com outros trabalhos que estão na literatura. É notável a proximidade das nossas estimativas dos expoentes críticos com os valores exatos.

5.1.1 Coeficientes a e b da divergência do inverso da temperatura microcanônica

Como subproduto das simulações, podemos calcular dois coeficientes, a e b , que são provenientes da divergência do inverso da temperatura microcanônica [44]. O inverso

| Modelo de Baxter-Wu spin-1/2 | | | | | |
|------------------------------|------------|------------|------------|------------|------------|
| | ν | β | γ | α | T_c |
| Exato[5] | 0.66666 | 0.08333 | 1.16666 | - | 2.2691853 |
| Dinâmica Crítica[15] | 0.621(9) | 0.0817(23) | - | - | - |
| Dinâmica Crítica[115] | 0.67(1) | 0.080(2) | - | - | - |
| Neste trabalho | 0.6574(61) | 0.0813(67) | 1.1772(33) | 0.6697(54) | 2.26924(2) |

Tabela 5.3: Comparação dos nossos resultados para a temperatura crítica e os expoentes críticos e ν , β e γ obtidos por Baxter e Wu [5] e de outros trabalhos da literatura.

da temperatura microcanônica é definido por

$$\frac{1}{T} = \frac{\partial S}{\partial E} = \lim_{\Delta E \rightarrow 0} \frac{\Delta S}{\Delta E}. \quad (5.1)$$

No estado fundamental, este limite deve ser infinito, no entanto, para um modelo discreto, como o Baxter-Wu, temos que $\Delta E = \text{const}$. Portanto, este limite será exato apenas se $L \rightarrow \infty$ ($E_{\min} \rightarrow -\infty$), onde L é o tamanho da rede [44].

O modelo de Baxter-Wu spin-1/2 possui quatro configurações possíveis no estado fundamental, conforme vemos na Fig. 4.3. Uma com todos os spins para cima e outras três onde os spins de uma sub-rede são negativos, sucessivamente. Se um único spin é invertido, então são perdidas seis ligações negativas com os primeiros vizinhos, e ganha-se seis ligações positivas. Portanto a variação de energia entre o estado fundamental e o próximo nível de energia é $\Delta E = 6 - (-6) = 12$, onde consideramos a constante de acoplamento J igual a 1. O primeiro nível de energia depois do estado fundamental possui $4L^2$ configurações, resultando em $\Delta S = \ln 4 + 2 \ln 4 - \ln 4$. Uma vez que $\Delta E = 12$, temos portanto $\frac{\Delta S}{\Delta E} = \frac{1}{6} \ln L \cong 0.1667 \ln L$, resultando nos coeficientes $a = 0.1667$ e $b = 1$.

Para calcular os coeficientes, acrescentamos nas simulações os tamanhos de redes $L = 8, 16, 20$ e 26 . Na Fig. 5.7, mostramos a dependência de $\frac{\Delta S}{\Delta E}$ no estado fundamental com os tamanhos de redes, usando os dados resultantes das simulações ao longo do melhor ajuste à curva $a \ln(bL)$. Nota-se a excelente concordância entre os resultados das simulações e os valores exatos. Os resultados finais para os coeficientes foram calculados sobre os de todas as rodadas, desconsiderando as barras de erros. Obtemos assim, $a_1 = 0.16667(26)$, $b_1 = 0.9999(57)$, $a_2 = 0.16680(27)$ e $b_2 = 0.9966(64)$. Comparando-os com os valores exatos, temos uma precisão para os coeficientes a e b , os quais concordam com uma barra de erro igual a $\pm \sigma$ com os valores exatos $a = \frac{1}{6}$ e $b = 1$.

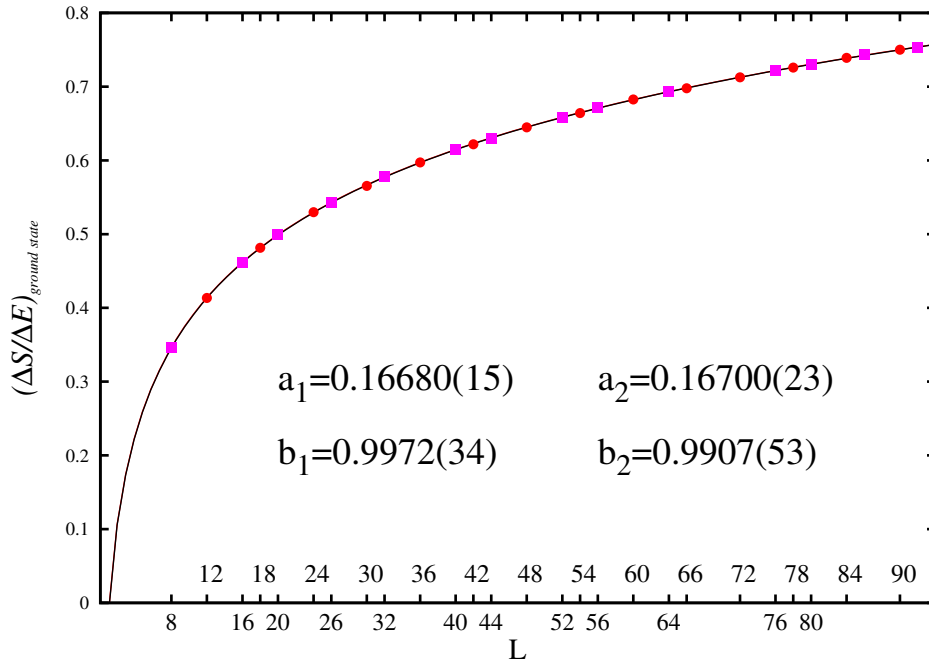


Figura 5.7: Dependência com o tamanho de rede de $\Delta S/\Delta E$ no estado fundamental para o primeiro conjunto de simulações. A linha contínua é o melhor ajuste linear dos dados a $a \ln(bL)$. As barras de erros são menores que os símbolos.

5.2 Modelo de Baxter-Wu Spin-1 Puro

Para o caso spin-1 puro, as simulações e os estudos de escala de tamanho finito foram realizados para os seguintes tamanhos de redes: $L = 32, 40, 44, 52, 56, 64, 76, 80, 86,$ e 92 , com o número de rodadas $N(L) = 24, 20, 20, 16, 16, 16, 12, 12, 12,$ e 12 , respectivamente. Neste caso, utilizamos somente tamanhos de redes não-múltiplas de três com base no estudo anterior (spin-1/2), pois consideramos os resultados de ambas abordagens (redes múltiplas e não múltiplas de três) equivalentes, e temos a vantagem de não dividir a rede nas três sub-redes. Nas simulações, foi adotado o MCS para atualizar a densidade de estados, as médias microcanônicas foram acumuladas somente a partir do fator de modificação $f_{micro} = f_7$ e para finalizar as simulações foi utilizado o parâmetro ε .

Primeiramente, mostramos os resultados da magnetização e da energia interna para algumas rodadas, nas Figs. 5.8 e 5.9, respectivamente. Para melhor visualização, mostramos apenas as curvas para os tamanhos de rede $L = 32, 64$ e 80 . Uma característica preliminar interessante é que as curvas caem praticamente uma em cima da outra. Isso é uma característica das simulações para o modelo de Baxter-Wu para tamanhos de redes que não são múltiplos de três. O calor específico, Fig. 5.10 e a susceptibilidade, 5.11 apresentaram resultados interessantes. Nessas figuras, podemos perceber que a temperatura dos respectivos máximos caem praticamente no mesmo ponto, mesmo para o tamanho de rede $L = 32$, diferentemente do que usualmente se observa, onde por causa

dos efeitos de tamanho finito, os picos deslocam-se gradativamente para a esquerda.

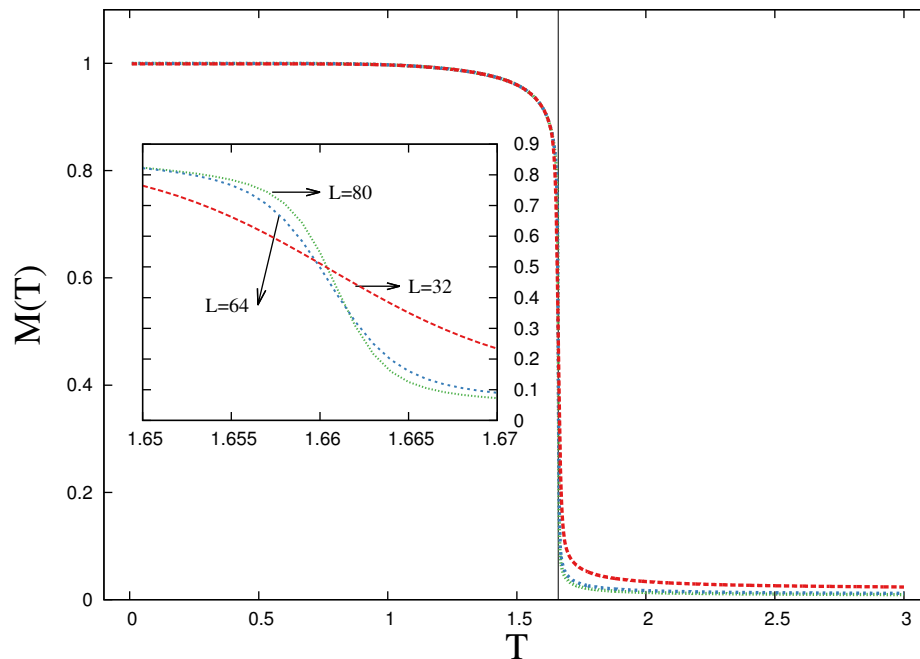


Figura 5.8: Magnetização para três tamanhos de rede $L = 32, 64$ e 80 . O destaque na figura mostra a região do cruzamento em torno da temperatura crítica. A linha vertical indica a temperatura crítica calculada nas simulações.

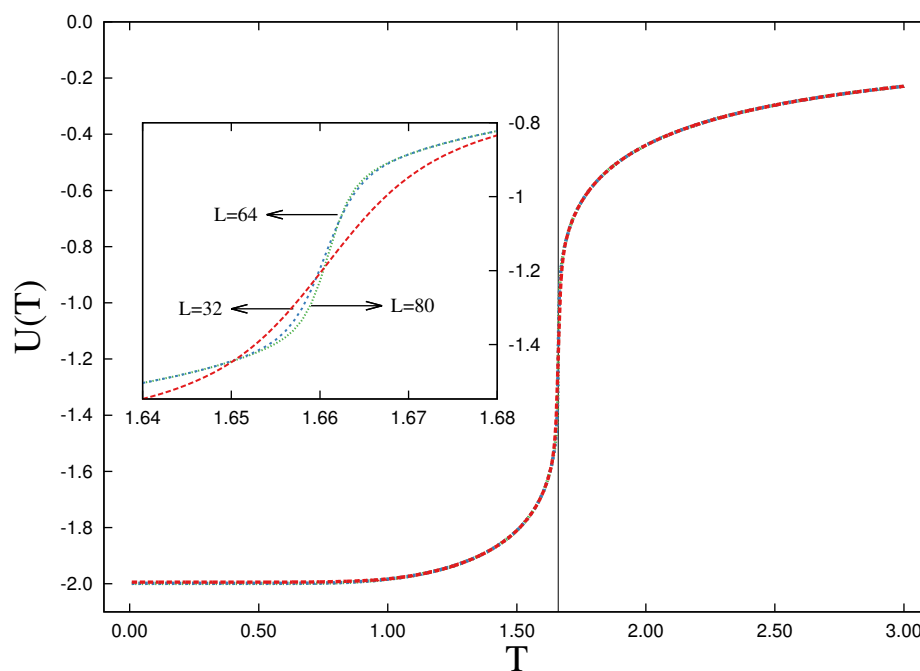


Figura 5.9: Energia interna para três tamanhos de rede $L = 32, 64$ e 80 . Na figura encontra-se em destaque a região do cruzamento em torno da temperatura crítica. A linha vertical indica a temperatura crítica calculada nas simulações.

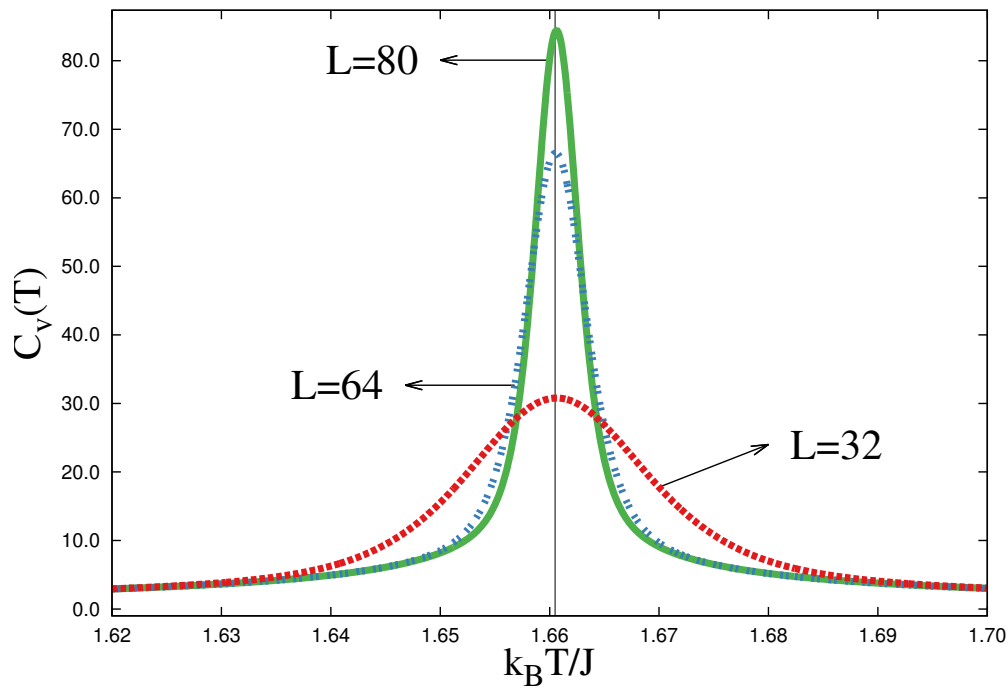


Figura 5.10: Calor específico para três tamanhos de rede $L = 32, 64$ e 80 . A linha vertical indica a temperatura crítica calculada nas simulações.

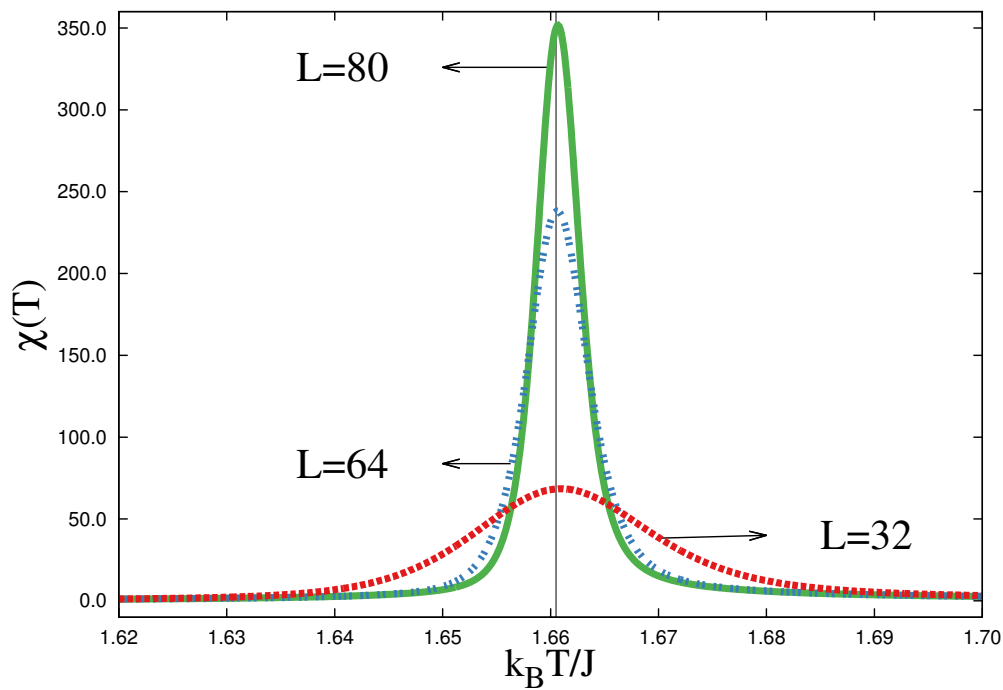


Figura 5.11: Susceptibilidade para três tamanhos de rede $L = 32, 64$ e 80 . A linha vertical indica a temperatura crítica calculada nas simulações.

Da energia interna, Fig. 5.9, e da magnetização, Fig. 5.8, nada se pode inferir quanto à ordem da transição, pois os seus gráficos não se mostraram abruptos o suficiente, evidenciando uma transição descontínua e nem suaves o bastante para tomá-la como contínua. Em transições descontínuas, o calor específico e a susceptibilidade apresentam-se como deltas com o seu máximo convergindo rapidamente para um pico agudo (confira a Fig. 2.4). Isto não acontece no caso das Figs. 5.10 e 5.11. Podemos ver uma gaussiana bem característica.

Se considerarmos o estudo anterior de Costa e Plascak, esperaríamos uma transição contínua neste caso particular e todas as grandezas analisadas apontariam nessa direção.

Na Fig. 5.12, é mostrado o cumulante de quarta ordem do parâmetro de ordem em função da temperatura. Pode-se ver a presença de um vale agudo negativo, um comportamento típico em transições de primeira ordem. O cruzamento dos cumulantes indica a região em torno da temperatura crítica, próxima a $T_c = 1.661$. A dependência do cumulante da energia com a temperatura, Fig. 5.13, apresentou o aparecimento de um mínimo proeminente, semelhante ao obtido por Challa [75], que diminuiu com o aumento do tamanho de rede e convergiu a $U_{E_{min}} = 0.66599$ no limite termodinâmico, Fig. 5.14, próximo ao valor esperado, igual a $2/3$.

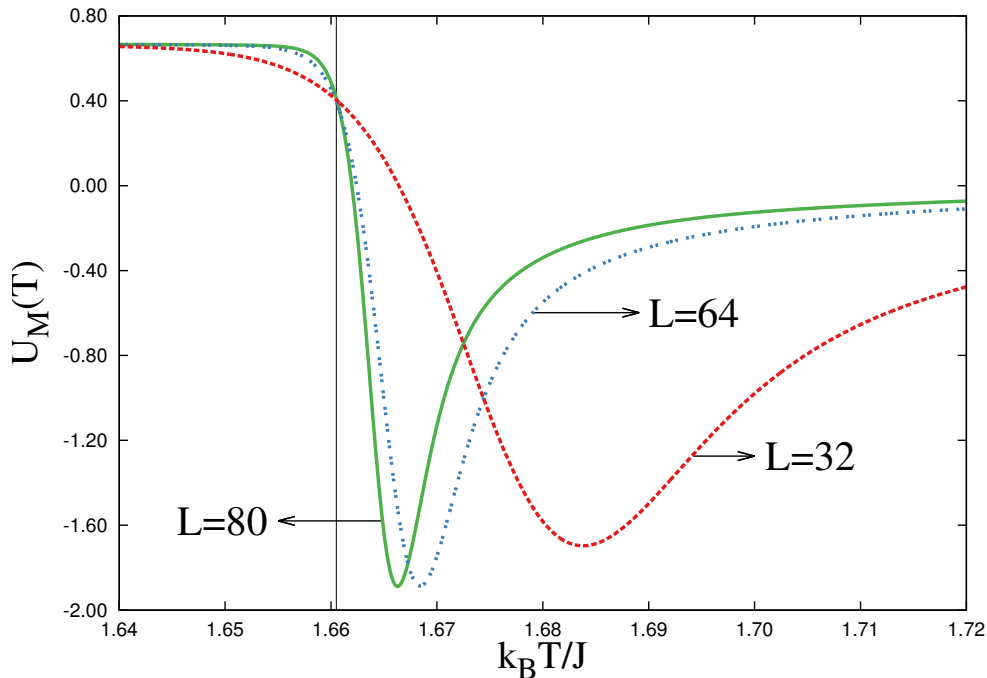


Figura 5.12: Cumulante de quarta ordem do parâmetro de ordem para três tamanhos de rede $L = 32, 64$ e 80 . O vale agudo negativo indica uma transição de primeira ordem.

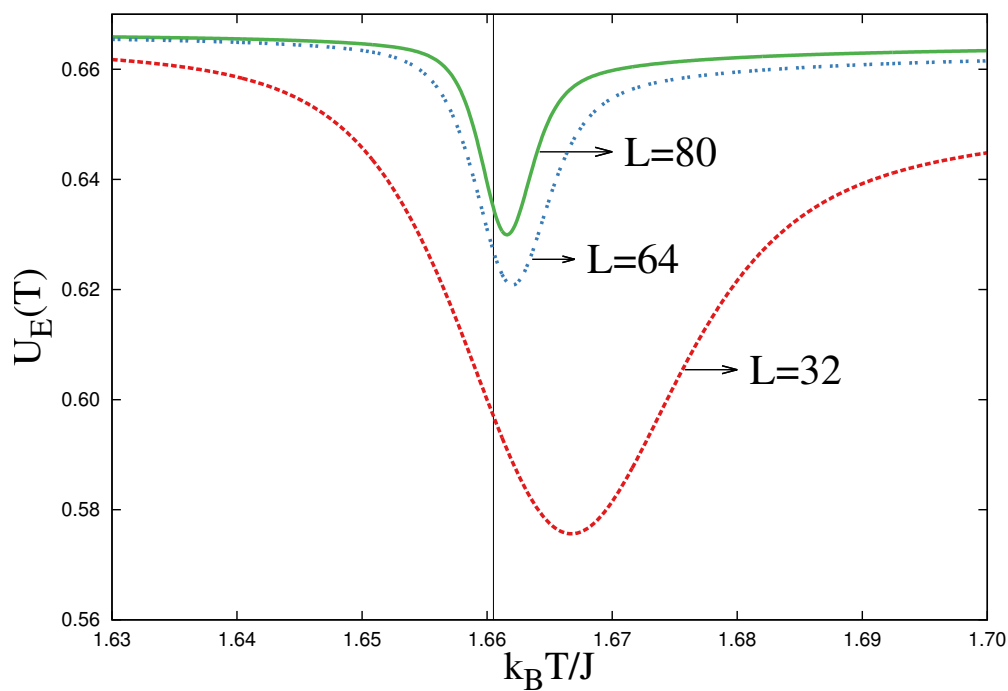


Figura 5.13: Cumulante de quarta ordem da energia como função da temperatura para três tamanhos de rede $L = 32, 64$ e 80 . O seu mínimo se direciona para $2/3$ conforme aumenta-se o tamanho da rede.

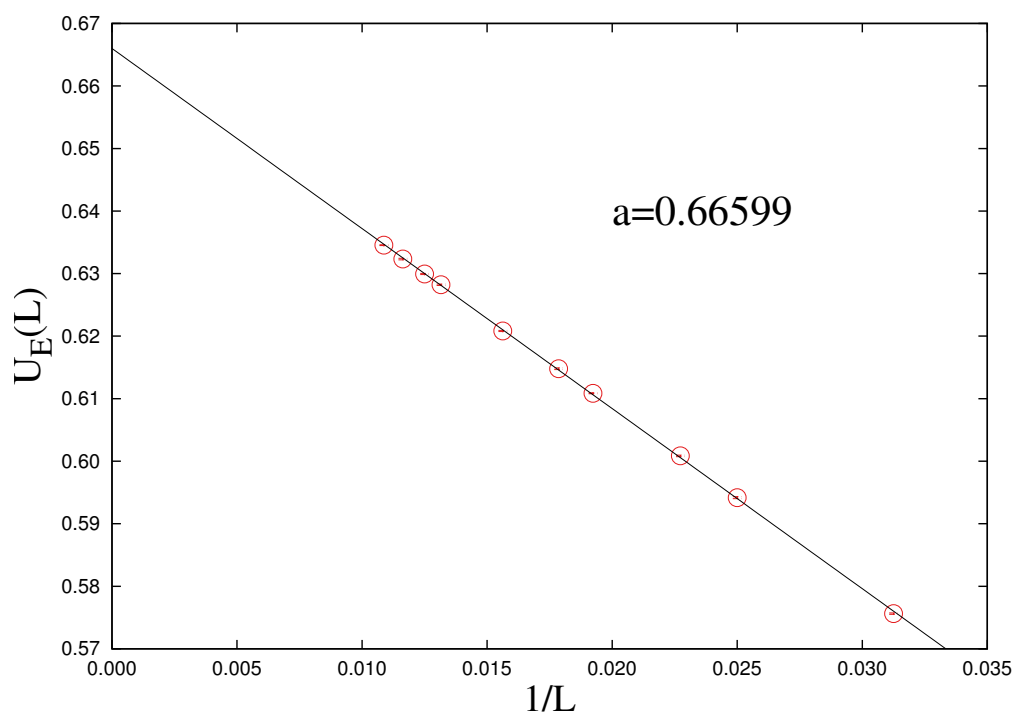


Figura 5.14: Evolução do mínimo do cumulante da energia com $1/L$. No limite termodinâmico, o mínimo do ajuste linear resultou em 0.66599 .

A distribuição de probabilidades da energia como função da energia por partícula, parte superior da Fig. 5.15, também confirmou os dois resultados anteriores com a presença de um pico duplo em $T = T_c(L)$. Na parte inferior da mesma figura, temos o inverso da temperatura microcanônica dependente da energia por partícula. A linha horizontal contínua no gráfico, corresponde ao inverso da temperatura crítica calculada nas simulações. Pode-se perceber que, para cada tamanho de rede, o mínimo em $P(E)$ corresponde ao ponto de inflexão em $\beta(E)$. O cruzamento entre os $\beta_L(E)$ se dá sobre a temperatura crítica. Tendo em vista esses resultados, por enquanto tudo leva a crer que Kinzel e seus colaboradores [94], estavam certos, e que a inserção de vacâncias no modelo de Baxter-Wu faz com que ele tenha uma transição descontínua. O próximo passo é computar o ajuste linear dos máximos das derivadas logarítmicas da magnetização e ver se elas retornam a dimensionalidade do sistema ou a razão $1/\nu$.

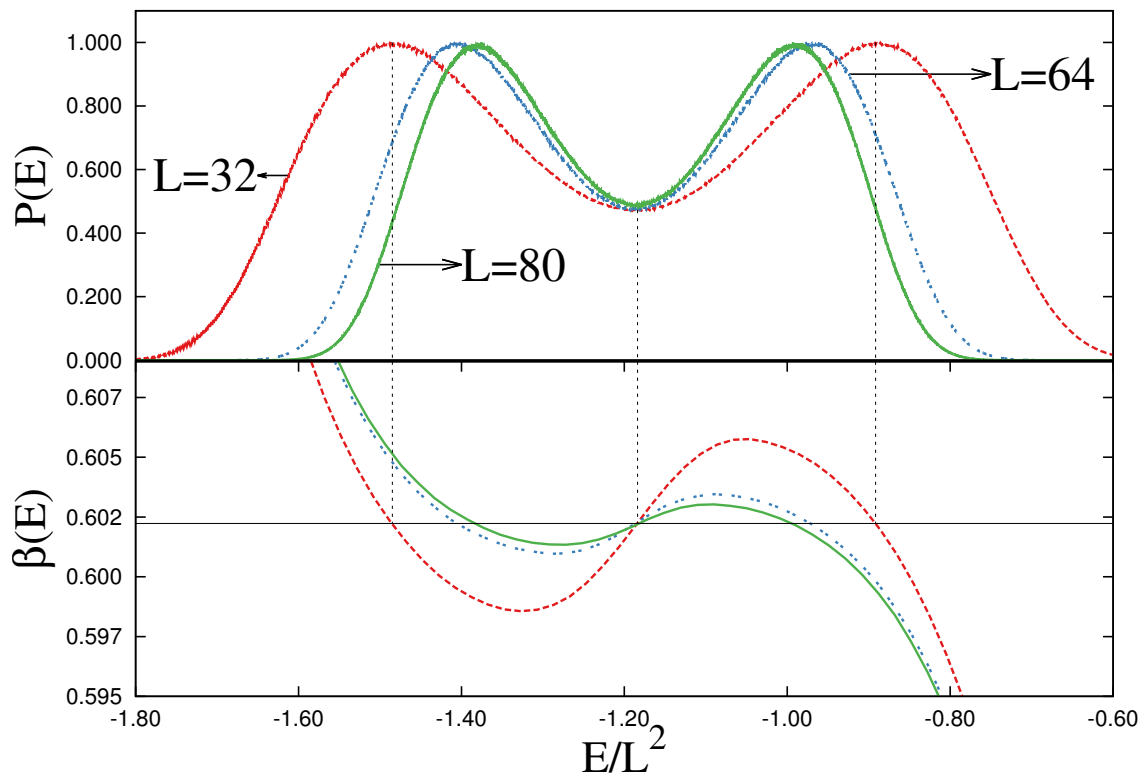


Figura 5.15: Em cima: Distribuição de probabilidades da energia para os tamanhos de redes $L = 32, 64$ e 80 . A estrutura de pico duplo foi obtida com a temperatura pseudocrítica para cada tamanho de rede. pseudo-crítica indica uma transição de primeira ordem. Embaixo: Inverso da temperatura microcanônica como função da energia. A linha horizontal indica o inverso da temperatura crítica.

5.2.1 Comportamento de Transição Contínua

Seguindo o mesmo protocolo de estudo do caso anterior spin-1/2, utilizamos as funções termodinâmicas definidas nas Eqs. 2.44 a 2.49 e seus respectivos máximos. A Fig. 5.16 mostra o ajuste linear das retas dada pela Eq. 2.50 que, para o primeiro conjunto de simulações, resultou o valor para o expoente crítico $\nu = 0.64309(36)$. Neste caso, também foram realizadas dez conjuntos de rodadas a fim de obter um resultado mais consistente. Os resultados dos dez conjuntos de amostras e o resultado final são apresentados na Tab. 5.4. Após calcular o expoente ν , calculamos a temperatura crítica utilizando a Eq. 2.42, onde $T_c(L)$ é a temperatura dos máximos do calor específico e da susceptibilidade e o valor para a temperatura crítica é o coeficiente linear da reta que melhor se ajusta aos dados. Na Fig. 5.17, os ajustes lineares convergem para T_c em $L^{-1/\nu} = 0$. O resultado para cada conjunto é a média dos valores obtidos para susceptibilidade e para o calor específico. Para a primeira amostra a temperatura crítica encontrada foi $T_c = 1.660469(26)$. Os números entre parênteses são as barras de erros que devem ser somadas sobre as duas últimas casas decimais.

Após calcular o expoente crítico ν e a temperatura crítica, utilizamos as Eqs. 2.40 e 2.37 e para calcular as razões $\frac{\beta}{\nu}$ e $\frac{\gamma}{\nu}$ a partir das propriedades de escala da magnetização e da susceptibilidade, respectivamente. Nas Figs. 5.18 e 5.19, estão os gráficos dos ajustes lineares e o resultado do primeiro conjunto de dados. Obtemos como valores da primeira rodada $\beta = 0.0896(69)$ e $\gamma = 1.1629(42)$. Os resultados finais para os expoentes críticos e para a temperatura crítica são apresentados na Tab. 5.4.

| ν | β | γ | T_c |
|-------------|------------|------------|--------------|
| 0.64309(36) | 0.0896(69) | 1.1629(42) | 1.660469(26) |
| 0.64309(47) | 0.0854(82) | 1.1640(52) | 1.660480(34) |
| 0.64568(22) | 0.0760(56) | 1.1588(42) | 1.660556(25) |
| 0.64404(33) | 0.0722(74) | 1.1576(48) | 1.660568(32) |
| 0.64365(32) | 0.0663(35) | 1.1622(42) | 1.660607(15) |
| 0.64463(42) | 0.0667(54) | 1.1594(56) | 1.660624(21) |
| 0.64442(39) | 0.0734(58) | 1.1584(45) | 1.660575(24) |
| 0.64373(35) | 0.0761(54) | 1.1610(45) | 1.660556(23) |
| 0.64413(32) | 0.0815(78) | 1.1604(42) | 1.660504(29) |
| 0.64178(37) | 0.0753(78) | 1.1663(44) | 1.660552(33) |
| 0.6438(10) | 0.0762(75) | 1.1611(28) | 1.660549(51) |

Tabela 5.4: Dez resultados de escala de tamanho finito para a temperatura crítica, T_c , e os expoentes ν , β e α . A média sobre todas as rodadas é mostrada na última linha.

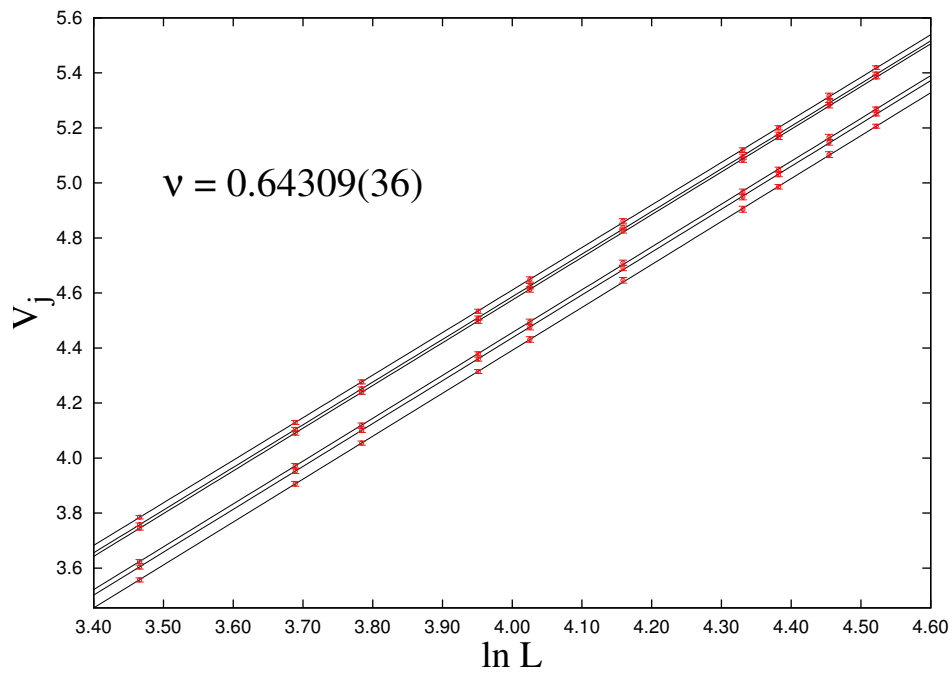


Figura 5.16: Dependência de V_j com o logaritmo do tamanho de rede a temperatura crítica. Dos ajustes lineares resultou $\nu = 0.64309(36)$.

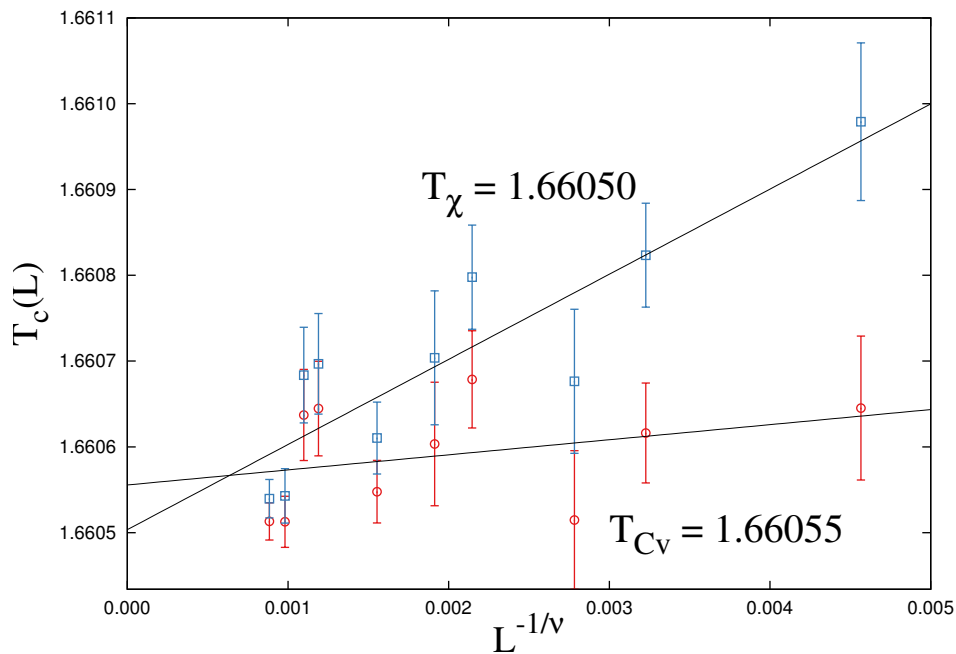


Figura 5.17: Resultado para a temperatura crítica para um conjunto de rodadas. O resultado para T_c é a média entre os valores obtidos para a susceptibilidade (pontos azuis) e calor específico (pontos vermelhos).

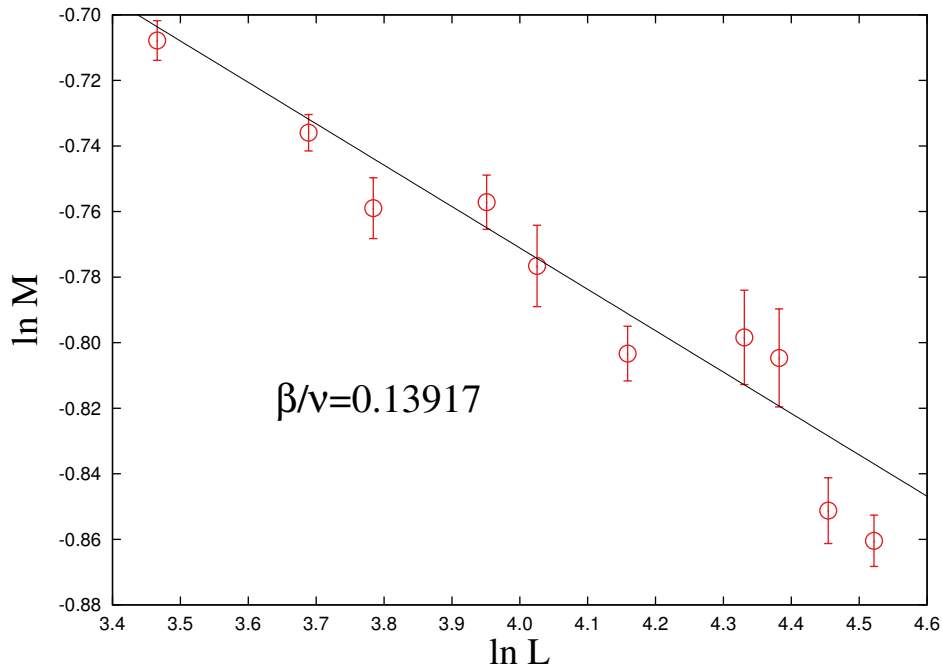


Figura 5.18: Resultado de escala de tamanho finito para o expoente crítico β para $T_c = 1.660469(26)$.

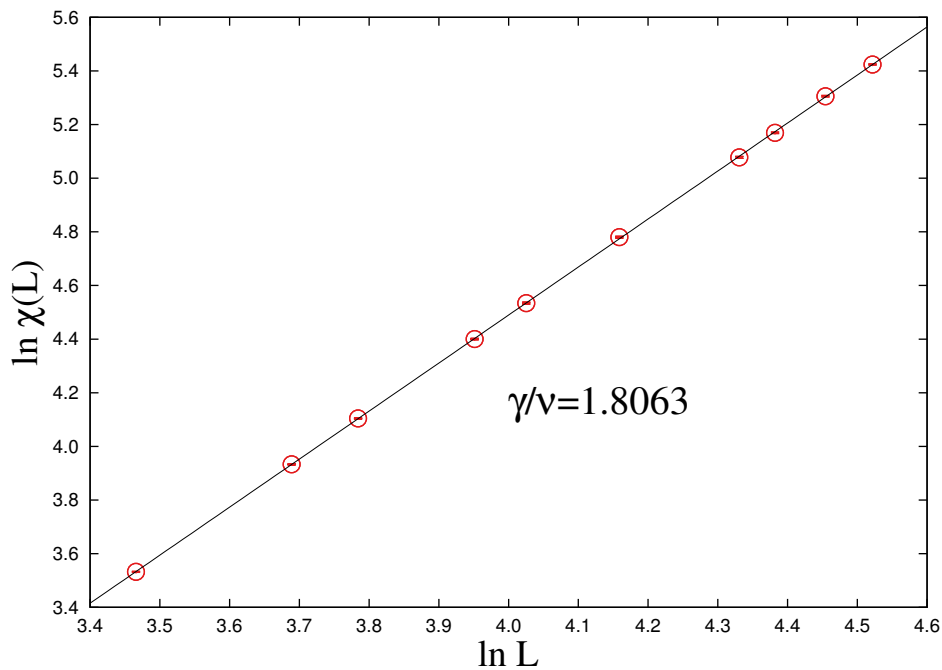


Figura 5.19: Resultado de escala de tamanho finito para o expoente crítico γ para $T_c = 1.660469(26)$.

5.2.2 Comportamento de Transição Descontínua

Nesta seção, apresentaremos os resultados oriundos das grandezas que apresentaram características de uma transição de primeira ordem. A Fig. 5.12 mostra o cumulante

do parâmetro de ordem como função da temperatura para três tamanhos de redes. O ponto de intersecção entre as curvas nos dá a região da temperatura crítica, que é por volta de $T_c = 1.661$.

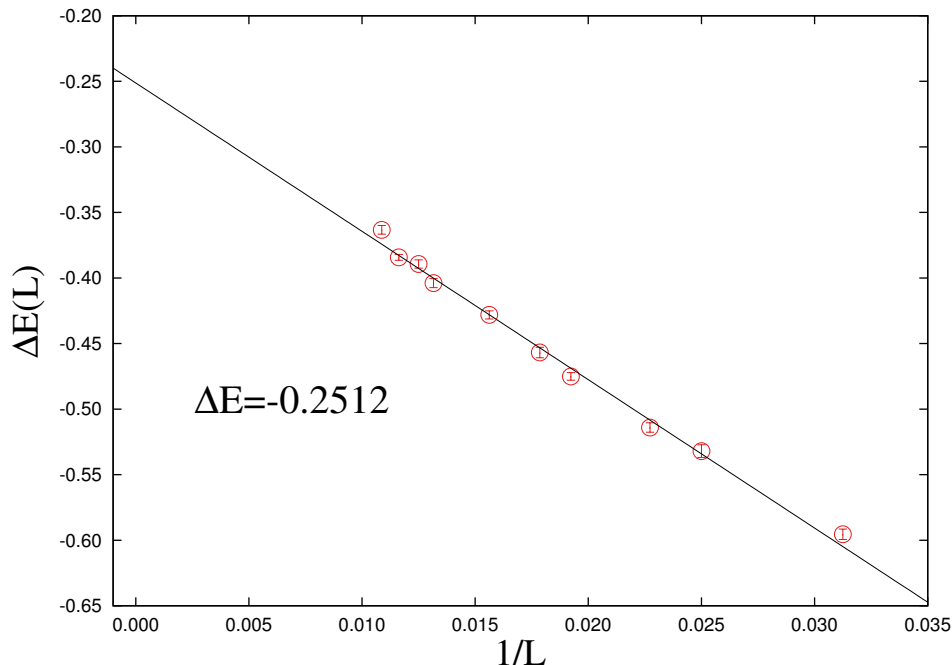


Figura 5.20: Diferença ΔE entre os dois picos na distribuição de probabilidades da energia. No limite termodinâmico essa diferença é numericamente igual ao calor latente.

A diferença ΔE entre as energias E_1 e E_2 dos dois picos na distribuição de probabilidades da energia, quando eles possuem a mesma altura é mostrada na Fig. 5.20. Calculando $\Delta E_L = E_2 - E_1$ para cada tamanho de rede e extrapolando para o limite termodinâmico, o calor latente é o valor de ΔE quando ($L \rightarrow \infty$). A Fig. 5.20 mostra o ajuste linear e o valor encontrado para o calor latente com $\Delta E = -0.2512$.

Para calcular a temperatura crítica utilizamos a temperatura do momento em que a distribuição de probabilidades da energia apresenta dois picos com a mesma altura. Também utilizamos a temperatura do mínimo do cumulante da energia. Para cada tamanho de rede temos um $T_c(L)$. A temperatura no limite termodinâmica foi consistente com a lei de escala $T_c(L) = T_c + b(1/L)$ para $P(E)$ e com $T_c(L) = T_c + b(1/L^2)$ para $U_{E_{min}}$. A temperatura final oriunda de $P(E)$ foi $T_c = 1.6604$ e o cumulante da energia resultou em $T_c = 1.66052$. Os resultados para as dez amostras estão apresentados na Tab. 5.5.

Todos estes resultados corroboram a existência de uma transição de primeira ordem. Contudo, temos também grandezas avaliadas em transições contínuas, neste caso, os expoentes críticos. e com resultados próximos aos valores exatos, obtidos para o modelo puro. Com isso temos duas perguntas: Será que o fato de adicionar vacâncias na rede que causa este efeito de dubiedade na transição de fases? O que as grandezas anteriormente analisadas nos mostrarão para o caso puro, isto é, o caso spin-1/2? Lembrando que

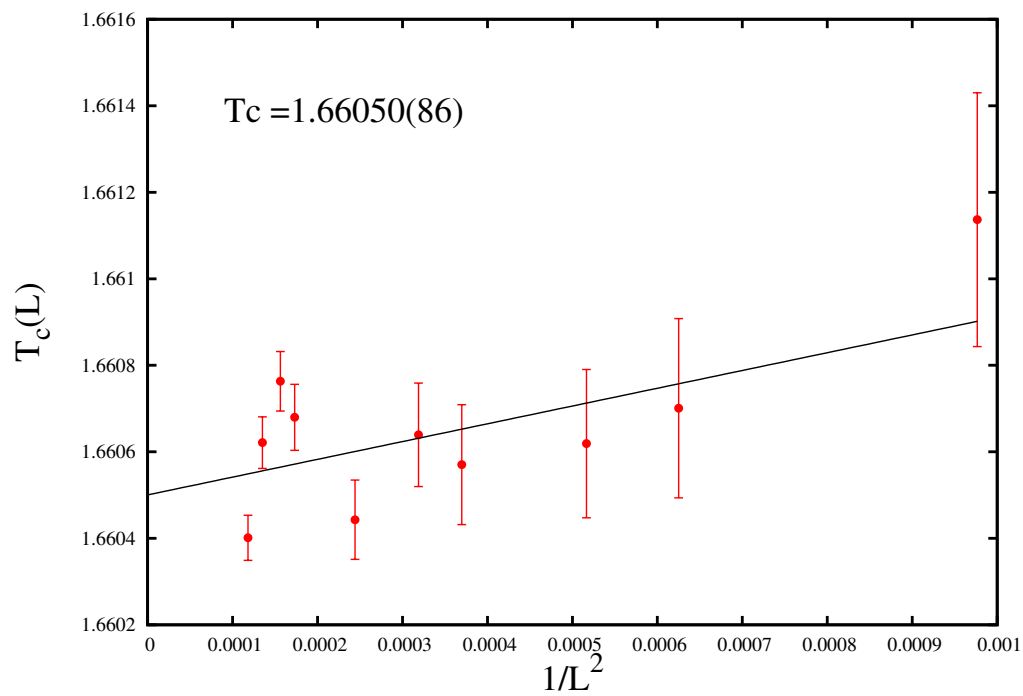


Figura 5.21: Dependência da temperatura do pico duplo de $P(E)$ com o tamanho de rede, com $1/L$.

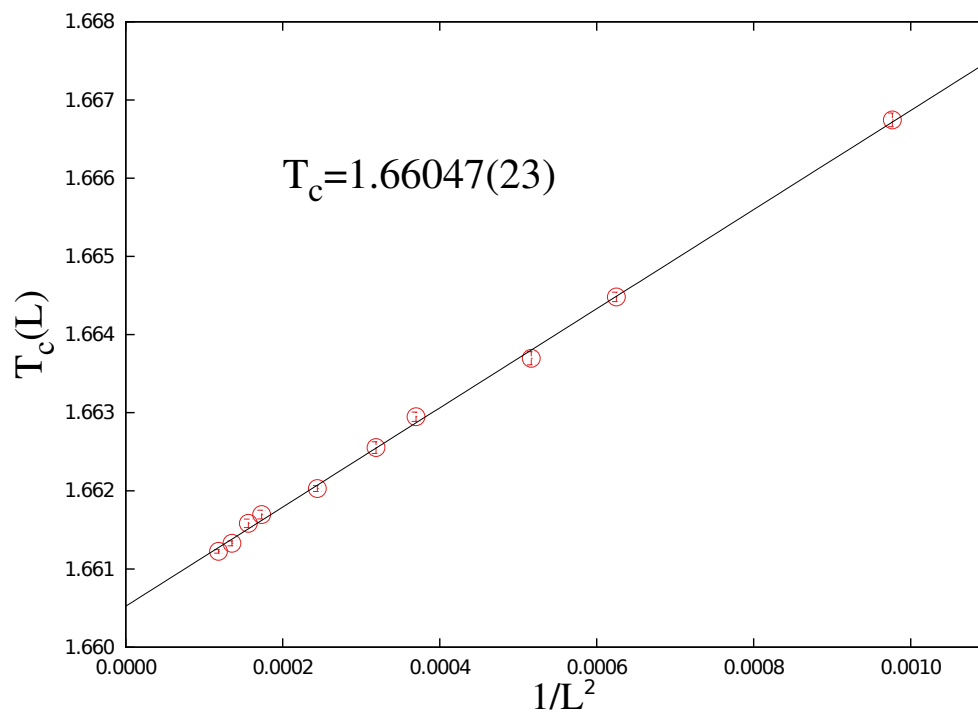


Figura 5.22: Dependência da temperatura do mínimo do cumulante da energia com o tamanho de rede, com $1/L^2$.

resultados de trabalhos anteriores corroboram a existência de uma transição de segunda ordem com expoentes críticos bem determinados.

| $T_{c_{U_E}}$ | $T_{c_{P(E)}}$ |
|---------------|----------------|
| 1.66047(23) | 1.66050(86) |
| 1.66050(34) | 1.66040(57) |
| 1.66054(27) | 1.6605(11) |
| 1.66057(32) | 1.6608(15) |
| 1.66061(15) | 1.66067(99) |
| 1.66060(28) | 1.66059(78) |
| 1.66056(28) | 1.66058(73) |
| 1.66055(24) | 1.6607(13) |
| 1.66052(30) | 1.6605(11) |
| 1.66055(31) | 1.66055(93) |
| 1.66055(38) | 1.6606(10) |

Tabela 5.5: Dez resultados de escala de tamanho finito para a temperatura crítica do mínimo do cumulante da energia, $T_{c_{U_E}}$, e do pico duplo da distribuição de probabilidades da energia, $T_{c_{P(E)}}$. A média sobre todas as rodadas é mostrada na última linha.

Considerando o modelo puro, mostramos nas Figs. 5.23 e 5.24, para o tamanho de rede $L = 32$, o cumulante de quarta ordem do parâmetro de ordem e a distribuição de probabilidades da energia (também para $L = 36$). Pode-se ver que o primeiro apresentou um vale agudo negativo, típico dele em transições de primeira ordem, enquanto $P(E)$ apresentou um pico duplo em T_c , também característico deste tipo de transição.

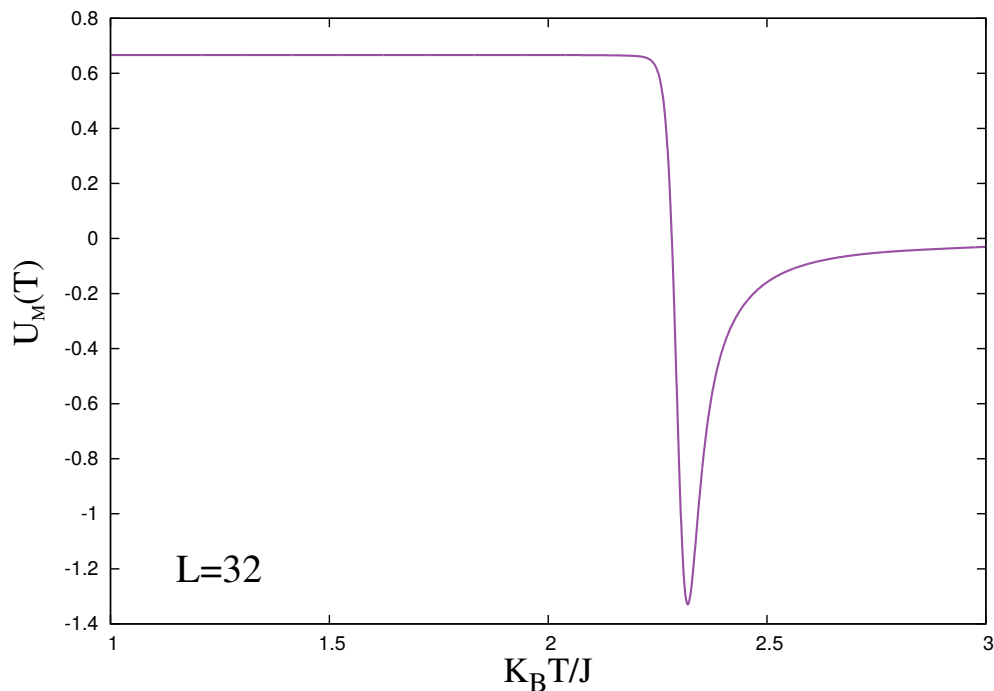


Figura 5.23: Cumulante de quarta ordem do parâmetro de ordem para o tamanho de rede $L = 32$, para o caso spin-1/2. O vale agudo negativo indica uma transição de primeira ordem.

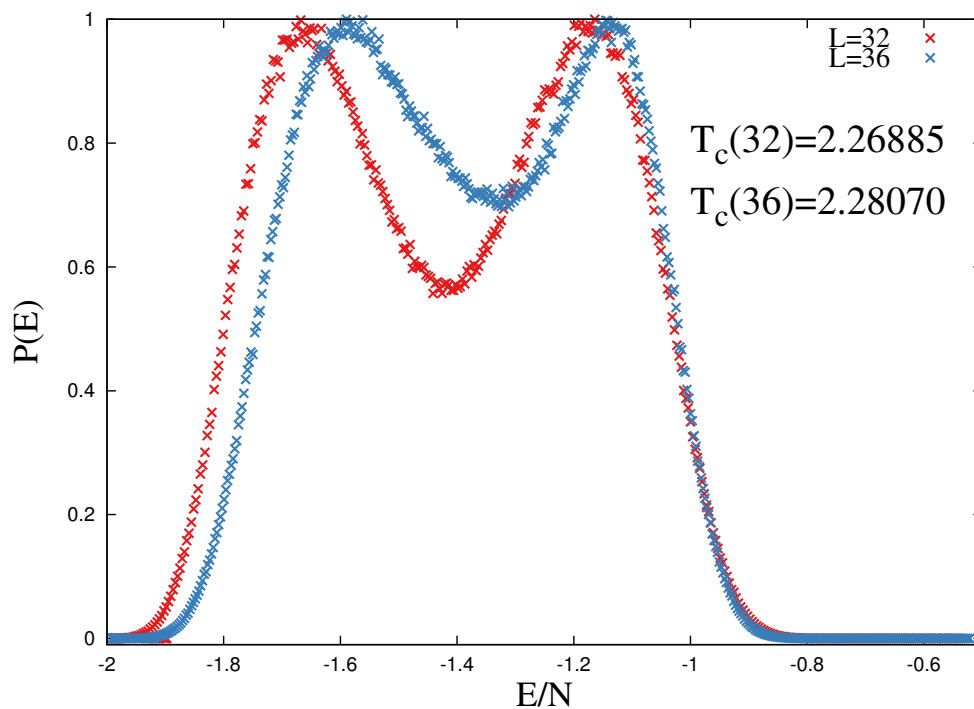


Figura 5.24: Distribuição de probabilidades da energia para os tamanhos de redes, $L = 32$ e 36 , para o caso spin-1/2. A estrutura de pico duplo foi obtida com a temperatura pseudocrítica para cada tamanho de rede.

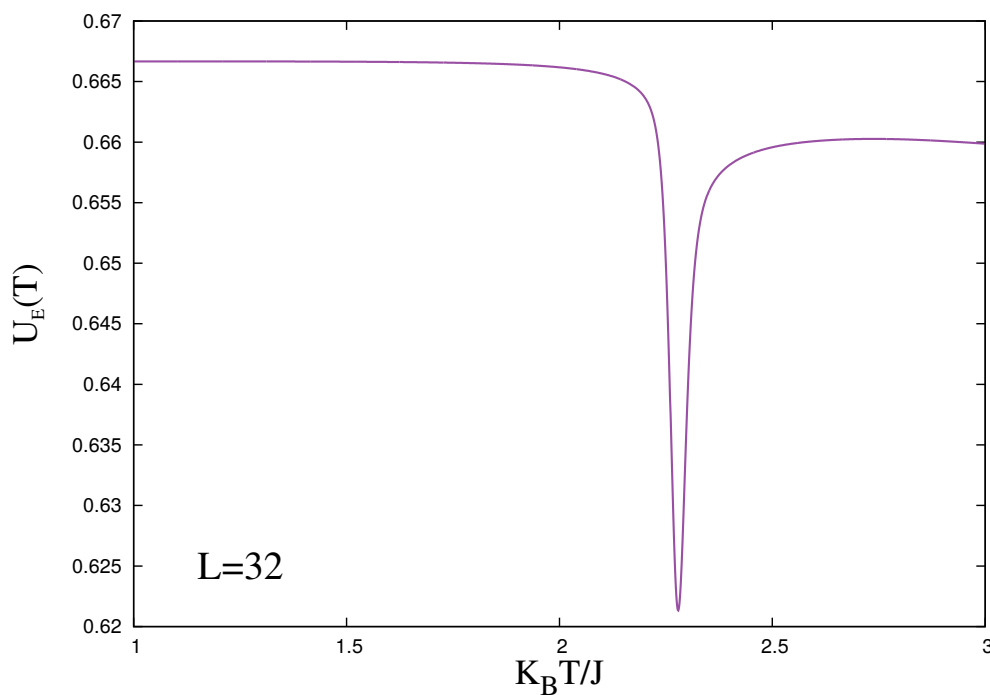


Figura 5.25: Cumulante de quarta ordem da energia para o tamanho de rede $L = 32$, para o caso spin-1/2.

Corroborando os resultados de U_M e $P(E)$, mostramos o cumulante de quarta

ordem da energia, Fig. 5.25. Aqui mais uma incógnita surge: Temos uma transição de primeira ordem ou uma transição contínua no modelo de Baxter-Wu spin-1/2? Por que temos o indicativo dos dois tipos de transições? Para responder a estas perguntas analisamos as configurações presentes no sistema, na temperatura de transição, ou seja, quando a distribuição de probabilidades da energia apresentam um pico duplo.

5.2.3 Configurações na temperatura de transição

A parte superior da Fig. 5.26 mostra a distribuição de probabilidades da energia versus energia por sítio, para o tamanho de rede $L = 32$ no caso spin-1. A estrutura de pico duplo, foi obtida na temperatura de transição para o respectivo tamanho de rede. Para fazer a análise das configurações, seccionou-se as energias em três partes: o primeiro pico à esquerda, o vale e o segundo pico à direita.

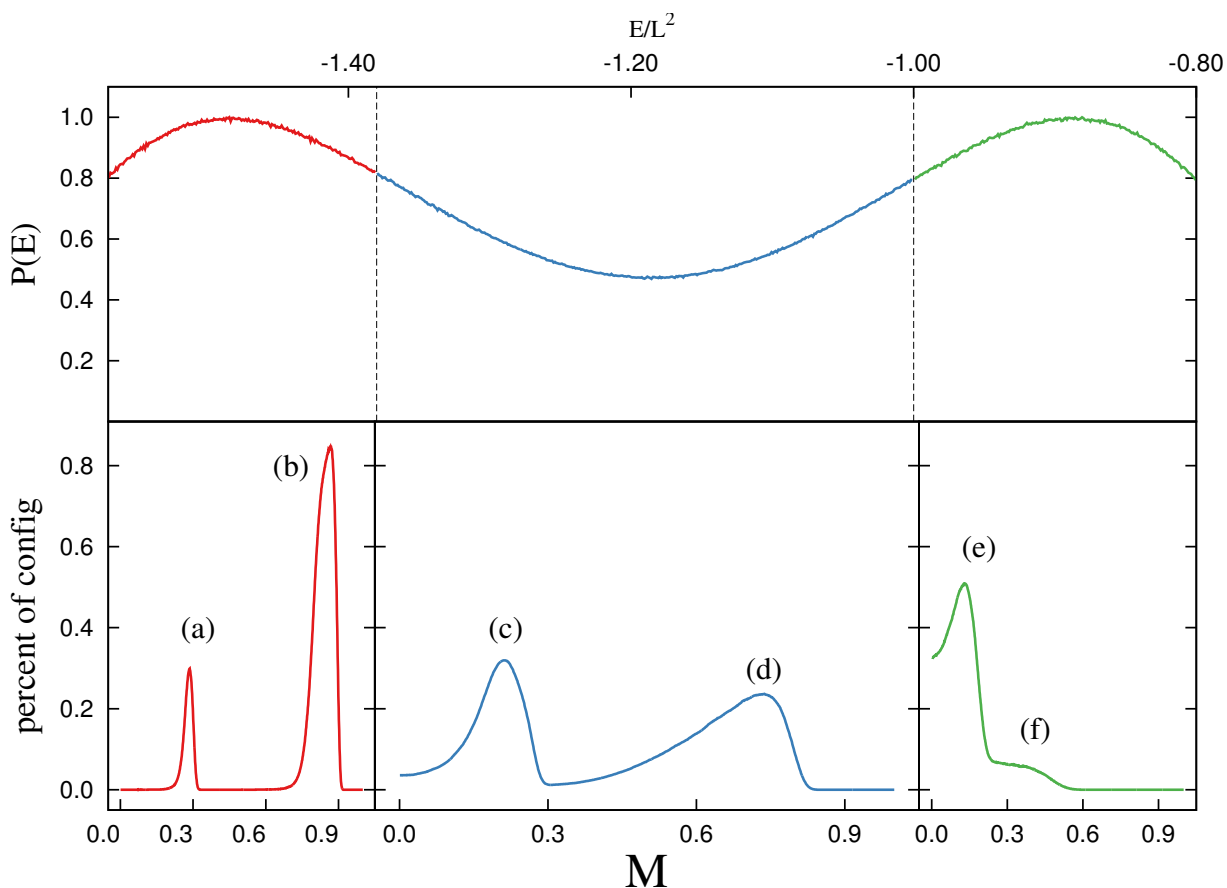


Figura 5.26: Parte superior: Distribuição de probabilidades da energia versus energia por sítio, para o tamanho de rede $L = 32$ no caso spin-1. A área para análise foi seccionada em três partes: os dois picos e o vale. A estrutura de pico duplo, foi obtida na temperatura de transição para o respectivo tamanho de rede. Parte inferior: histograma das configurações versus a magnetização, construídas no mesmo intervalo das energias: nos dois picos e no vale.

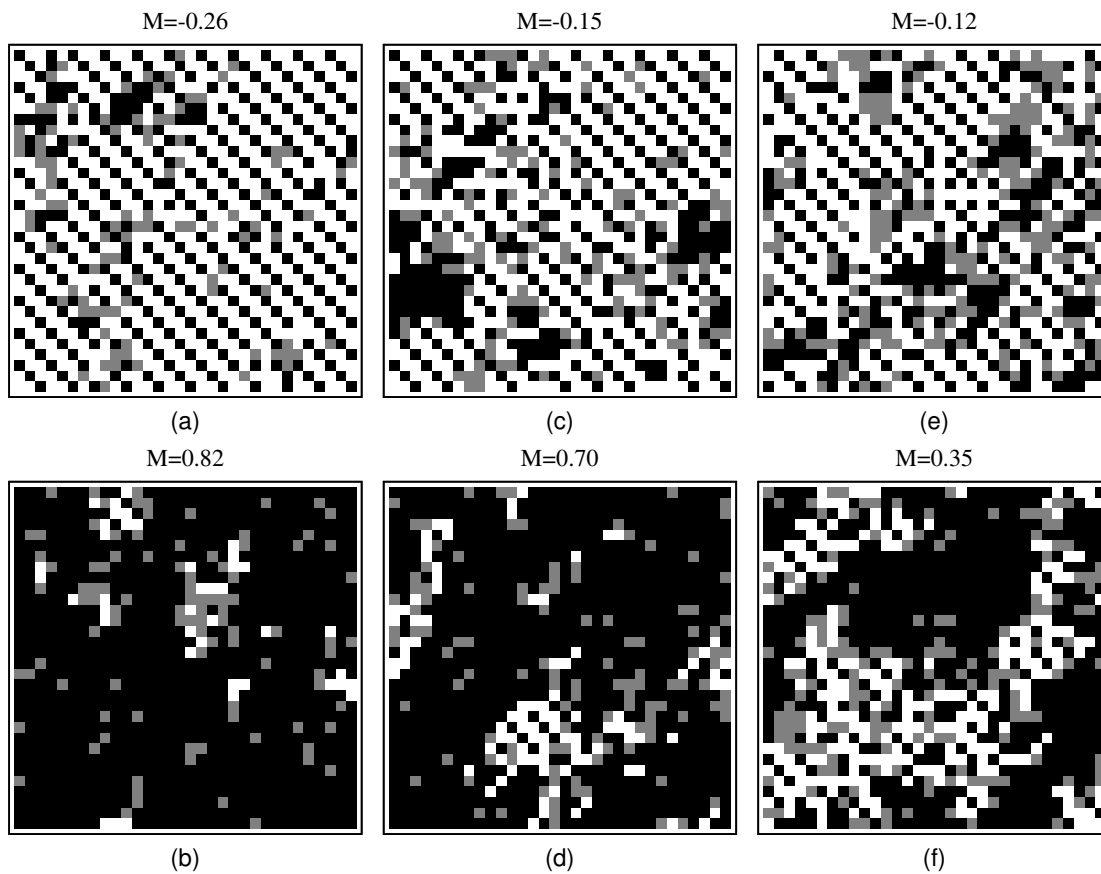


Figura 5.27: Configurações da rede quando a distribuição de probabilidades apresenta o pico duplo, para as magnetizações dos picos (a) ao pico (f). Os spins $+1$, -1 e 0 são representados pelos quadrados preto, branco e cinza, respectivamente.

Na parte inferior da mesma figura temos um histograma das configurações versus a magnetização, construídas para os mesmos intervalos das energias seccionadas. Para saber qual configuração aparece no sistema durante a transição, nas simulações, salvamos configurações do sistema para cada pico do histograma que aparece na parte inferior da Fig. 5.26. As configurações para os intervalos de energias e para os máximos do histograma, são mostradas na Fig. 5.27. Nela, os spins $+1$, -1 e 0 são representados pelos quadrados preto, branco e cinza, respectivamente.

Podemos notar na Fig. 5.26 que, para o pico à esquerda (parte vermelha do gráfico), aparecem duas magnetizações preferenciais: uma magnetização absoluta próxima a $m = 0.30$, dada pelo pico (a), e outra magnetização próxima a $m = 0.90$, que corresponde ao pico (b).

A Fig. 5.27.a, mostra que a configuração que predomina para a magnetização absoluta do sistema é da ordem de 0.30 , é a ferrimagnética, ao passo que a 5.27.b, que foi tomada no mesmo intervalo de energia, porém com magnetização é de 0.90 , podemos ver a predominância da configuração ferromagnética.

Na região do vale, parte azul na Fig. 5.26, temos a presença de dois máximos:

o pico (c), que se apresenta da região de magnetizações próximas à 0.20, e um máximo nas magnetizações em torno de 0.75, pico (d). A configuração que predomina no sistema quando a magnetização está próxima à 0.20, é mostrada na Fig 5.27.c, onde podemos ver a predominância das configurações ferrimagnéticas. Porém temos o aparecimento de blocos de spins com alinhamento ferromagnético, e algumas regiões desordenadas. Já na Fig 5.27.d, que mostra as configurações quando a magnetização do sistema está em torno de 0.75, temos majoritariamente spins com alinhamento ferromagnético, porém também se apresentam alguns domínios ferrimagnéticos e há o surgimento de regiões desordenadas.

Por fim, na região do segundo pico da distribuição de probabilidades da energia, a parte verde na Fig. 5.26, a magnetização predominante está em torno de 0.20, pico (e). Temos também magnetizações próximas a 0.50, pico (f) e a fase paramagnética começa a aparecer (início do gráfico à esquerda de (e)). Na Fig. 5.27.e, temos as configurações correspondentes ao pico (e). Podemos notar a predominância de configurações ferrimagnéticas, no entanto boa parte da rede apresenta regiões desordenadas. As configurações correspondentes ao pico (f), são mostradas na Fig. 5.27.f. Podemos notar que domínios ferromagnéticos aparecem juntamente com regiões desordenadas.

Ressaltamos que, todas essas configurações mostradas na Fig. 5.27, aparecem para um mesmo valor de temperatura, a temperatura de transição. Portanto temos que no momento da transição entre as fases ordenada e desordenada temos a coexistência entre as fases ferrimagnética, ferromagnética e a fase desordenada paramagnética, o que nos leva a concluir que a transição de fases do modelo de Baxter-Wu spin-1 é caracterizada por um ponto tricrítico.

Tendo em vista que, para o caso spin-1/2, os cumulantes e a distribuição de probabilidades da energia tiveram comportamentos semelhantes ao do caso spin-1, concluímos que, no primeiro caso também temos um ponto tricrítico. Consequentemente espera-se que estes modelos estejam conectados por uma linha de pontos tricríticos, o que nos leva ao nosso próximo objeto de estudo: O modelo de Baxter-Wu spin-1 com interação do campo cristalino.

5.3 O Modelo de Baxter-Wu Spin-1 com Interação do Campo Cristalino

Nesta seção, apresentaremos os procedimentos computacionais realizados sobre o modelo de Baxter-Wu spin-1 com interação do campo cristalino e os resultados encontrados. As quantidades termodinâmicas foram obtidas utilizando a densidade de estados conjunta, $g(E, D)$, oriunda das simulações realizadas conforme a seção 3.3. Calculamos $g(E, D)$ para os tamanhos de redes $L = 8, 10, 14$ e 16 com $n = 24, 20, 20$ e 16 rodadas independentes, respectivamente. Para a construção das linhas de transição,

utilizamos o valor do campo cristalino variando no intervalo $[-2; 2]$, (entretanto, para melhor visualização do diagrama de fases mostramos apenas o intervalo $[0; 2]$), com a seguinte variação no valor do campo, $\Delta D = 0.001$. Para todos os tamanhos de redes os máximos de $\chi(T)$ caíram próximos ao mesmo valor, como mostra a Fig. 5.28. Assim, se extrapolarmos estas temperaturas para o limite termodinâmico, o resultado para a temperatura de transição será a mesma encontrada para $T_c(L)$.

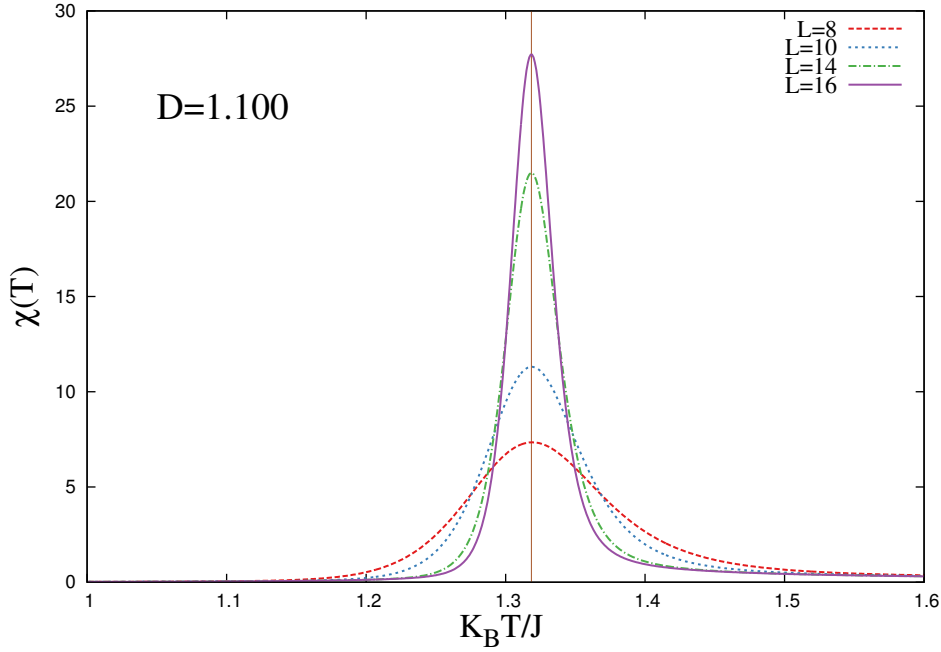


Figura 5.28: Susceptibilidade magnética para o valor de campo cristalino $D = 1.100$. Os máximos, para todos os tamanhos de redes, caem praticamente no mesmo valor de temperatura.

Tomando o hamiltoniano do BW spin-1 com interação do campo cristalino

$$H_{BWD} = -J \sum_{\langle i,j,k \rangle} s_i s_j s_k + D \sum_i s_i^2,$$

podemos definir

$$E_1 = \sum_{\langle i,j,k \rangle} s_i s_j s_k, \quad (5.2)$$

e

$$E_2 = \sum_i s_i^2, \quad (5.3)$$

de modo que a energia do sistema será condensada na forma $-JE_1 + DE_2$. Conforme o ensemble canônico a função de partição pode ser escrita, para uma temperatura T , na forma

$$Z(T, D) = \sum_i \exp\{[JE_1(i) - DE_2(i)]/(k_B T)\}, \quad (5.4)$$

ou

$$Z(T, D) = \sum_{E_1, E_2} g(E_1, E_2) \exp\{[E_1 - (D/J)E_2]/(k_B T)\}, \quad (5.5)$$

onde D pertence ao intervalo $[-\infty; 2]$. Assim, para cada tamanho de rede, construímos a densidade de estados para então obter as quantidades termodinâmicas para qualquer temperatura. A Fig. 5.29 mostra o logaritmo da densidade de estados para o tamanho de rede $L = 8$.

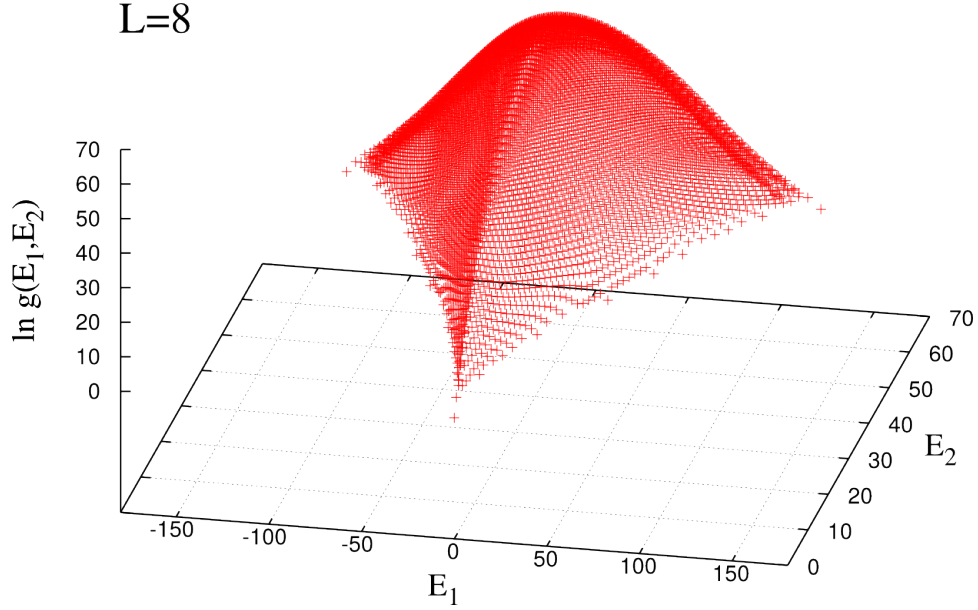


Figura 5.29: Logaritmo da densidade de estados para o tamanho de rede $L = 8$.

Como a função $g(E_1, E_2)$ não depende da temperatura e nem do campo cristalino, podemos calcular qualquer quantidade termodinâmica do sistema sem realizar nova simulação. Assim a energia interna é dada por

$$U(T, D) = \frac{\sum_{E_1, E_2} (-JE_1 + DE_2) P(E_1, E_2, J, D)}{\sum_{E_1, E_2} P(E_1, E_2, J, D)}, \quad (5.6)$$

onde

$$P(E_1, E_2, J, D) = g(E_1, E_2) e^{[(E_1 - (D/J)E_2)]/(k_B T/J)}, \quad (5.7)$$

é a distribuição canônica. Podemos obter a magnetização do sistema através da média canônica

$$M(T, D) = \frac{\sum_{E_1, E_2} \langle M(E_1, E_2) \rangle P(E_1, E_2, J, D)}{\sum_{E_1, E_2} P(E_1, E_2, J, D)}, \quad (5.8)$$

onde $\langle M(E_1, E_2) \rangle$ é a média microcanônica da magnetização que é calculada ao longo da simulação.

Pode-se estimar a região onde a transição entre as fases ordenada e desordenada deixa de ser descontínua, observando o comportamento da energia interna e da magneti-

zação para valores do campo cristalino como função da temperatura a fim de estabelecer uma faixa na mudança na ordem da transição. As Figs. 5.30 e 5.31 mostram a evolução destas grandezas como função da temperatura para os seguintes valores do campo cristalino, $D = 1.0, 1.10, 1.20, 1.30, 1.40, 1.50, 1.60, 1.70$ e 1.80 . Pode-se perceber que existe uma aparente mudança nos respectivos comportamentos próximos ao campo cristalino $D = 1.50$ em diante.

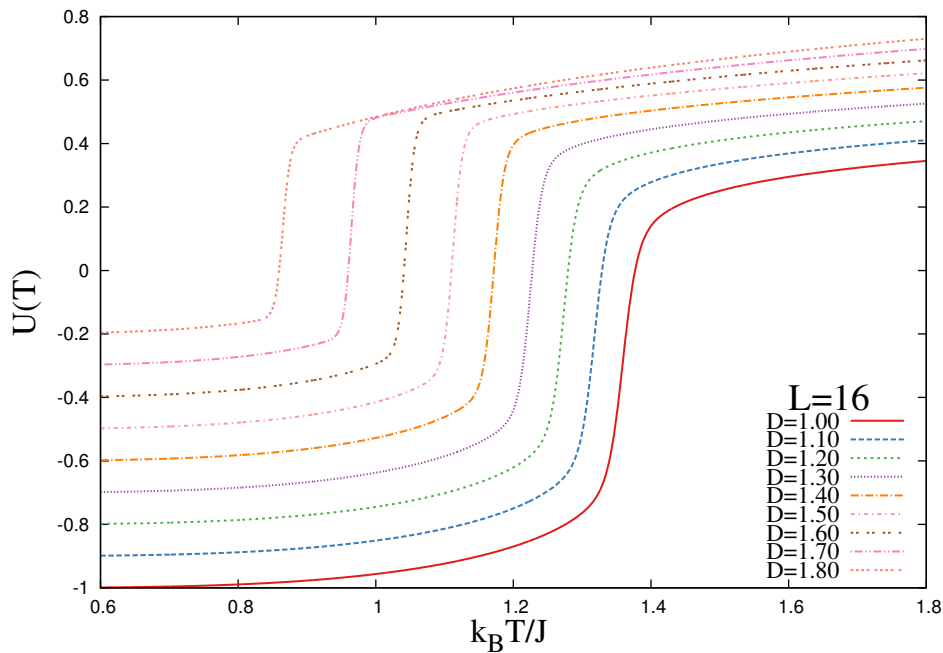


Figura 5.30: Energia interna como função da temperatura para alguns valores do campo cristalino para o tamanho de rede $L = 16$.

Uma alternativa para determinar a região do ponto pentacrítico também pode ser através da dependência dos cumulantes da energia e da magnetização com a temperatura calculados para diversos valores do campo cristalino. O comportamento destas grandezas se altera quando passamos de uma região de transições contínuas para descontínuas.

No primeiro cumulante, espera-se a presença de um mínimo sutil que deve evoluir para um mínimo proeminente ao atravessar o ponto pentacrítico e adentrar na região de primeira ordem, enquanto o segundo apresenta um comportamento suave, sem a presença de mínimos negativos, e que passa a apresentar um mínimo negativo na região descontínua. As Figs. 5.32 e 5.33 mostram os gráficos dos respectivos cumulantes para o tamanho de rede 16 e valores do campo cristalino $D = 1.0, 1.10, 1.20, 1.30, 1.40, 1.50, 1.60, 1.70$ e 1.80 .

Podemos perceber que ao longo de todos os valores do campo cristalino, ambas quantidades tiveram o mesmo tipo de comportamento. A única variação foi quanto à posição do mínimo, porém, para todos os valores do campo os cumulantes indicam uma direção de uma transição de ordem descontínua entre as fases ordenada e desordenada. Isto levanta uma série de questionamentos. Considerando os resultados dos trabalhos de

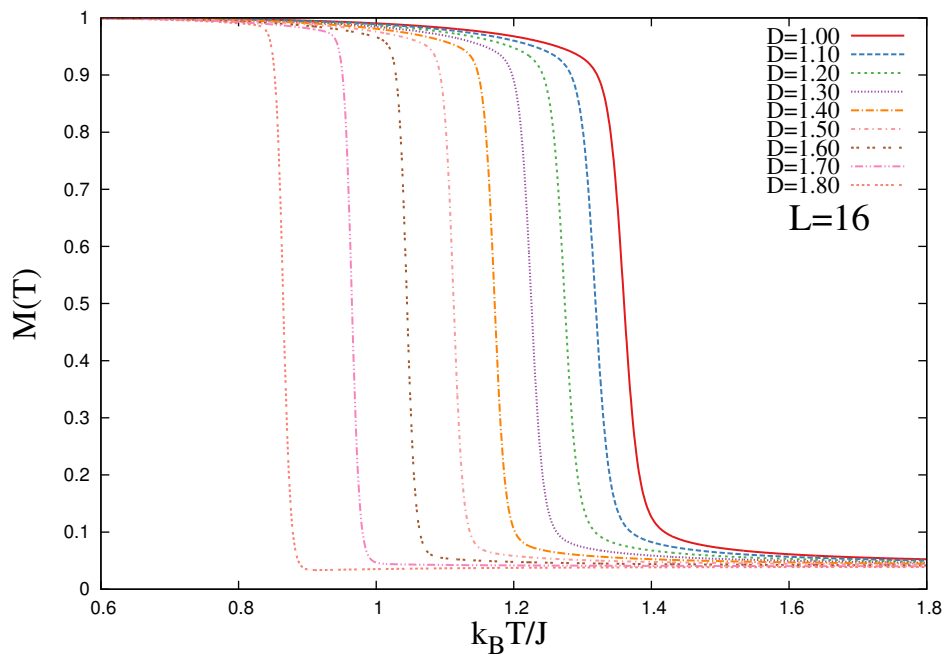


Figura 5.31: Dependência da magnetização com a temperatura para alguns valores do campo cristalino para o tamanho de rede $L = 16$.

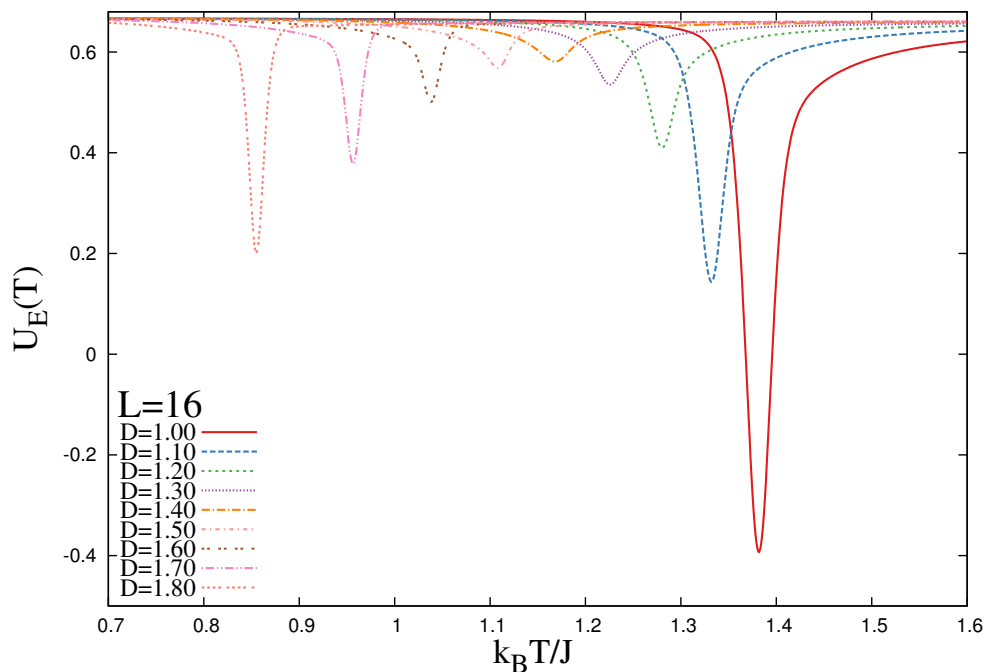


Figura 5.32: Cumulante da energia como função da temperatura para valores do campo cristalino para o tamanho de rede $L = 16$.

Costa [21] e Dias [22], deveríamos observar a alteração no comportamento dos cumulantes, pois obtiveram uma linha de transição entre as fases ordenada e desordenada descontínua,

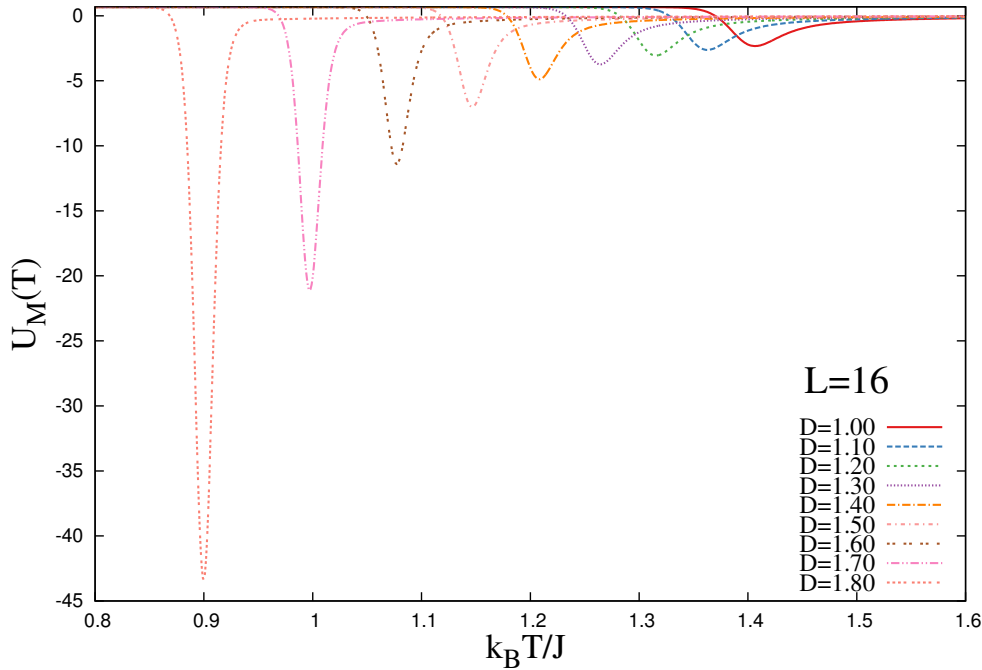


Figura 5.33: Cumulante do parâmetro de ordem como função da temperatura para valores do campo cristalino para o tamanho de rede $L = 16$.

que termina em um ponto pentacrítico, e após o mesmo a transição entre as fases é de forma contínua.

5.3.1 Diagrama de Fases

De acordo com trabalhos anteriores, o modelo de Baxter-Wu com interação do campo cristalino possui um diagrama de fases no plano D/J versus T em que um ponto pentacrítico, (D_c, T_c) separa uma linha de primeira ordem de uma linha de transição contínua entre as fases ordenada e desordenada. Utilizando grupo de renormalização, teoria de escala de tamanho finito e técnicas de invariância conforme, Costa e colaboradores [21], construíram um diagrama de fases para o referido modelo obtendo o ponto pentacrítico $D_c = 1.4$ e $T_c = 1.1723(3)$. Outro trabalho foi realizado por Dias e colaboradores [22], onde utilizaram técnicas de invariância conforme e escala de tamanho finito e obtiveram o ponto pentacrítico próximo ao do trabalho anterior, com $D_c = 0.890254$ e $T_c = 1.1690$.

Neste trabalho, para construir a linha crítica do diagrama de fases no plano D/J versus T utilizamos a temperatura do máximo da susceptibilidade magnética obtida para o maior tamanho de rede simulado, pois, como mostra a Fig. 5.28. Assim, para cada valor D/J tem-se uma temperatura $(k_B T_c/J)$ que corresponde ao máximo da susceptibilidade. Os cálculos foram realizados para o intervalo de campo cristalino $[0; 2]$. Para determinar o campo cristalino no ponto crítico, utilizamos a técnica descrita no trabalho de Care [116],

em que é possível determinar D_c pela análise do máximo do calor específico como função do campo cristalino, $C_{v_{max}}(D)$. A evolução do máximo do calor específico como função de D possui um máximo para um determinado valor de D . Este pico está associado ao início do comportamento de primeira ordem acima da temperatura pentacrítica [116]. Obtemos o campo cristalino crítico para os tamanhos de redes simulados, e, como mostra o destaque na Fig. 5.34, temos que o máximo que aparece desloca-se para a direita conforme aumenta-se o tamanho da rede, sugerindo então uma lei de escala. De fato, o campo cristalino crítico é obtido por uma lei de escala na forma [117]

$$D_c(L) = D_\infty + bL^{-d}. \quad (5.9)$$

A Fig. 5.34 mostra o ajuste linear destes pontos. Obtemos o campo cristalino no ponto pentacrítico no limite termodinâmico igual a $D_c = 1.68288(62)$. Este resultado é muito diferente dos valores obtidos nos trabalhos anteriores. Na Tab. 5.6, apresentamos os resultados que constam na literatura e os nossos.

| | D_c | T_c |
|-------------------|-----------------|-----------------|
| Costa[21] | 1.4 | 1.1723(3) |
| Dias[22] | 0.890254 | 1.1690 |
| Jorge[113] | [1.000; 1.1000] | [1.600 : 1.700] |
| Nossos Resultados | 1.68288(62) | 0.97577(85) |

Tabela 5.6: Pontos pentacríticos obtido por Costa [21] e por Dias [22]. Na última linha estão os nossos resultados.

Para determinar a temperatura no ponto pentacrítico, utilizamos o valor da temperatura do mínimo do cumulante de quarta ordem da energia. Conforme mencionado, esta quantidade escala com L^{-2} . Assim, podemos utilizar a Eq. 2.55 para determinar T_c como a extrapolação de $L \rightarrow \infty$ ($L^{-d} = 0$) do ajuste linear dados pelos mínimos do cumulante de quarta ordem da energia, definido na Eq. 2.52. A Fig. 5.35 mostra o ajuste linear da temperatura dos mínimos de U_E com L^{-2} , que converge para T_c quando $L^{-2} \rightarrow 0$. O valor para a temperatura do ponto pentacrítico foi $T_c = 0.97577(85)$.

Na Fig. 5.36, mostramos o diagrama de fases. O ponto $D/J = 2$ é um ponto quártuplo, onde há a coexistência de cinco estados: os quatro do estado fundamental e o $(0\ 0\ 0)$. Acima de $D/J = 2$, temos uma transição descontínua com somente o estado com os spins $s_i = 0$ populado, uma vez que este é o que minimiza a energia livre. A transição descontínua prossegue para valores menores que $D/J = 2$, como uma linha de primeira ordem formada por pontos quártuplos, até o momento da criticalidade, onde os cinco estados fundamentais tornam-se indistinguíveis, e, a partir deste ponto, a transição entre as fases ordenada e desordenada passa a ser de modo contínua, se estendendo até $D/J \rightarrow -\infty$. O ponto crítico foi calculado como $D_c = 1.68288(62)$, $T_c = 0.97577(85)$.

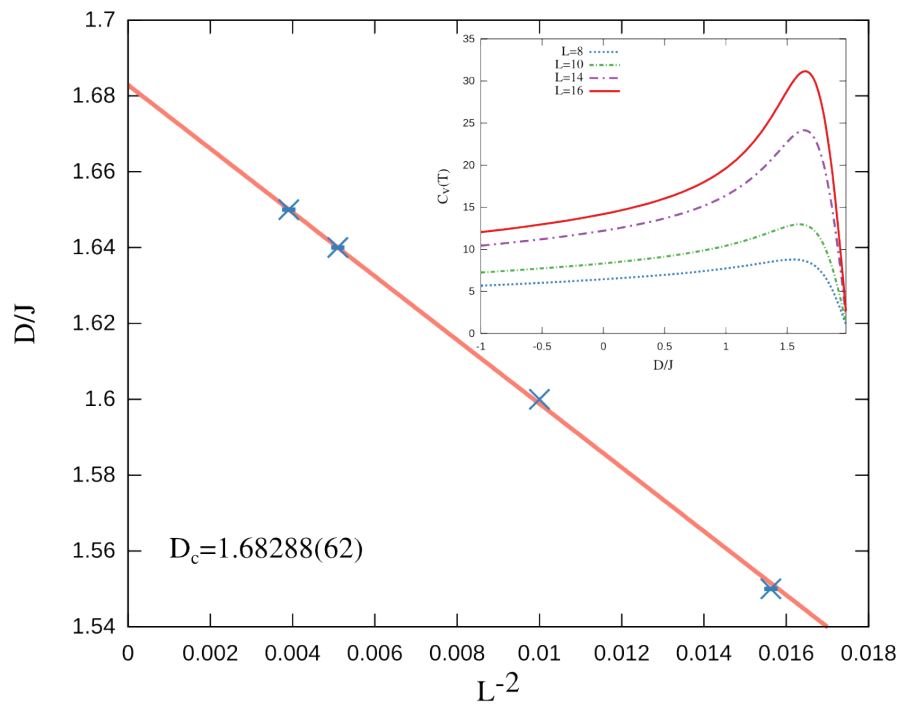


Figura 5.34: Ajuste linear do campo cristalino no ponto máximo de $C_v(D)$ para os tamanhos de redes $L = 8, 10, 14$ e 16 . O destaque mostra o máximo do calor específico como função do campo cristalino para os tamanhos de redes simulados.

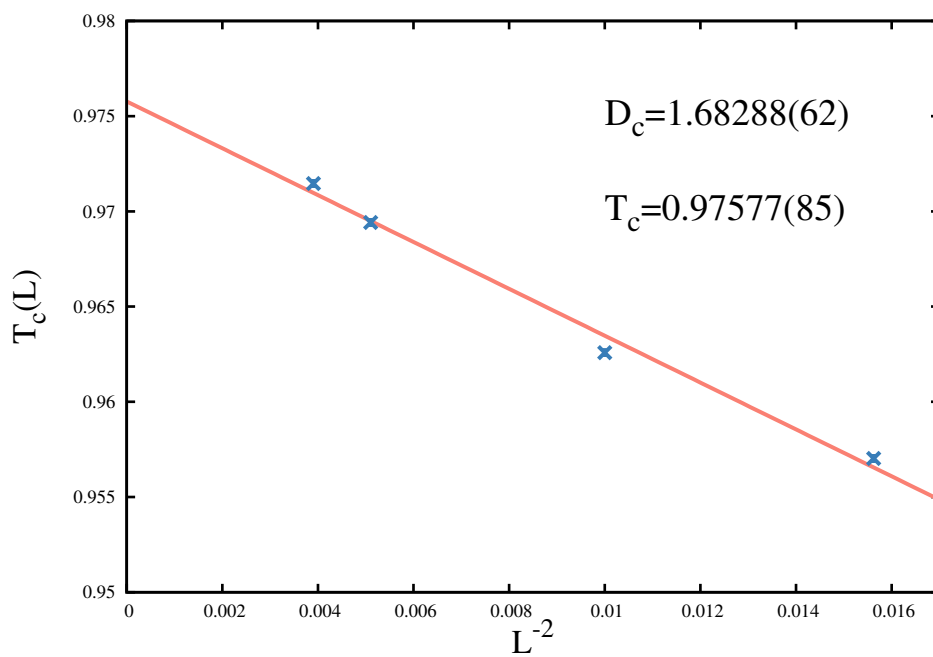


Figura 5.35: Ajuste linear da temperatura do mínimo do cumulante de quarta ordem da energia com L^{-2} .

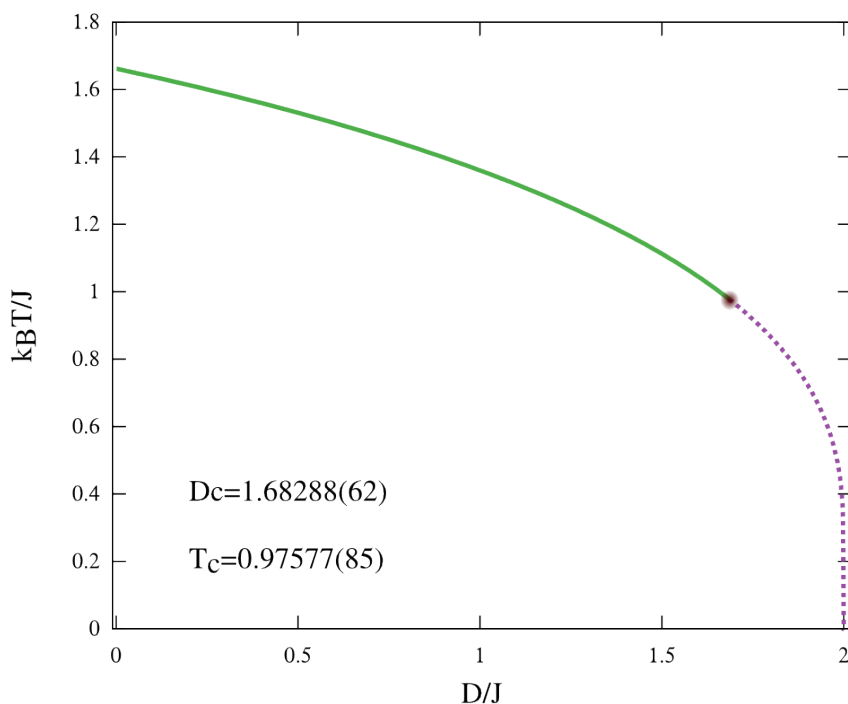


Figura 5.36: Diagrama de fases para o modelo de Baxter-Wu spin-1 com anisotropia do campo cristalino no plano D/J versus T . O ponto pentacrítico separa a região de transição de fases de primeira ordem e a criticalidade.

5.3.2 Interpretação do Diagrama de Fases

Um dos modelos estudados na literatura é o modelo de Blume-Capel [7, 8]. Ele apresenta um diagrama de fases interessante, com as fases ordenada e paramagnética separadas por uma linha de transição que ora é descontínua, ora é contínua. O limite entre as linhas se dá por um ponto tricrítico. Este modelo, que já foi abordado por uma diversidade de técnicas, também foi estudado em uma rede triangular [84]. O seu diagrama de fases é muito parecido com o da rede quadrada, Fig. 5.37, onde o ponto tricrítico encontrado foi $\Delta_c = 2.925(8)$, $T_c = 1.025(10)$.

Uma análise da distribuição de probabilidades da energia $P(E)$ apresentada no artigo de Fytas [84] revela resultados interessantes. A Fig. 5.38 mostra a distribuição de $P(E)$ para alguns valores do campo cristalino. Podemos ver que para valores do campo cristalino $\Delta = 2.90$ a 2.915 temos a presença de um único pico. Com o campo acima do ponto tricrítico $\Delta = 2.95$, $P(E)$ exibe, na temperatura crítica, dois picos separados com a mesma altura e um vale proeminente com energias com probabilidade nula, de modo que não há como passar das configurações com energias da fase ordenada para configurações desordenadas de modo contínuo. Nas proximidades da criticalidade, $\Delta = 2.93$ e 2.94 , em $P(E)$ temos o aparecimento de dois picos com mesma altura em T_c , no entanto, as energias entre os picos não tem probabilidade nula. Logo, temos diversas energias que podemos

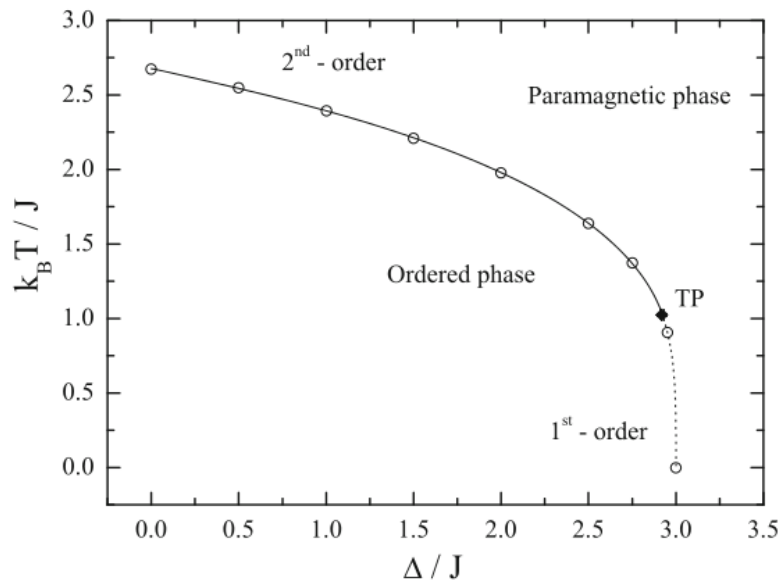


Figura 5.37: Diagrama de fases para o modelo de Blume-Capel em uma rede triangular. A linha pontilhada e a curva sólida denotam respectivamente a primeira e segunda linhas de transições de fases que separam as fases ordenada e paramagnética. O quadrado em preto denota a região do ponto tricrítico (TP) [84].

percorrer para sair da fase ordenada para a fase paramagnética. Este comportamento de $P(E)$ é típico de regiões críticas, tais como pontos críticos e tricríticos.

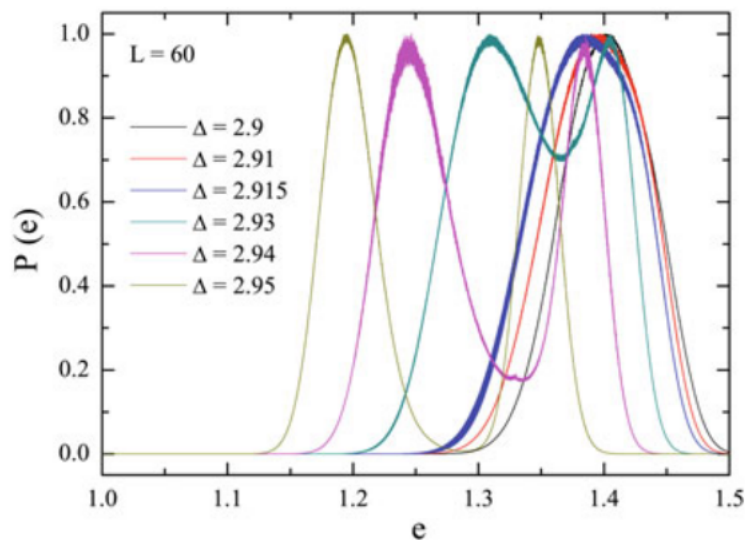


Figura 5.38: Distribuição de probabilidades da energia para o tamanho de rede $L = 60$ e diversos valores do campo cristalino [84].

Outro modelo que exhibe o mesmo tipo de comportamento para a distribuição de probabilidades da energia é o modelo de Bell-Lavis [118]. Este é um modelo que pode ser

usado para descrever a água em duas dimensões. Šimenas e colaboradores [119] estudaram este modelo onde eles procuraram construir o seu diagrama de fases. Vamos nos ater aos resultados qualitativos que eles encontraram para $P(E)$.

A Fig. 5.39 mostra a distribuição de $P(E)$. (a) Para $\mu/H = 0.3$ $L = 120$ próximo à transição de fase a temperatura ($k_B T_c/H = 0.3728$), na região de transição contínua, temos a presença de apenas um pico. Em (b) para $\mu/H = 1.45$, exatamente no ponto crítico surgem dois picos, mas que não estão separados por energias com probabilidades nulas, e (c) $\mu/H = 1.48$, acima do ponto crítico, pode-se perceber que, para o tamanho da rede $L = 72$, temos os dois picos distintos e separados por energias com probabilidades nulas.

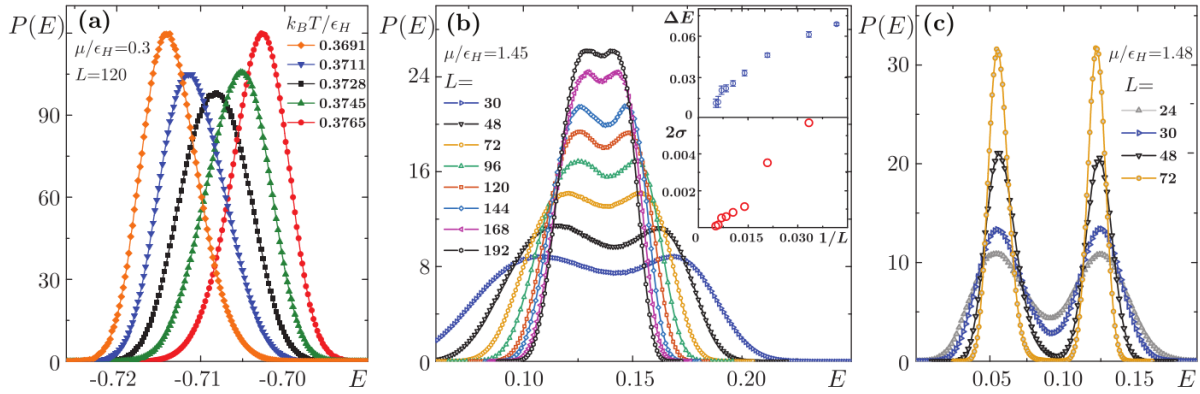


Figura 5.39: Distribuição de probabilidades da energia para o tamanho de rede $L = 60$ e diversos valores do campo cristalino [118].

Tendo em vista a concordância entre as características da distribuição de probabilidades acima apresentadas e as distribuições de probabilidades da energia para o modelo de Baxter-Wu, para os casos spin-1/2 ($D \rightarrow \infty$), Fig. 5.24, e spin-1 ($D=0$), Fig. 5.15, bem como o que foi discutido na Sec. 5.2.3, concluímos que o ponto pentacrítico, não é apenas um ponto mas uma linha de pontos tricríticos, a qual se estende para todos os valores do campo cristalino no intervalo $[-\infty; D_c]$. Isto é corroborado pela evolução da razão $1/\nu$, calculada ao longo da linha crítica, o que será apresentado logo a seguir.

5.3.3 Evolução do expoente crítico ν ao longo da linha crítica

Calculamos o expoente crítico ν ao longo da linha crítica. Para o valor negativo, $D = -30$, onde espera-se obter um valor próximo ao do modelo no limite para $D \rightarrow -\infty$, e, assim encontrar para $1/\nu$, um valor próximo ao do spin-1/2, $1/\nu = 3/2$. Na Tab. 5.7 mostramos os resultados para $1/\nu$ para alguns valores do campo cristalino. Esta

variação do expoente crítico ν ao longo da linha crítica está associada ao comportamento multicrítico do modelo.

| D/J | $1/\nu$ |
|-----------|-------------|
| $-\infty$ | 1.50708(95) |
| -30.0 | 1.54373(80) |
| 0.00 | 1.55320(25) |
| 1.10 | 1.74001(17) |
| 1.20 | 1.78553(25) |
| 1.30 | 1.83072(47) |
| 1.40 | 1.88688(74) |
| 1.50 | 1.95182(93) |
| 1.60 | 2.01553(74) |
| 1.70 | 2.05437(12) |
| 1.80 | 2.00712(16) |
| 1.90 | 2.00210(10) |
| 1.95 | 2.00205(11) |

Tabela 5.7: Evolução de $1/\nu$ para diversos valores do campo cristalino. O valor de $D/J = -\infty$ corresponde ao caso spin $1/2$, cujo valor exato é $3/2$.

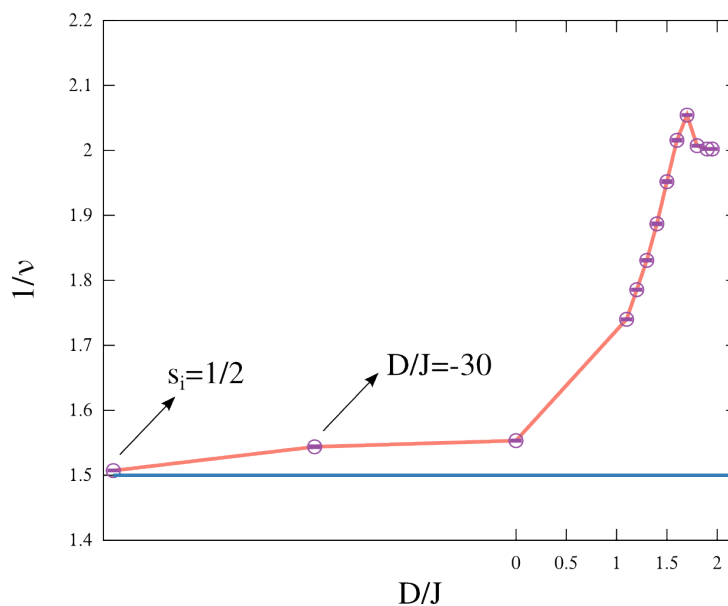


Figura 5.40: $1/\nu$ calculado para diversos valores do campo cristalino. Acima do campo crítico os resultados estabilizam-se em torno de 2. A linha horizontal contínua corresponde ao valor exato $1/\nu = 1.50$ para o caso spin-1/2.

A evolução de $1/\nu$ ao longo da linha crítica exibe um pico em torno de 1.70, o que indica a presença de um ponto multicrítico [120]. Após adentrar na região das transições descontínuas, a razão obtida permanece em torno de dois, que, para um sistema bidimensional é o valor esperado para este tipo de transição.

Comparando os nossos resultados, com o modelo de Blume-Capel, temos que nele, os expoentes críticos, ao longo da linha de segunda ordem são sempre os mesmos, porém, na criticalidade eles se alteram [121]. Em nosso modelo, desde o início, para valores do campo cristalino $D \rightarrow \infty$, os expoentes críticos sempre variam. Essa variação de $1/\nu$ ao longo da linha crítica reforça-nos a ideia de que a linha de transições contínuas, é na verdade uma linha de pontos tricríticos.

5.3.4 Anomalia no calor específico para campo cristalino grande na região de primeira ordem

Das simulações, obtivemos um resultado interessante para valores grandes do campo cristalino, acima de $D = 1.95$. Uma anomalia no calor específico aparece após o seu máximo, e parece não escalar com o tamanho do sistema. Acima deste valor do campo, aparece um segundo pico no calor específico em torno de $T = 0.80$, bem pequeno, mas que vai se tornando mais evidente conforme aumenta-se o valor do campo cristalino (na verdade o segundo pico não aumenta, mas sim o pico “real” do calor específico que vai diminuindo conforme se aproxima de $D/J = 2$). Nas Figs. 5.41 e 5.42, são mostradas a anomalia em C_v para os valores de campo $D = 1.990$ e 1.997 . Nelas, é possível notar que o segundo pico não escala com o tamanho da rede e que o máximo do segundo pico sempre cai em torno de $k_B T/J = 0.80$.

As Figs. 5.43 e 5.44 mostram a densidade de spins iguais a zero e a densidade de spins diferentes de zero. A primeira inicia-se em 1 e cai drasticamente nas proximidades da temperatura pseudo-crítica. Com um comportamento inverso, a densidade de spins $s_i = 0$ caminha no sentido oposto, aumentando drasticamente na região próxima a temperatura pseudo-crítica, chegando a ocupar mais de 90% dos sítios da rede. Na verdade, este aumento no número de spins $s_i = 0$ após a temperatura pseudo-crítica se manifesta de maneira muito moderada para valores os de $D > 1$, e vai acentuando-se gradativamente com o aumento do campo cristalino. Esta anomalia no calor específico pode ser relacionada a vacâncias, ou defeito Schottky, em uma rede cristalina [122, 123].

Um trabalho com o modelo de Blume-Capel [24], utilizando o método de Wang-Landau, apresentou resultados parecidos com os aqui apresentados. No entanto, os autores encontraram o mesmo efeito somente para tamanhos de redes maiores que $L = 16$ e para valores do campo cristalino $D \geq 1.990$, ao passo que aqui, mesmo para o menor tamanho de rede simulado ($L = 8$) a anomalia já é visível e para um valor menor do campo cristalino $D \geq 1.950$.

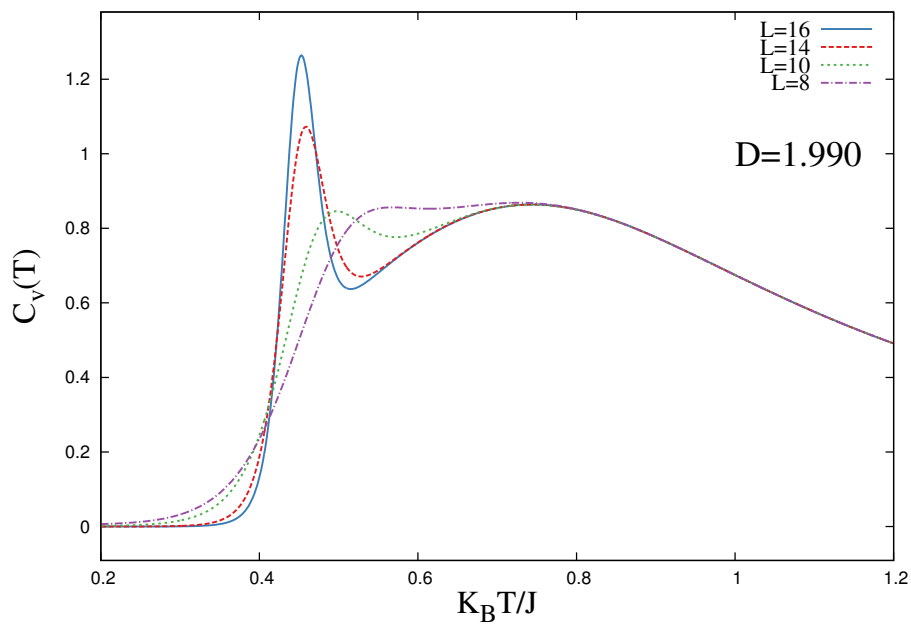


Figura 5.41: Estrutura de pico duplo observado para o calor específico a $D = 1.990$. O pico à esquerda é devido a transição de fase de primeira ordem, e a direita está o pico anômalo.

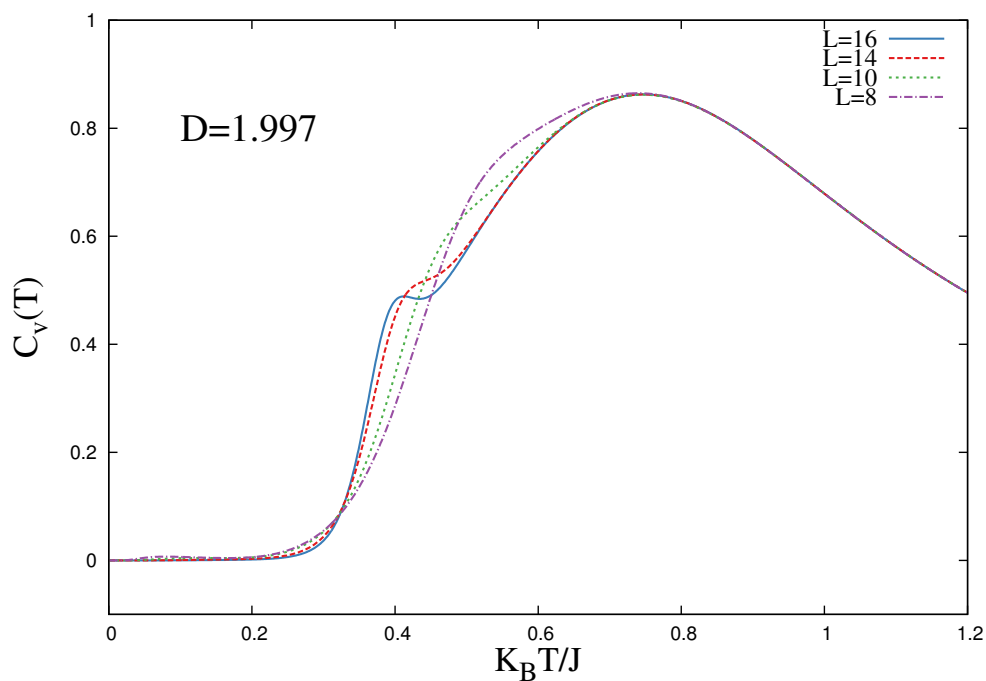


Figura 5.42: Estrutura de pico duplo observado para o calor específico a $D = 1.997$. O pico à esquerda é devido a transição de fase de primeira ordem, e a direita está o pico anômalo.

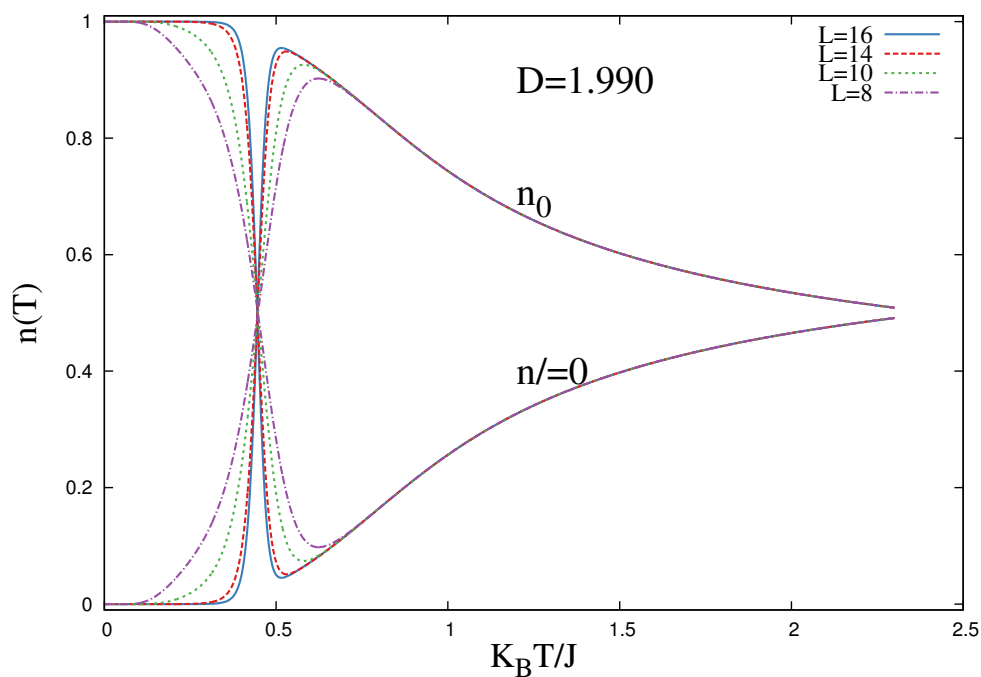


Figura 5.43: Densidade de spins diferentes de zero e iguais a zero a $D = 1.990$. Os primeiros iniciam-se em um e cai drasticamente por volta de $T = 0.40$. Concomitantemente o segundo inicia-se em zero e aumenta significativamente.

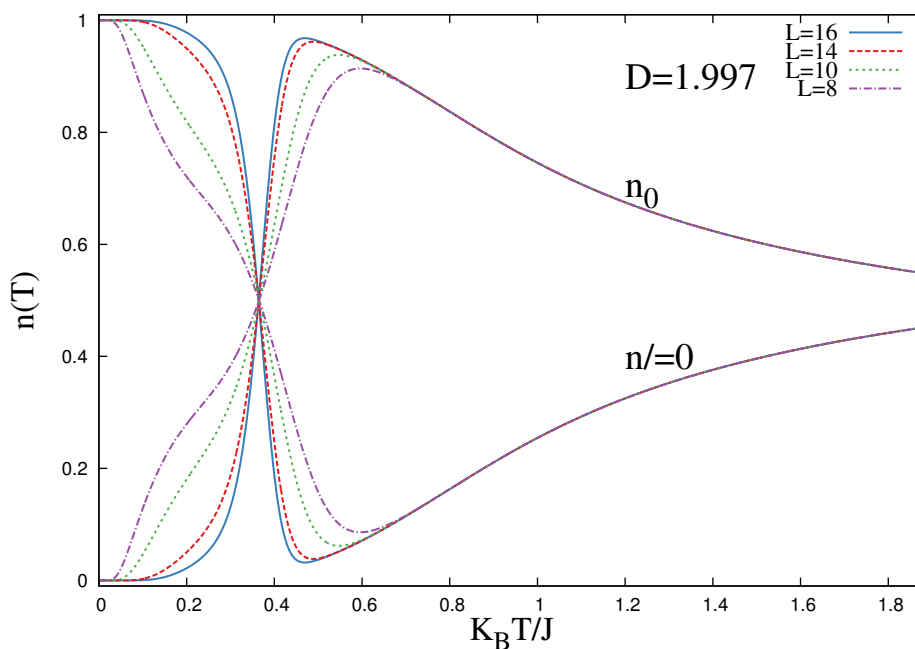


Figura 5.44: Densidade de spins diferentes de zero e iguais a zero a $D = 1.997$. Os primeiros iniciam-se em um e cai drasticamente por volta de $T = 0.40$. Concomitantemente o segundo inicia-se em zero e aumenta significativamente.

5.4 Modelo de Baxter-Wu 3D Spin-1/2

Para estudar o modelo de BW-3D no caso spin-1/2, foram realizadas simulações para os tamanhos de redes $L = 8, 10, 14, 16$ e 20 . Foram feitas o total de $n = 24, 20, 20, 16$ e 16 rodadas independentes para cada tamanho de rede respectivamente, caracterizando uma amostra, e a média final é obtida sobre cinco amostras. Anteriormente foram realizadas a média sobre dez amostras, entretanto, como neste caso os valores de todas as rodadas coincidiram dentro da barra de erro, considerou-se realizar cinco conjuntos de amostras. A Fig. 5.45 mostra o logaritmo da densidade de estados para o tamanho de rede $L = 14$.

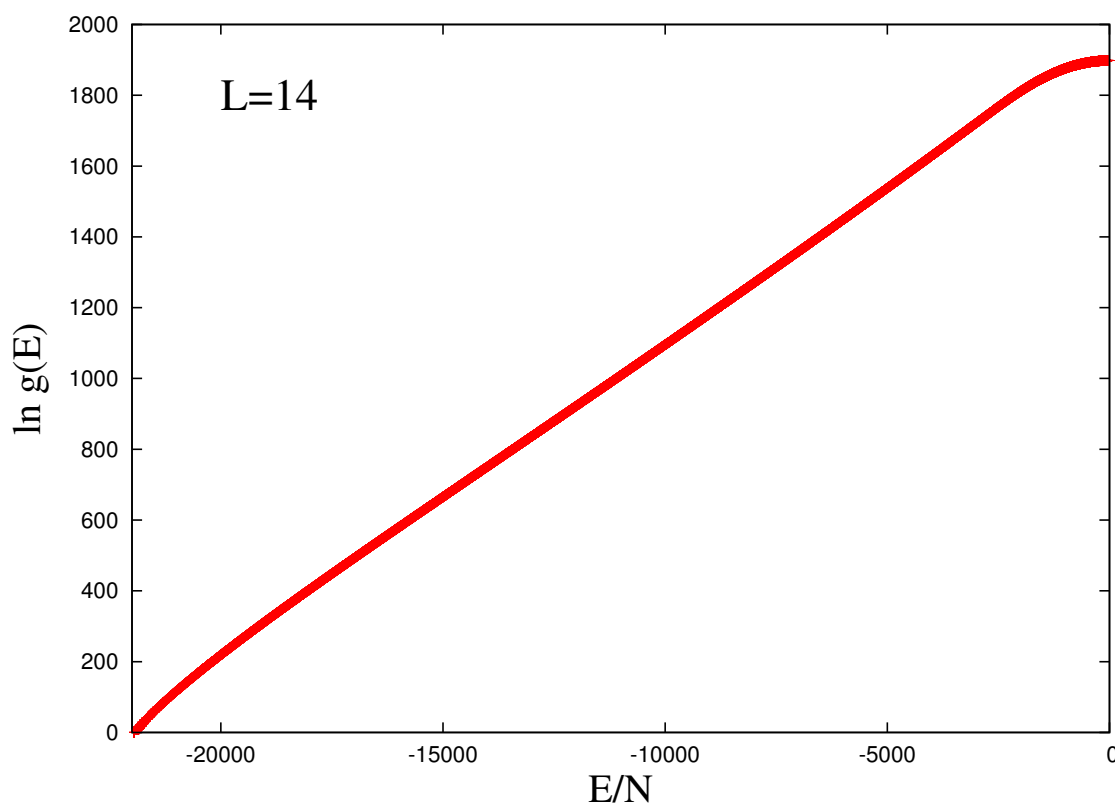


Figura 5.45: Logaritmo da densidade de estados para o tamanho de rede $L = 14$.

A fim de caracterizar o tipo de transição que o sistema sofre, observou-se o comportamento da energia interna, da magnetização, da distribuição de probabilidades da energia e dos cumulantes de quarta ordem da magnetização e da energia.

As Figs. 5.46 e 5.47 apresentam a energia interna e a magnetização em função da temperatura. Nota-se claramente uma descontinuidade na temperatura de transição, evidenciando que o sistema sofre uma transição descontínua entre as fases ordenada e desordenada. Este tipo de transição é confirmado pelo cumulante da energia e da magnetização, Figs. 5.48 e 5.49 respectivamente, e pela distribuição de probabilidades da energia, que apresentou dois picos separados entre si, Fig. 5.50.

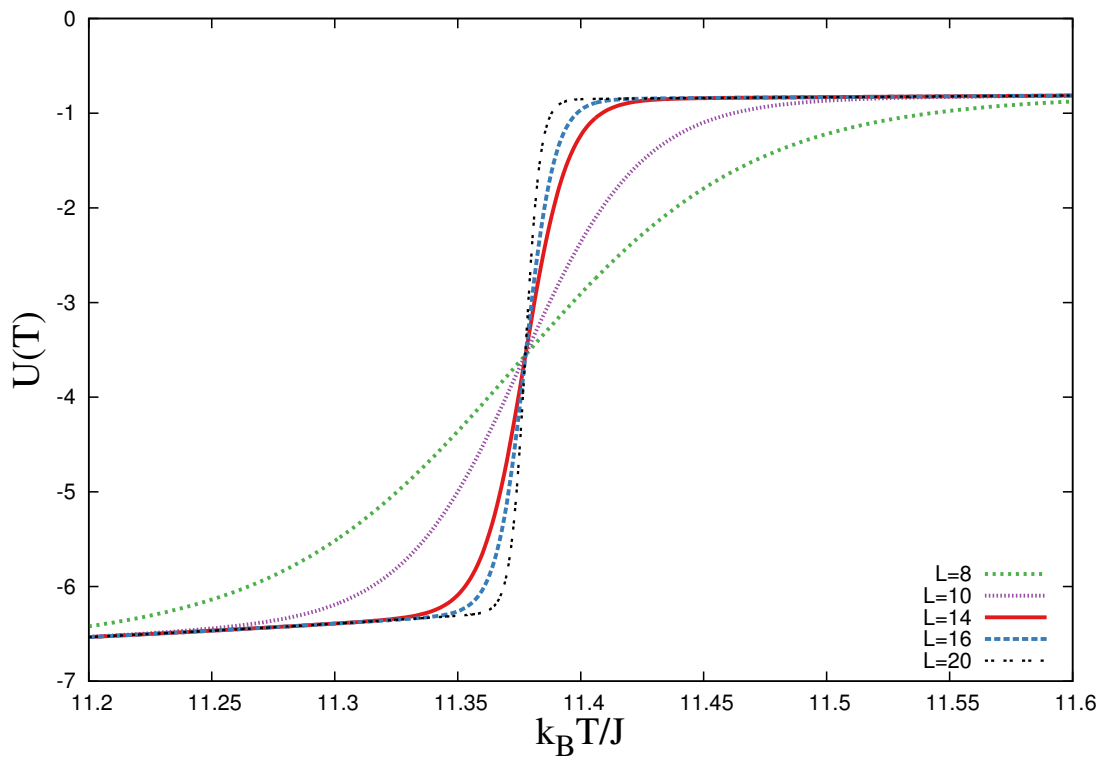


Figura 5.46: Energia interna como função da temperatura.

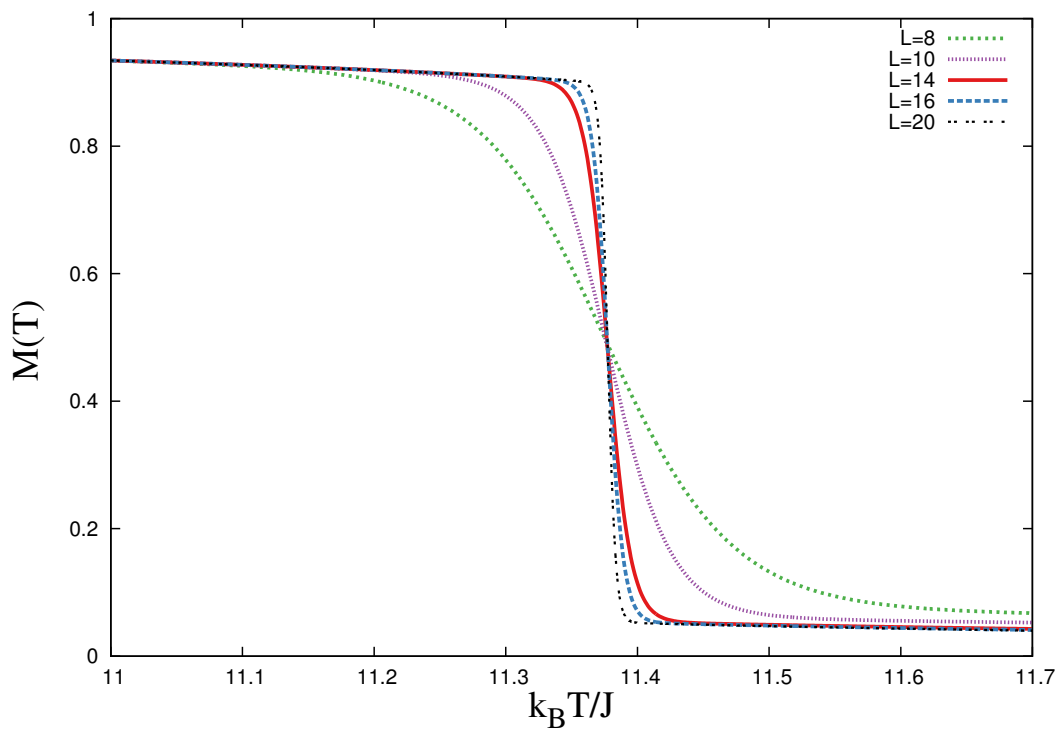


Figura 5.47: Magnetização como função da temperatura.

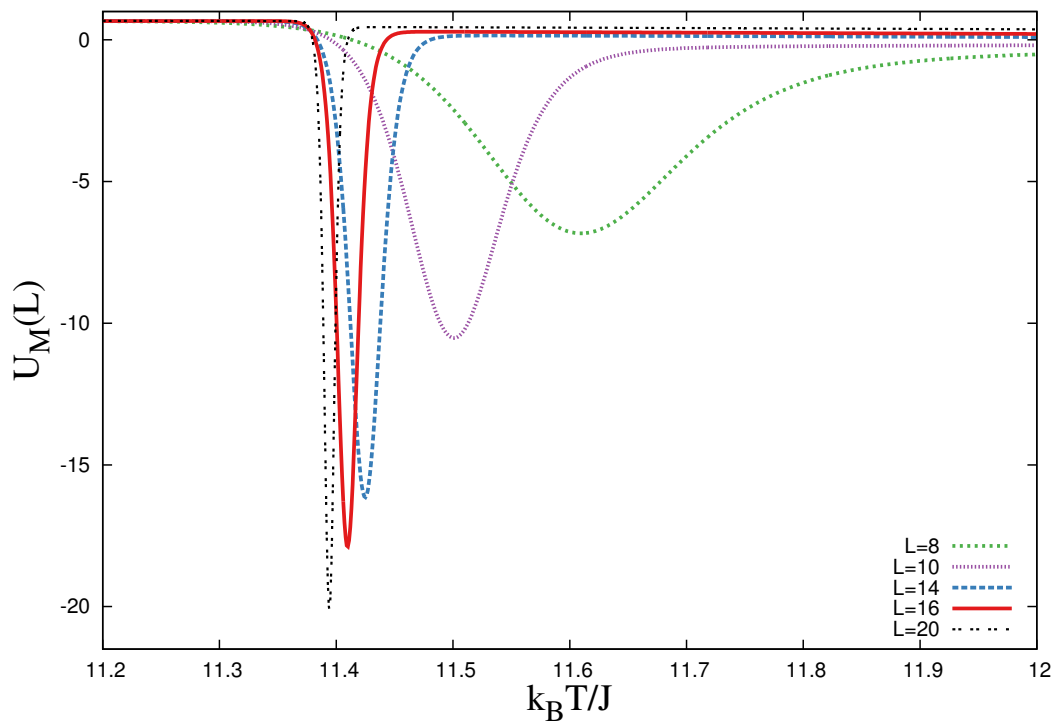


Figura 5.48: Cumulante de quarta ordem do parâmetro de ordem como função da temperatura.

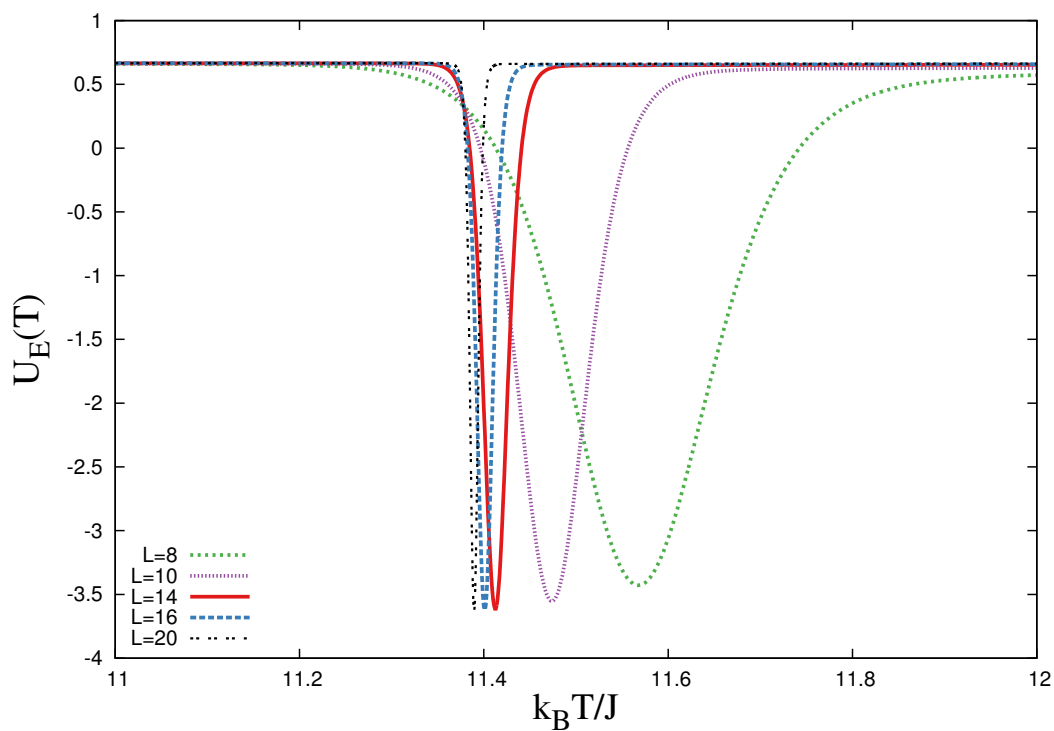


Figura 5.49: Cumulante de quarta ordem da energia como função da temperatura.

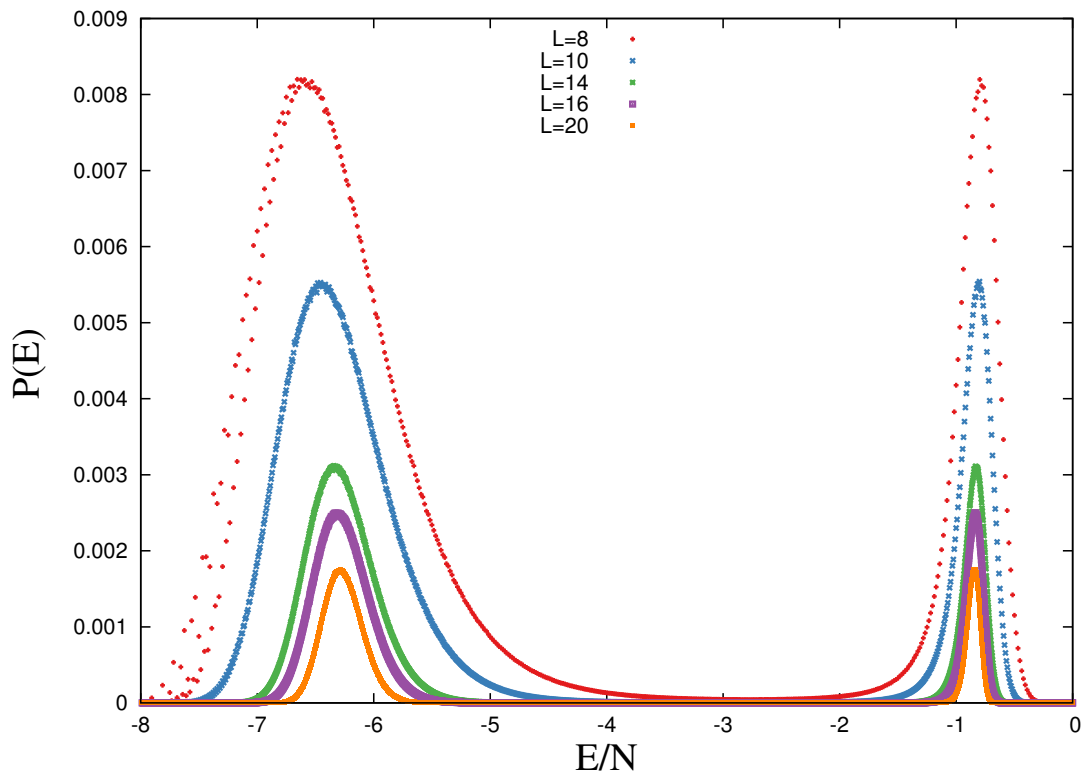


Figura 5.50: Distribuição de probabilidades da energia como função da energia por partícula.

Em um sistema que sofre uma transição descontínua, o coeficiente angular das seis retas, dadas pela Eqs. 2.50, oriundas dos máximos das derivadas logarítmicas da magnetização, devem resultar na dimensionalidade do sistema. A Fig. 5.51, mostra o resultado para a primeira amostra com $d = 3.0300(26)$. O valor obtido para cada conjunto de amostra é mostrado na Tab. 5.8.

| d_{V_j} | d_{C_v} | d_{khi} | T_c |
|-------------|-------------|------------|---------------|
| 3.0300(26) | 2.9835(48) | 3.019(13) | 11.377618(30) |
| 3.0309(29) | 2.9813(48) | 3.020(11) | 11.377486(41) |
| 3.0310(28) | 2.9810(45) | 3.018(11) | 11.377690(17) |
| 3.0312(28) | 2.9815(44) | 3.024(12) | 11.377600(34) |
| 3.0306(27) | 2.9829(40) | 3.017(11) | 11.377489(36) |
| 3.03075(21) | 2.98205(50) | 3.0197(12) | 11.377627(12) |

Tabela 5.8: Cinco resultados de escala de tamanho finito, para transições de primeira ordem, para V_j , para o calor específico e para a susceptibilidade, e para a temperatura crítica. A média sobre todas as rodadas é mostrada na última linha da Tabela.

Após obter a razão oriunda das quantidades V_j , aproximadamente igual à dimensão do sistema, utilizamos esse resultado para determinar a temperatura crítica, utilizando a Eq. 2.55 como a extrapolação de $L \rightarrow \infty$ ($L^d = 0$) dos ajustes lineares dos

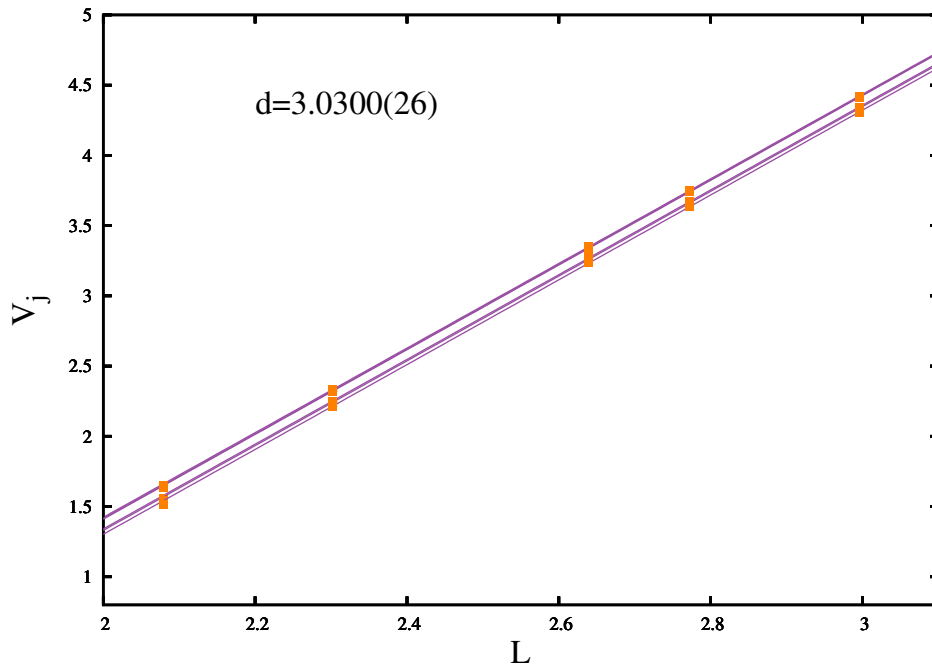


Figura 5.51: Coeficiente angular das derivadas logarítmicas da magnetização, V_j , com o logaritmo do tamanho de rede. As inclinações forneceram aproximadamente a dimensionalidade do sistema.

máximos do calor específico e da susceptibilidade magnética, bem como a temperatura do mínimo dos cumulantes de quarta ordem da energia e do parâmetro de ordem, e a temperatura quando a distribuição de probabilidades da energia apresenta um pico duplo. Temos que $T_c(L)$, é a temperatura de transição para cada tamanho de rede, e o valor da temperatura de transição no limite termodinâmico é o coeficiente linear da reta que melhor se ajusta aos dados.

Pode-se notar, na Fig. 5.52, que os ajustes lineares convergem para T_c em $L^d = 0$. O resultado obtido para cada conjunto de amostras é a média dos valores obtidos para o calor específico, para a susceptibilidade magnética, para a temperatura do mínimo dos cumulantes de quarta ordem da energia e do parâmetro de ordem, e para a temperatura quando a distribuição de probabilidades da energia apresenta um pico duplo. A Fig. 5.52 mostra os resultados para uma pasta. O resultado final para T_c foi $T_c = 1.377627(12)$. Os resultados para os cinco conjuntos de amostras e o valor final obtido para a temperatura, são mostrados na Tab. 5.8.

Tomando o logaritmo da Eq. 2.54, obtemos, a partir dos máximos da susceptibilidade e do calor específico, para cada tamanho de rede aproximadamente a dimensão do sistema. O ajuste linear das retas é mostrado na Fig. 5.53, e o resultado final para as cinco amostras é apresentado na segunda e terceira colunas da Tab. 5.8.

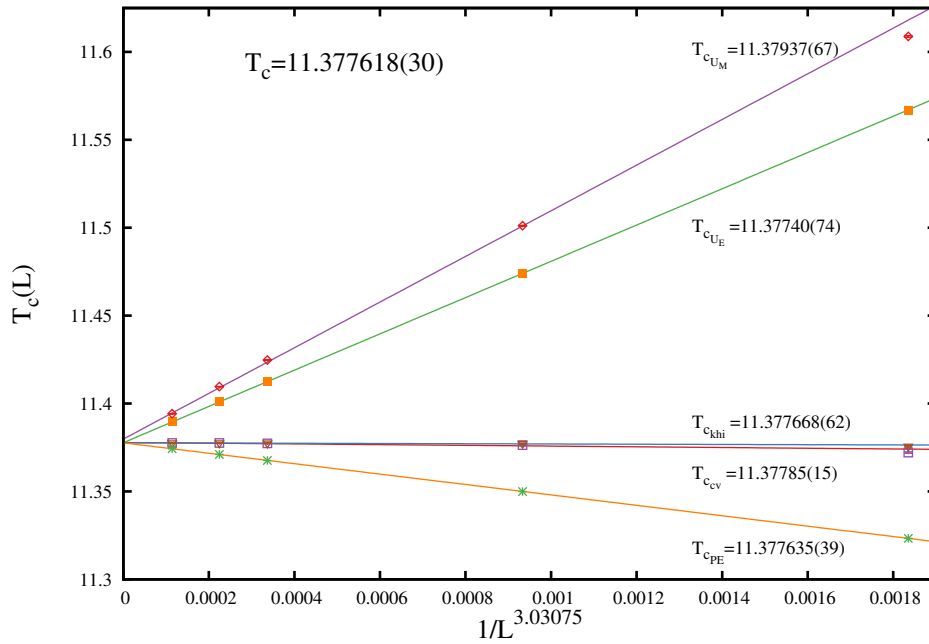


Figura 5.52: Dependência da temperatura do mínimo do cumulante da energia e da temperatura do pico duplo de $PE()$ com o tamanho de rede, com $1/L^{3.03075}$.

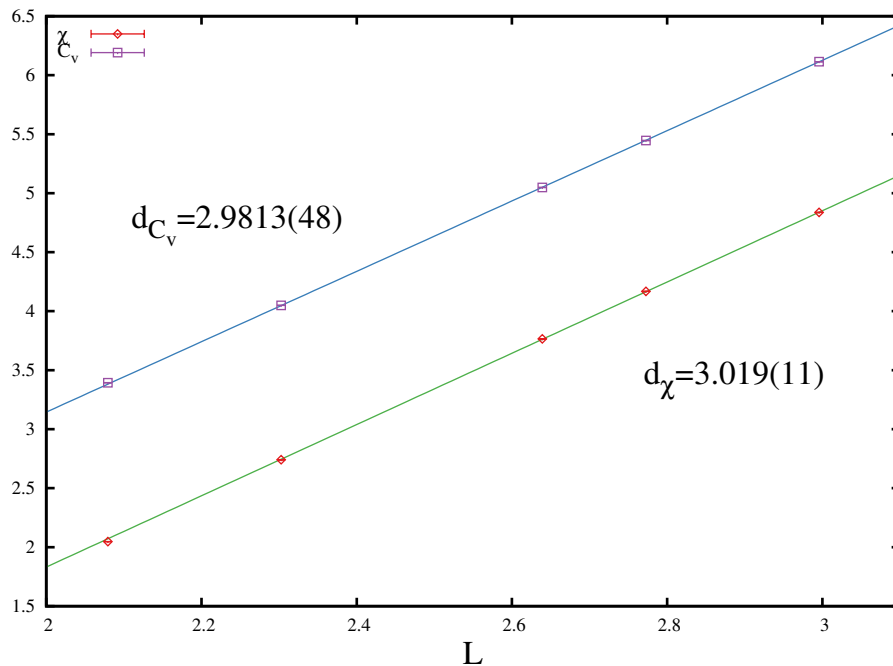


Figura 5.53: Gráfico log-log dos máximos do calor específico e da susceptibilidade com o tamanho de rede. Os coeficientes lineares forneceram aproximadamente a dimensão do sistema.

CONSIDERAÇÕES FINAIS E PROJETOS FUTUROS

Neste trabalho, realizamos simulações entrópicas no modelo de Baxter-Wu via algoritmo de Wang-Landau, com alguns melhoramentos, a saber: i) atualização da densidade de estados a cada passo de Monte Carlo a fim de escolher configurações decorrelacionadas, ii) para evitar extensas simulações, todas as rodadas foram feitas até $\ln f = \ln f_{final}$, definido por médias canônicas ao longo das simulações, iii) adotou-se o parâmetro de verificação ε para finalizar automaticamente as rodadas, e iii) as médias microcanônicas não foram acumuladas antes de $\ln f = \ln f_{micro}$ (também definido pelas médias canônicas durante as simulações), uma vez que, no início das rodadas, as configurações não coincidem com as de máxima entropia.

Inicialmente, estudamos o modelo de Baxter-Wu spin-1/2, onde o parâmetro de ordem considerado foi a magnetização total do sistema, de modo que não foi necessário dividi-lo em sub-redes. Abordou-se o problema com redes múltiplas e não múltiplas de três. Para as primeiras, foi necessário definir uma pseudo-susceptibilidade a fim de calcular o expoente crítico γ . Os resultados tiveram uma excelente concordância com os valores exatos que constam na literatura, em particular a temperatura crítica, quando comparados com os resultados obtidos por outras metodologias.

Estudando o parâmetro de ordem, descobrimos que, para as redes múltiplas de três, que possuem o estado fundamental quatro vezes degenerado que se dividem em dois tipos de magnetizações, nas simulações de WL a visitação deste nível de energia não se dá na proporção correta de cada configuração, fato que faz com que a média microcanônica da magnetização não convirja para o seu valor correto. Sendo assim, mesmo trabalhando com a pseudo-susceptibilidade, as médias de $\langle m \rangle$ e $\langle m^2 \rangle$ oriundas das simulações não estão completamente “preenchidas”. Para as redes múltiplas de três, não há problema algum uma vez que o seu estado fundamental não é degenerado. Sendo assim, ao se trabalhar com as redes não-múltiplas de três, deve-se considerar o parâmetro de ordem como a

magnetização total do sistema. Entretanto, adotando redes múltiplas de três, deve-se utilizar o parâmetro de ordem na forma $M = \sqrt{(m_A^2 + m_B^2 + m_C^2)}/3$.

O modelo de Baxter-Wu com vacâncias, o spin-1, apresentava dois resultados opostos para a sua transição de fase. Sendo assim, investigamos qual o tipo de transição que o modelo realmente sofre. A energia interna e a magnetização não forneceram nenhuma direção sobre a transição de fase. No entanto, as derivadas logarítmicas da magnetização resultaram em um expoente crítico próximo ao valor exato do modelo spin-1/2, e não a dimensionalidade do sistema, levando a crer que eles possuem o mesmo tipo de transição de fase, neste caso, contínua. Entretanto o cumulante de quarta ordem da magnetização e da energia apresentaram um comportamento típico de uma transição descontínua. Outro fato interessante é que a distribuição de probabilidades da energia apresentou um pico duplo. Porém, o intervalo entre os picos apresenta energias com probabilidades não-nulas. Isto é compatível com a distribuição desta grandeza em regiões próximas a pontos críticos ou tricríticos. Sendo assim, concluímos, que neste ponto em particular, temos uma região de coexistência de fases semelhante a um ponto crítico. Estas mesmas quantidades foram observadas para o BW puro, spin-1/2. Kinzel afirmava que somente para o modelo puro tem-se uma transição contínua, porém, as nossas simulações mostraram que os cumulantes evidenciaram uma transição descontínua e a distribuição de probabilidades da energia mostra que temos uma região crítica. Portanto, mesmo para o modelo puro, temos também neste caso um ponto crítico com a coexistência de fases na transição entre as fases ordenada e desordenada.

Sendo assim, tivemos por objetivo fazer um estudo do diagrama de fases completo pela inserção do campo cristalino. Nesse caso, nas simulações utilizamos uma densidade de estados conjunta, $g(E_1, E_2)$, de modo que com apenas uma simulação podemos calcular as quantidades termodinâmicas para qualquer valor de temperatura e do campo cristalino. Trabalhos anteriores concordam com a existência de um ponto pentacrítico que separa as transições descontínuas das transições contínuas. Inicialmente observamos a energia interna e a magnetização para diversos valores do campo. Elas mostraram uma variação no tipo de transição de fase, onde, a partir de $D = 1,60$ se tornam descontínuas, indicando que antes desta região existe uma transição contínua entre as fases ordenada e desordenada. Verificando os cumulantes da energia e da magnetização, eles tiveram, para todos os valores do campo cristalino, um comportamento que exibem em uma transição descontínua, mais uma vez turvando as águas no que diz respeito ao comportamento crítico do modelo. Para determinar de fato o ponto em que passamos a ter somente transições descontínuas, verificamos a evolução do máximo do calor específico em função do campo cristalino. Espera-se o aparecimento de um pico para o valor do campo cristalino onde, a partir do qual inicia-se a região das transições descontínuas. Este ponto foi estimado em cerca de $D_c = 1,68288(62)$. A temperatura correspondente deste ponto foi estimada em $T_c = 0,97577(85)$. Estes valores são bem diferentes dos encontrados por Costa, $D_c = 1.40$

e $T_c = 1,1723(3)$, e por Dias, $D_c = 0,890254$ e $T_c = 1,1690$. Também encontramos que o expoente crítico ν varia ao longo da linha crítica, devido ao comportamento multicrítico do modelo, alcançando seu maior valor próximo ao ponto pentacrítico, e depois estabilizando-se em torno de 2, a dimensionalidade do sistema. Por fim, também obtemos um segundo pico no calor específico para valores do campo cristalino acima de 1,990. Este segundo pico não escala com o tamanho do sistema, e aparece devido ao aumento abrupto no número de spins $s_i = 0$, podendo ser associado ao defeito Schottky em uma rede cristalina.

Por fim, propomos uma representação do modelo de Baxter-Wu em três dimensões. Considerando que em um hexágono temos três retas que passam pelo seu centro, quando adicionamos os planos XZ e YZ , contemplamos apenas dois desses três eixos, de modo que é necessário adicionar mais um plano que passe pelo eixo faltante. Assim, após feita a construção do modelo, realizamos simulações entrópicas, de modo que a transição entre as fases ordenada ferromagnética e paramagnética deu-se de modo descontínuo, o que foi corroborado pelo comportamento de todas as grandezas avaliadas, a saber: as derivadas logarítmicas da magnetização, o calor específico, a susceptibilidade magnética, os cumulantes de quarta ordem da energia e do parâmetro de ordem e a temperatura quando a distribuição de probabilidades da energia apresenta um pico duplo.

Adiante, podemos buscar uma abordagem mais geral deste modelo com a inserção de um campo externo, ou de um campo cristalino. Outra proposta tridimensional para o BW é a construção de um metamagneto com interações em tripletos, tal como no modelo de Baxter-Wu. Nos planos dos hexágonos, a interação entre os spins primeiros vizinhos é J_1 e a interação interplanar J_2 . Um sistema assim pode ser descrito pelo hamiltoniano

$$H = -J_1 \sum_{\langle i,j,k \rangle} s_i s_j s_k + J_2 \sum_{\langle j,h \rangle} s_j s_h, \quad (6.1)$$

onde a primeira soma é sobre as faces triangulares e a segunda soma é sobre os sítios primeiros vizinhos das redes acima e abaixo. Para o caso $J_1 = 1$ e $J_2 = -1$, a modelagem já foi feita e conta com alguns resultados.

No modelo de Baxter-Wu spin-1/2, iniciamos um estudo mais abrangente considerando a adição de um campo externo, h . Este sistema pode ser descrito pelo hamiltoniano

$$H = -J_1 \sum_{\langle i,j,k \rangle} s_i s_j s_k - h \sum_i s_i, \quad (6.2)$$

onde a primeira soma é sobre as faces triangulares e a segunda soma é sobre os sítios da rede. Temos alguns resultados prévios interessantes: a evolução do máximo do calor específico como função do campo externo apresentou dois máximos, o que pode indicar duas mudanças na criticalidade. Os cumulantes da energia e do parâmetro de ordem, cujos resultados, em nossos estudos anteriores, apresentavam um único tipo de transição, neste caso, para determinados valores do campo externo tiveram um comportamento bem

definido nas regiões das transições contínuas e nas descontínuas. Buscaremos, no futuro, estudar mais cuidadosamente o modelo de Baxter-Wu com interação do campo externo, para construir o seu diagrama de fases tridimensional dependente de três parâmetros: da temperatura, do campo cristalino e do campo externo.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] WOLF, W. The Ising model and real magnetic materials. **Brazilian Journal of Physics**, SciELO Brasil, v. 30, n. 4, p. 794–810, 2000. Citado na página 23.
- [2] ISING, E. Beitrag zur theorie des ferromagnetismus. **Zeitschrift für Physik A Hadrons and Nuclei**, Springer, v. 31, n. 1, p. 253–258, 1925. Citado 2 vezes nas páginas 23 e 31.
- [3] ISING, E. A contribution to the theory of ferromagnetism. **z. Phys**, v. 31, n. 1, p. 253–258, 1925. Citado na página 23.
- [4] ONSAGER, L. Crystal statistics. i. a two-dimensional model with an order-disorder transition. **Phys. Rev.**, American Physical Society, v. 65, p. 117–149, Feb 1944. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.65.117>>. Citado na página 23.
- [5] BAXTER, R. J. **Exactly solved models in statistical mechanics**. [S.l.]: Courier Corporation, 2007. Citado 4 vezes nas páginas 23, 51, 54 e 71.
- [6] HEISENBERG, W. Zur theorie des ferromagnetismus. In: **Original Scientific Papers Wissenschaftliche Originalarbeiten**. [S.l.]: Springer, 1985. p. 580–597. Citado na página 23.
- [7] BLUME, M. Theory of the first-order magnetic phase change in UO₂. **Phys. Rev.**, American Physical Society, v. 141, p. 517–524, Jan 1966. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.141.517>>. Citado 3 vezes nas páginas 23, 60 e 95.
- [8] CAPEL, H. On the possibility of first-order phase transitions in Ising systems of triplet ions with zero-field splitting. **Physica**, v. 32, n. 5, p. 966 – 988, 1966. ISSN 0031-8914. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0031891466900279>>. Citado 3 vezes nas páginas 23, 60 e 95.
- [9] WOOD, D.; GRIFFITHS, H. 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, 1972. Citado 4 vezes nas páginas 23, 51, 52 e 53.
- [10] BAXTER, R. J.; WU, F. Exact solution of an Ising model with three-spin interactions on a triangular lattice. **Physical Review Letters**, APS, v. 31, n. 21, p. 1294, 1973. Citado 3 vezes nas páginas 23, 51 e 54.
- [11] 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 3 vezes nas páginas 23, 51 e 54.

- [12] 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 3 vezes nas páginas 23, 51 e 54.
- [13] NOVOTNY, M.; LANDAU, D. Monte Carlo renormalization-group study of the impure Baxter-Wu model. **Physical Review B**, APS, v. 32, n. 5, p. 3112, 1985. Citado 3 vezes nas páginas 23, 54 e 55.
- [14] NOVOTNY, M.; LANDAU, D. Kinetic behavior of the Baxter-Wu model with quenched impurities. **Physical Review B**, APS, v. 32, n. 9, p. 5874, 1985. Citado 3 vezes nas páginas 23, 54 e 55.
- [15] SANTOS, M.; FIGUEIREDO, W. Critical dynamics of the Baxter-Wu model. **Physical Review E**, APS, v. 63, n. 4, p. 042101, 2001. Citado 3 vezes nas páginas 23, 56 e 71.
- [16] MARTINOS, S.; MALAKIS, A.; HADJIAGAPIOU, I. Critical finite-size scaling of magnetization distribution function for Baxter–Wu model. **Physica A: Statistical Mechanics and its Applications**, v. 331, n. 1–2, p. 182 – 188, 2004. ISSN 0378-4371. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0378437103008355>>. Citado 3 vezes nas páginas 23, 54 e 56.
- [17] MARTINOS, S.; MALAKIS, A.; HADJIAGAPIOU, I. Finite-size scaling analysis of the critical behavior of the Baxter–Wu model. **Physica A: Statistical Mechanics and its Applications**, v. 352, n. 2–4, p. 447 – 458, 2005. ISSN 0378-4371. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0378437104016115>>. Citado 2 vezes nas páginas 23 e 56.
- [18] 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. 2–4, p. 393 – 407, 2005. ISSN 0378-4371. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0378437105001895>>. Citado 2 vezes nas páginas 23 e 56.
- [19] VELONAKIS, I.; MARTINOS, S. A new cluster algorithm for the Baxter–Wu model. **Physica A: Statistical Mechanics and its Applications**, v. 390, n. 1, p. 24 – 30, 2011. ISSN 0378-4371. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0378437110003833>>. Citado 2 vezes nas páginas 23 e 56.
- [20] VELONAKIS, I.; MARTINOS, S. Baxter-Wu model in the presence of an external magnetic field. **Physica A: Statistical Mechanics and its Applications**, Elsevier, v. 392, n. 9, p. 2016–2024, 2013. Citado 2 vezes nas páginas 23 e 56.
- [21] COSTA, M. L. M.; XAVIER, J. C.; PLASCAK, J. A. Phase diagram and critical behavior of the spin-1 Baxter-Wu model with a crystal field. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 69, p. 104103, Mar 2004. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.69.104103>>. Citado 6 vezes nas páginas 24, 59, 60, 91, 92 e 93.
- [22] DIAS, D. A.; XAVIER, J. C.; PLASCAK, J. A. Critical behavior of the spin-1 and spin-3/2 Baxter-Wu model in a crystal field. **Phys. Rev. E**, American Physical Society, v. 95, p. 012103, Jan 2017. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.95.012103>>. Citado 5 vezes nas páginas 24, 60, 91, 92 e 93.

- [23] SILVA, C. J.; CAPARICA, A. A.; PLASCAK, J. A. Wang-Landau Monte Carlo simulation of the Blume-Capel model. **Phys. Rev. E**, American Physical Society, v. 73, p. 036702, Mar 2006. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.73.036702>>. Citado na página 24.
- [24] KWAK, W. et al. First-order phase transition and tricritical scaling behavior of the Blume-Capel model: A Wang-Landau sampling approach. **Physical Review E**, APS, v. 92, n. 2, p. 022134, 2015. Citado 2 vezes nas páginas 24 e 99.
- [25] METROPOLIS, N. et al. Equation of state calculations by fast computing machines. **The journal of chemical physics**, AIP Publishing, v. 21, n. 6, p. 1087–1092, 1953. Citado 3 vezes nas páginas 24, 27 e 44.
- [26] BERG, B. A.; NEUHAUS, T. Multicanonical algorithms for first order phase transitions. **Physics Letters B**, Elsevier, v. 267, n. 2, p. 249–253, 1991. Citado na página 24.
- [27] BERG, B. A.; NEUHAUS, T. Multicanonical ensemble: A new approach to simulate first-order phase transitions. **Physical Review Letters**, APS, v. 68, n. 1, p. 9, 1992. Citado na página 24.
- [28] LEE, J. New Monte Carlo algorithm: Entropic sampling. **Phys. Rev. Lett.**, American Physical Society, v. 71, p. 211–214, Jul 1993. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.71.211>>. Citado 2 vezes nas páginas 24 e 44.
- [29] OLIVEIRA, P. Murilo-Castro de; PENNA, T.; HERRMANN, H. Broad histogram method. **Brazilian Journal of Physics**, SciELO Brasil, v. 26, n. 4, p. 677–683, 1996. Citado 2 vezes nas páginas 24 e 44.
- [30] PENNA, T.; HERRMANN, H. Broad histogram Monte Carlo. **The European Physical Journal B-Condensed Matter and Complex Systems**, Springer, v. 1, n. 2, p. 205–208, 1998. Citado 2 vezes nas páginas 24 e 44.
- [31] WANG, F.; LANDAU, D. Efficient, multiple-range random walk algorithm to calculate the density of states. **Physical review letters**, APS, v. 86, n. 10, p. 2050, 2001. Citado 2 vezes nas páginas 24 e 44.
- [32] WANG, F.; LANDAU, D. Determining the density of states for classical statistical models: A random walk algorithm to produce a flat histogram. **Physical Review E**, APS, v. 64, n. 5, p. 056101, 2001. Citado 2 vezes nas páginas 24 e 44.
- [33] BEALE, P. D. Exact distribution of energies in the two-dimensional Ising model. **Physical Review Letters**, APS, v. 76, n. 1, p. 78, 1996. Citado na página 24.
- [34] RATHORE, N.; PABLO, J. J. de. Monte Carlo simulation of proteins through a random walk in energy space. **The Journal of chemical physics**, AIP, v. 116, n. 16, p. 7225–7230, 2002. Citado na página 24.
- [35] WÜST, T.; LANDAU, D. P. Versatile approach to access the low temperature thermodynamics of lattice polymers and proteins. **Physical review letters**, APS, v. 102, n. 17, p. 178101, 2009. Citado na página 24.

- [36] SINGH, S.; CHOPRA, M.; PABLO, J. J. de. Density of states–based molecular simulations. **Annual review of chemical and biomolecular engineering**, Annual Reviews, v. 3, p. 369–394, 2012. Citado na página 24.
- [37] TROYER, M.; WESSEL, S.; ALET, F. Flat histogram methods for quantum systems: algorithms to overcome tunneling problems and calculate the free energy. **Physical review letters**, APS, v. 90, n. 12, p. 120201, 2003. Citado na página 24.
- [38] INGLIS, S.; MELKO, R. G. Wang-Landau method for calculating Rényi entropies in finite-temperature quantum Monte Carlo simulations. **Physical Review E**, APS, v. 87, n. 1, p. 013306, 2013. Citado na página 24.
- [39] 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: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.85.046702>>. Citado 4 vezes nas páginas 24, 25, 45 e 46.
- [40] CAPARICA, A. A. Wang-Landau sampling: A criterion for halting the simulations. **Phys. Rev. E**, American Physical Society, v. 89, p. 043301, Apr 2014. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.89.043301>>. Citado 2 vezes nas páginas 25 e 65.
- [41] FERREIRA, L.; CAPARICA, A. Computer simulations of a polimer with exact solution. **International Journal of Modern Physics C**, v. 23, n. 08, p. 1240012, 2012. Disponível em: <<http://www.worldscientific.com/doi/abs/10.1142/S0129183112400128>>. Citado na página 25.
- [42] FERREIRA, L. S. et al. The rubber band revisited: Wang-Landau simulation. **Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment**, v. 2012, n. 10, p. P10028, 2012. Disponível em: <<http://stacks.iop.org/1742-5468/2012/i=10/a=P10028>>. Citado na página 25.
- [43] FERREIRA, L. S. et al. Thermodynamic properties of rod-like chains: Entropic sampling simulations. **Modern Physics Letters B**, v. 30, n. 31, p. 1650378, 2016. Citado na página 25.
- [44] CAPARICA, A. A.; DASILVA, C. J. Finite-size scaling considerations on the ground state microcanonical temperature in entropic sampling simulations. **Brazilian Journal of Physics**, v. 45, n. 6, p. 713–718, 2015. ISSN 1678-4448. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1007/s13538-015-0361-8>>. Citado 3 vezes nas páginas 25, 70 e 71.
- [45] Caparica, A.; Leão, S.; DaSilva, C. Static critical behavior of the q-states Potts model: High-resolution entropic study. **ArXiv e-prints**, jan. 2015. Citado 2 vezes nas páginas 25 e 36.
- [46] RAPAPORT, D. C. **The art of molecular dynamics simulation**. [S.l.]: Cambridge university press, 2004. Citado na página 27.
- [47] BINDER, K.; HEERMANN, D. **Monte Carlo simulation in statistical physics: an introduction**. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2010. Citado 4 vezes nas páginas 27, 29, 37 e 38.

- [48] NEWMAN, M.; BARKEMA, G. **Monte Carlo Methods in Statistical Physics**. [S.l.]: Oxford University Press: New York, USA, 1999. Citado 5 vezes nas páginas 27, 28, 29, 51 e 54.
- [49] LANDAU, D. P.; BINDER, K. **A guide to Monte Carlo simulations in statistical physics**. [S.l.]: Cambridge university press, 2014. Citado 4 vezes nas páginas 27, 37, 40 e 44.
- [50] GIBBS, J. W. Elementary principles in statistical physics. **The Collected Works of JW Gibbs (Yale University, New Haven, CT, 1957)**, v. 2, 1902. Citado na página 28.
- [51] BERCHE, B.; HENKEL, M.; KENNA, R. Critical phenomena: 150 years since Cagniard de la Tour. **Revista Brasileira de Ensino de Física**, SciELO Brasil, v. 31, n. 2, p. 2602–1, 2009. Citado na página 30.
- [52] ANDREWS, T.; TAIT, P. G. **The Scientific Papers of Thomas Andrews**. [S.l.: s.n.], 1889. Citado na página 30.
- [53] WAALS, J. V. der. **Over de Continuïteit van den Gas - en Vloeistoestand**. Tese (Doutorado), Leiden, 1873. Citado na página 30.
- [54] MAXWELL, J. C. Statique expérimentale et théorique des liquides soumis aux seules forces moléculaires. **Nature**, v. 10, p. 119–121, 1874. Citado na página 30.
- [55] CLERK-MAXWELL, J. On the dynamical evidence of the molecular constitution of bodies. **Nature**, v. 11, p. 357–359, 1875. Citado na página 30.
- [56] GIBBS, J. **Scientific papers 1906**. [S.l.]: Dover, New York, 1961. Citado na página 30.
- [57] CURIE, P. **Propriétés magnétiques des corps a diverses températures**. [S.l.]: Gauthier-Villars et fils, 1895. Citado na página 30.
- [58] LANDAU, L. D. On the theory of phase transitions. i. **Zh. Eksp. Teor. Fiz.**, v. 11, p. 19, 1937. Citado 2 vezes nas páginas 30 e 32.
- [59] LANDAU, L. D. On the theory of phase transitions. ii. **Zh. Eksp. Teor. Fiz.**, v. 11, p. 627, 1937. Citado 2 vezes nas páginas 30 e 32.
- [60] GOLDENFELD, N. Lectures on phase transitions and the renormalization group. Addison-Wesley, Advanced Book Program, Reading, 1992. Citado 2 vezes nas páginas 30 e 32.
- [61] FISHER, M. E.; BARBER, M. N. Scaling theory for finite-size effects in the critical region. **Phys. Rev. Lett.**, American Physical Society, v. 28, p. 1516–1519, Jun 1972. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.28.1516>>. Citado 2 vezes nas páginas 30 e 33.
- [62] SALINAS, S. R. **Introdução a Física Estatística Vol. 09**. [S.l.]: Edusp, 1997. Citado na página 32.

- [63] KADANOFF, L. P. et al. Static phenomena near critical points: theory and experiment. **Reviews of Modern Physics**, APS, v. 39, n. 2, p. 395, 1967. Citado na página 32.
- [64] FISHER, M. E. The renormalization group in the theory of critical behavior. **Reviews of Modern Physics**, APS, v. 46, n. 4, p. 597, 1974. Citado na página 32.
- [65] STANLEY, H. E. Phase transitions and critical phenomena. **Clarendon, Oxford**, p. 9, 1971. Citado na página 32.
- [66] HUANG, K. **Introduction to statistical physics**. [S.l.]: CRC Press, 2009. Citado na página 33.
- [67] ESSAM, J. W.; FISHER, M. E. Pade approximant studies of the lattice gas and Ising ferromagnet below the critical point. **The Journal of Chemical Physics**, AIP, v. 38, n. 4, p. 802–812, 1963. Citado na página 33.
- [68] RUSHBROOKE, G. On the thermodynamics of the critical region for the Ising problem. **The Journal of Chemical Physics**, AIP Publishing, v. 39, n. 3, p. 842–843, 1963. Citado na página 33.
- [69] WIDOM, B. Equation of state in the neighborhood of the critical point. **The Journal of Chemical Physics**, AIP, v. 43, n. 11, p. 3898–3905, 1965. Citado na página 33.
- [70] PRIVMAN, V. **Finite size scaling and numerical simulation of statistical systems**. [S.l.]: World Scientific, 1990. Citado na página 33.
- [71] CHEN, K.; FERRENBURG, A. M.; LANDAU, D. Static critical behavior of three-dimensional classical Heisenberg models: A high-resolution Monte Carlo study. **Physical Review B**, APS, v. 48, n. 5, p. 3249, 1993. Citado na página 36.
- [72] CAPARICA, A.; BUNKER, A.; LANDAU, D. Classical ferromagnet with double-exchange interaction: High-resolution Monte Carlo simulations. **Physical Review B**, APS, v. 62, n. 14, p. 9458, 2000. Citado na página 36.
- [73] BINDER, K. Finite size scaling analysis of Ising model block distribution functions. **Zeitschrift für Physik B Condensed Matter**, v. 43, n. 2, p. 119–140, 1981. ISSN 1431-584X. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1007/BF01293604>>. Citado na página 37.
- [74] IMRY, Y. Finite-size rounding of a first-order phase transition. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 21, p. 2042–2043, Mar 1980. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.21.2042>>. Citado na página 37.
- [75] 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 2 vezes nas páginas 37 e 75.
- [76] VOLLMAYR, K. et al. Finite size effects at thermally-driven first order phase transitions: A phenomenological theory of the order parameter distribution. **Zeitschrift für Physik B Condensed Matter**, Springer, v. 91, n. 1, p. 113–125, 1993. Citado na página 38.

- [77] BINDER, K. Applications of Monte Carlo methods to statistical physics. **Reports on Progress in Physics**, IOP Publishing, v. 60, n. 5, p. 487, 1997. Citado na página 38.
- [78] FISHER, M. E.; BERKER, A. N. Scaling for first-order phase transitions in thermodynamic and finite systems. **Physical Review B**, APS, v. 26, n. 5, p. 2507, 1982. Citado na página 38.
- [79] YAMAGATA, A. A first-order phase transition in the three-dimensional four-state antiferromagnetic Potts model. **Journal of Physics A: Mathematical and General**, IOP Publishing, v. 26, n. 3, p. 519, 1993. Citado na página 38.
- [80] BOER, A. Monte Carlo simulation of the two-dimensional Potts model using nonextensive statistics. **Physica A: Statistical Mechanics and its Applications**, Elsevier, v. 390, n. 23, p. 4203–4209, 2011. Citado na página 39.
- [81] LEE, J.; KOSTERLITZ, J. Finite-size scaling and Monte Carlo simulations of first-order phase transitions. **Physical Review B**, APS, v. 43, n. 4, p. 3265, 1991. Citado na página 39.
- [82] BINDER, K.; LANDAU, D. P. Finite-size scaling at first-order phase transitions. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 30, p. 1477–1485, Aug 1984. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.30.1477>>. Citado na página 39.
- [83] BINDER, K. Theory of first-order phase transitions. **Reports on progress in physics**, IOP Publishing, v. 50, n. 7, p. 783, 1987. Citado na página 39.
- [84] FYTAS, N. G. Wang-Landau study of the triangular Blume-Capel ferromagnet. **The European Physical Journal B**, Springer-Verlag, v. 79, n. 1, p. 21–28, 2011. ISSN 1434-6028. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1140/epjb/e2010-10738-y>>. Citado 3 vezes nas páginas 40, 95 e 96.
- [85] SCHNABEL, S. et al. Microcanonical entropy inflection points: Key to systematic understanding of transitions in finite systems. **Physical Review E**, APS, v. 84, n. 1, p. 011127, 2011. Citado 2 vezes nas páginas 40 e 41.
- [86] KRAUTH, W. **Statistical mechanics: algorithms and computations**. [S.l.]: Oxford University Press, 2006. Citado na página 44.
- [87] FERRENBERG, A. M.; SWENDSEN, R. H. New Monte Carlo technique for studying phase transitions. **Physical review letters**, APS, v. 61, n. 23, p. 2635, 1988. Citado na página 44.
- [88] LANDAU, D. P.; WANG, F. A new approach to Monte Carlo simulations in statistical physics. **Brazilian journal of physics**, SciELO Brasil, v. 34, n. 2A, p. 354–362, 2004. Citado 2 vezes nas páginas 44 e 46.
- [89] JORGE, L. N. et al. Critical behavior of the spin-1/2 Baxter-Wu model: Entropic sampling simulations. **Brazilian Journal of Physics**, v. 46, n. 5, p. 556–564, 2016. ISSN 1678-4448. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1007/s13538-016-0439-y>>. Citado na página 46.

- [90] ROELOFS, L. D. et al. Critical exponents of a four-state Potts chemisorbed overlayer: p (2×2) oxygen on Ni (111). **Physical Review Letters**, APS, v. 46, n. 22, p. 1465, 1981. Citado na página 51.
- [91] PIERCY, P.; PFNÜR, H. Experimental verification of critical exponents in the two-dimensional four-state Potts universality class: Oxygen on Ru (0001). **Physical review letters**, APS, v. 59, n. 10, p. 1124, 1987. Citado na página 51.
- [92] SCHWENGER, L. et al. Effect of random quenched impurities on the critical behavior of a four-state Potts system in two dimensions: An experimental study. **Physical review letters**, APS, v. 73, n. 2, p. 296, 1994. Citado na página 51.
- [93] WU, F.-Y. The Potts model. **Reviews of modern physics**, APS, v. 54, n. 1, p. 235, 1982. Citado 2 vezes nas páginas 51 e 54.
- [94] KINZEL, W.; DOMANY, E.; AHARONY, A. Finite size scaling analysis of the dilute Baxter-Wu model. **Journal of Physics A: Mathematical and General**, v. 14, n. 10, p. L417, 1981. Disponível em: <<http://stacks.iop.org/0305-4470/14/i=10/a=007>>. Citado 3 vezes nas páginas 51, 59 e 77.
- [95] COSTA, M.; PLASCAK, J. Monte Carlo study of the spin-1 Baxter-Wu model. **Brazilian journal of physics**, SciELO Brasil, v. 34, n. 2A, p. 419–421, 2004. Citado na página 52.
- [96] MA, B.; JIANG, W. Surface effects on phase diagram and magnetization of a mixed spin-3/2 and spin-5/2 Ising multilayers. **IEEE Transactions on Magnetics**, v. 47, n. 10, p. 3118–3121, Oct 2011. ISSN 0018-9464. Citado na página 52.
- [97] WANG, W. et al. Monte Carlo study of the surface effect on the compensation and critical behaviour in a molecular-based magnetic film AFeIIIFeIII (C₂O₄)₃. **Journal of Physics D: Applied Physics**, IOP Publishing, v. 45, n. 47, p. 475002, 2012. Citado na página 52.
- [98] MAIGNAN, A. et al. Quantum tunneling of the magnetization in the Ising chain compound Ca₃Co₂O₆. **J. Mater. Chem.**, The Royal Society of Chemistry, v. 14, p. 1231–1234, 2004. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1039/B316717H>>. Citado na página 52.
- [99] MAIGNAN, A. et al. Single crystal study of the one dimensional CaCoO compound: five stable configurations for the Ising triangular lattice. **The European Physical Journal B-Condensed Matter and Complex Systems**, Springer, v. 15, n. 4, p. 657–663, 2000. Citado na página 52.
- [100] KUDASOV, Y. B. Steplike magnetization in a spin-chain system: Ca₃Co₂O₆. **Physical review letters**, APS, v. 96, n. 2, p. 027212, 2006. Citado na página 52.
- [101] RÖSSLER, U. K.; BOGDANOV, A. N. Synthetic metamagnetism—magnetic switching of perpendicular antiferromagnetic superlattices. **Journal of magnetism and magnetic materials**, Elsevier, v. 269, n. 3, p. L287–L291, 2004. Citado na página 52.
- [102] WANG, W. et al. Monte Carlo study of magnetic and thermodynamic properties of a ferrimagnetic Ising nanoparticle with hexagonal core-shell structure. **Journal of Physics and Chemistry of Solids**, Elsevier, 2017. Citado na página 52.

- [103] LV, D. et al. Monte Carlo study of magnetic and thermodynamic properties of a ferrimagnetic mixed-spin (1, 3/2) Ising nanowire with hexagonal core-shell structure. **Journal of Alloys and Compounds**, Elsevier, 2017. Citado na página 52.
- [104] KANEYOSHI, T. Magnetic properties of a cylindrical Ising nanowire (or nanotube). **physica status solidi (b)**, Wiley Online Library, v. 248, n. 1, p. 250–258, 2011. Citado na página 52.
- [105] MASROUR, R. et al. Hysteresis and compensation behaviors of mixed spin-2 and spin-1 hexagonal Ising nanowire core-shell structure. **Physica B: Condensed Matter**, Elsevier, v. 472, p. 19–24, 2015. Citado na página 52.
- [106] AHMED, J. et al. Microemulsion-mediated synthesis of cobalt (pure fcc and hexagonal phases) and cobalt-nickel alloy nanoparticles. **Journal of colloid and interface science**, Elsevier, v. 336, n. 2, p. 814–819, 2009. Citado na página 52.
- [107] CHEN, Y.-B.; CHEN, L.; WU, L.-M. Water-induced thermolytic formation of homogeneous core-shell CuS microspheres and their shape retention on desulfurization. **Crystal Growth and Design**, ACS Publications, v. 8, n. 8, p. 2736–2740, 2008. Citado na página 52.
- [108] BARBER, M. N. On the nature of the critical point in the three-spin triangular Ising model. **Journal of Physics A: Mathematical and General**, IOP Publishing, v. 9, n. 11, p. L171, 1976. Citado na página 54.
- [109] FRIED, H. Nonlocal percolation and partial ordering in the dilute Baxter-Wu model. **J. Phys. A: Math. Gen.**, IOP Publishing, v. 25, n. 9, p. 2545–2555, May 1992. ISSN 1361-6447. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1088/0305-4470/25/9/025>>. Citado na página 54.
- [110] ALCARAZ, F.; XAVIER, J. Conformal invariance studies of the Baxter-Wu model and a related site-colouring problem. **Journal of Physics A: Mathematical and General**, IOP Publishing, v. 30, n. 8, p. L203, 1997. Citado na página 54.
- [111] ALCARAZ, F.; XAVIER, J. Critical and off-critical studies of the Baxter-Wu model with general toroidal boundary conditions. **Journal of Physics A: Mathematical and General**, IOP Publishing, v. 32, n. 11, p. 2041, 1999. Citado na página 54.
- [112] SCHREIBER, N.; ADLER, J. Monte Carlo study of the pure and dilute Baxter-Wu model. **Journal of Physics A: Mathematical and General**, IOP Publishing, v. 38, n. 33, p. 7253, 2005. Citado na página 54.
- [113] JORGE, L. N. Simulações de Monte Carlo no Modelo de Baxter-Wu Spin-1. **Master's Dissertation**, 2010. Citado 2 vezes nas páginas 61 e 93.
- [114] WONG, S. S. **Computational methods in physics and engineering**. [S.l.]: Prentice-Hall, Inc., 1992. Citado na página 66.
- [115] ARASHIRO, E.; FELÍCIO, J. R. Drugowich de. Short-time critical dynamics of the Baxter-Wu model. **Phys. Rev. E**, American Physical Society (APS), v. 67, n. 4, Apr 2003. ISSN 1095-3787. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevE.67.046123>>. Citado na página 71.

- [116] CARE, C. Microcanonical Monte Carlo study of a two-dimensional Blume-Capel model. **Journal of Physics A: Mathematical and General**, IOP Publishing, v. 26, n. 7, p. 1481, 1993. Citado 2 vezes nas páginas 92 e 93.
- [117] ZIERENBERG, J.; FYTAS, N. G.; JANKE, W. Parallel multicanonical study of the three-dimensional Blume-Capel model. **Physical Review E**, APS, v. 91, n. 3, p. 032126, 2015. Citado na página 93.
- [118] BELL, G.; LAVIS, D. Two-dimensional bonded lattice fluids. II. orientable molecule model. **Journal of Physics A: General Physics**, IOP Publishing, v. 3, n. 5, p. 568, 1970. Citado 2 vezes nas páginas 96 e 97.
- [119] ŠIMĚNAS, M.; IBENSKAS, A.; TORNAU, E. E. Phase transition properties of the Bell-Lavis model. **Physical Review E**, APS, v. 90, n. 4, p. 042124, 2014. Citado na página 97.
- [120] PLASCAK, J. a. A.; MARTINS, P. H. L.; BACHMANN, M. Solvent-dependent critical properties of polymer adsorption. **Phys. Rev. E**, American Physical Society, v. 95, p. 050501, May 2017. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.95.050501>>. Citado na página 98.
- [121] GRIFFITHS, R. B. Proposal for notation at tricritical points. **Physical Review B**, APS, v. 7, n. 1, p. 545, 1973. Citado na página 99.
- [122] KITTEL, C. **Introduction to solid state physics**. [S.l.]: Wiley, 2005. Citado na página 99.
- [123] ASHCROFT, N. W.; MERMIN, N. D. **Física do estado sólido**. [S.l.]: Cengage Learning, 2011. Citado na página 99.