

Universidade Federal de Ouro Preto

Programa de Pós-Graduação em Ciências
Física de Materiais

Dissertação

**Modelo de *clock* de *p*-estados
2D com campo externo nulo:
um estudo sobre transições
de fase por meio do método
de Monte Carlo e dos zeros
da função de partição**

Maycon Júnior da Cruz Silva

Ouro Preto
2021



UFOP

MAYCON JÚNIOR DA CRUZ SILVA

Modelo de *clock* de p -estados 2D com campo externo nulo: um estudo sobre transições de fase por meio do método de Monte Carlo e dos zeros da função de partição

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Ciências - Física de Materiais da Universidade Federal de Ouro Preto, como parte dos requisitos necessários para a obtenção do título de Mestre em Ciências com ênfase em Física de Materiais.

Área de concentração: Física de Materiais.

Linha de pesquisa: Modelagem Matemática e Simulação Computacional.

Universidade Federal de Ouro Preto

Instituto de Ciências Exatas e Biológicas

Programa de Pós-Graduação em Ciências - Física de Materiais

Orientador: Prof. Dr. Júlio César Siqueira Rocha - UFOP

Coorientador: Prof. Dr. Bismarck Vaz da Costa - UFMG

Ouro Preto

2021

SISBIN - SISTEMA DE BIBLIOTECAS E INFORMAÇÃO

S586m Silva, Maycon Júnior da Cruz .
Modelo de clock de p-estados 2D com campo externo nulo
[manuscrito]: um estudo sobre transições de fase por meio do método de Monte Carlo e dos zeros da função de partição. / Maycon Júnior da Cruz Silva. - 2021.
126 f.: il.: color., gráf., tab.. + Fluxograma.

Orientador: Prof. Dr. Júlio César Siqueira Rocha.
Coorientador: Prof. Dr. Bismarck Vaz da Costa.
Dissertação (Mestrado Acadêmico). Universidade Federal de Ouro Preto. Departamento de Física. Programa de Pós-Graduação em Ciências. Área de Concentração: Física de Materiais.

1. Fenômenos de transição de fase. 2. Ferromagnetismo . 3. Monte Carlo, Método de . I. Costa, Bismarck Vaz da. II. Rocha, Júlio César Siqueira. III. Universidade Federal de Ouro Preto. IV. Título.

CDU 620

Bibliotecário(a) Responsável: Celina Brasil Luiz - CRB6-1589



MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO
UNIVERSIDADE FEDERAL DE OURO PRETO
REITORIA
INSTITUTO DE CIÊNCIAS EXATAS E BIOLÓGICAS
DEPARTAMENTO DE FÍSICA



FOLHA DE APROVAÇÃO

Maycon Júnior da Cruz Silva

Modelo de Clock de P-Estados 2d com campo externo nulo: um estudo sobre Transições de Fase por meio do Método de Monte Carlo e dos Zeros da Função de Partição

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-graduação em Ciências da Universidade Federal de Ouro Preto como requisito parcial para obtenção do título de mestre

Aprovada em 25 de agosto de 2021

Membros da banca

Dr. Júlio César Siqueira Rocha - Orientador - Universidade Federal de Ouro Preto

Dr. Ronaldo Junio Campos Batista - Universidade Federal de Ouro Preto

Dr. Paulo Henrique Lana Martins - Universidade Federal do Mato Grosso

Júlio César Siqueira Rocha, orientador do trabalho, aprovou a versão final e autorizou seu depósito no Repositório Institucional da UFOP em 07/12/2021.



Documento assinado eletronicamente por **Mariana Cristina Moreira Souza**, **ASSISTENTE EM ADMINISTRACAO**, em 07/12/2021, às 07:55, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).



Documento assinado eletronicamente por **Julio Cesar Siqueira Rocha**, **PROFESSOR DE MAGISTERIO SUPERIOR**, em 07/12/2021, às 15:12, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).



A autenticidade deste documento pode ser conferida no site http://sei.ufop.br/sei/controlador_externo.php?acao=documento_conferir&id_orgao_acesso_externo=0, informando o código verificador **0254686** e o código CRC **FBB49711**.

Referência: Caso responda este documento, indicar expressamente o Processo nº 23109.008853/2021-10

SEI nº 0254686

R. Diogo de Vasconcelos, 122, - Bairro Pilar Ouro Preto/MG, CEP 35400-000
Telefone: 3135591667 - www.ufop.br

Eu sou o primeiro da minha família a entrar e concluir um curso de pós-graduação stricto sensu, em uma das melhores universidades federais do Brasil. Esta oportunidade só me foi possível, e a outras pessoas de origem humilde deste país, graças a indivíduos que lutaram e lutam diariamente para que a educação e a ciência sejam acessíveis, de forma igualitária e com qualidade, a todos. Sendo assim, dedico este trabalho àqueles que acreditam na educação como uma estrutura transformadora e que lutam contra a precarização da ciência brasileira.

Agradecimentos

Agradeço o apoio e o suporte dos meus pais, e também do meu irmão, durante todo o período do mestrado. O amor de vocês foi fundamental nos momentos difíceis. Ao Marlon pela força, compreensão e carinho nos bons e nos maus momentos. Foi você que me apresentou a dinâmica da carreira acadêmica e me motivou nos momentos em que eu quis desistir. Então, nada disso seria possível sem você.

Agradeço aos professores Júlio César e Bismarck pela excelente orientação neste trabalho e por estarem sempre dispostos a ajudar quando eu precisei. A Universidade Federal de Ouro Preto (UFOP) e ao Programa de Pós-Graduação em Ciências - Física de Materiais (FIMAT) pela oportunidade de crescimento profissional e pessoal. A Mariana por estar sempre disposta a ajudar e pelos conselhos nos momentos difíceis.

Agradeço aos professores do FIMAT por compartilhar conhecimento de qualidade e por mostrar que é muito importante lutar pela ciência e pela educação. Deixo também registrado o meu agradecimento e minha admiração ao professor Matheus Matos, com quem aprendi bastante e me senti representado. Aos alunos do FIMAT pelo troca de ideias e ajuda nos momentos difíceis; em especial ao Felipe, Manuel, Marcus e Ramon, com quem tive a oportunidade de aprender no dia a dia.

Agradeço a Universidade Federal de Minas Gerais (UFMG) e ao Laboratório de Computação Científica (LCC) pelo acesso aos equipamentos que possibilitaram a implementação das simulações computacionais deste trabalho. Ao Centro de Ensino Superior de Conselheiro Lafaiete (CES-CL) por disponibilizar o espaço físico e todo o acervo de livros, principalmente durante o período da pandemia do COVID-19, para a elaboração deste trabalho. Ao Adão por disponibilizar equipamentos, e por compartilhar conhecimentos, que foram relevantes para a elaboração da simulação computacional. A todos os meus amigos que estiveram presentes nessa trajetória, fornecendo palavras de apoio e carinho.

O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Código de Financiamento 001. Desse modo, agradeço à CAPES e as demais agências de fomento: CNPq, FAPEMIG e UFOP-PROPP.

“One thing I have learned in a long life: that all our science, measured against reality, is primitive and childlike - and yet is the most precious thing we have.”

(Albert Einstein)

Resumo

A transição de fase é um comportamento que ocorre diariamente em diversos sistemas físicos, por exemplo em ligas metálicas. Quando há mudanças bruscas e descontínuas nas propriedades termodinâmicas do sistema, provocadas pela variação contínua de um determinado parâmetro externo, temos uma transição de fase de primeira ordem. Mas, se houver uma continuidade em uma propriedade termodinâmica e uma descontinuidade em outra para a mesma transição, então temos uma transição de fase de segunda ordem ou contínua. Portanto, podemos afirmar que os pontos de transição de fase são pontos não analíticos nas propriedades termodinâmicas. O magnetismo é utilizado em muitas aplicações tecnológicas, por isso é extremamente importante compreender como ocorre a transição de fase nos magnetos. Este trabalho tem o objetivo de estudar as transições de fase de um modelo de material ferromagnético, chamado de modelo de *clock* de p -estados 2D, a campo externo nulo. Existe uma controvérsia na literatura a respeito da quantidade e do tipo de transições observadas nesse modelo de *spins*, o que justifica o interesse em seu estudo. Para descobrir quantas e os tipos de transições de fase observadas para os valores intermediários de p , utilizamos o método de Monte Carlo e os zeros da função de partição canônica, conhecido como zeros de Fisher. O método de Monte Carlo é usado neste trabalho para obter a distribuição de Boltzmann. Já os zeros de Fisher são utilizados como uma ferramenta de análise que possibilita obter os pontos de transição. Nessa técnica, as transições de fase são associadas a pontos de não-analiticidade da energia livre, assim sendo, podemos associá-los aos pontos onde a função de partição é igual a zero. A ideia aqui é escrever a função de partição como um polinômio, fazendo com que nossa tarefa se resume a encontrar as raízes desse polinômio. Como o grau do polinômio gerado pela função de partição canônica é muito alto, utilizamos um método alternativo para encontrar esses pontos sem a necessidade de realizar operações com polinômios de grau elevado. Neste método, chamado de zeros reduzidos, os coeficientes do polinômio são representados pela distribuição de Boltzmann. Logo, podemos estudar somente a região do espaço dos parâmetros termodinâmicos próximo ao ponto de transição. Além disso, desprezando os estados com baixa probabilidade, conseguimos reduzir de forma significativa o grau do polinômio e otimizamos a rotina computacional utilizada. Por conseguinte, mostramos que para valores intermediários de p o sistema apresenta duas transições de fase, uma na classe de universalidade de Ising a baixa temperatura e outra do tipo BKT para temperaturas mais elevadas. Contudo, a presença de dois tipos de transições só é vista a partir de $p = 5$, diferente de alguns resultados na literatura que apontam duas transições a temperaturas finitas e distintas já para $p = 3$ e 4.

Palavras-chave: Transições de fase. Zeros de Fisher Reduzidos. Ferromagnetismo. Modelo de *Clock* de p -estados. Método de Monte Carlo.

Abstract

Phase transition is a behavior that occurs daily in many physical systems, for example, metallic alloys. When there are sudden and discontinuous changes at system's thermodynamic properties, caused by the continuous variation of a certain external parameter, we have a first-order phase transition. But, if there is a continuity in a thermodynamic property and a discontinuity in another for the same transition, then we have a second-order or continuous phase transition. Therefore, we can state that the phase transition points are non-analytical points at thermodynamic properties. Magnetism is used in many technological applications, therefore it is extremely important to understand how the phase transition occurs in magnets. This work aims to study the phase transitions of an ferromagnetic material model, called a 2D p -state clock model, with a zero external field. There is controversy in the literature regarding the quantity and type of transitions observed in this spin model, that justifies the interest in its study. To find out how many and types of phase transitions observed for the intermediate p values, we use the Monte Carlo method and the zeros of the canonical partition function, known as Fisher zeros. The Monte Carlo method is used at this work to obtain the Boltzmann distribution. Fisher's zeros, on the other hand, are used as an analysis tool that makes it possible to obtain the transition points. With this technique, the phase transitions are associated with points of non-analyticity of free energy, thus, we can associate them to points where the partition function is equal to zero. The idea here is to write the partition function as a polynomial, making our task boil down to finding the roots from this polynomial. As the degree of the polynomial generated by the canonical partition function is very high, we use an alternative method to find these points without the need to perform operations with high degree polynomials. In this method, called reduced zeros, the polynomial coefficients are represented by the Boltzmann distribution. Therefore, we can study only the region of the thermodynamic parameters space close to the transition point. Furthermore, disregarding the states with low probability, we were able to significantly reduce the degree of the polynomial and optimize the computational routine used. Therefore, we show that for intermediate values of p the system presents two phase transitions, one in the Ising universality class at low temperature and the other of the BKT type at higher temperatures. However, the presence of two types of transitions is only seen from $p = 5$ onwards, unlike some results in the literature that point to two transitions at finite and distinct temperatures for $p = 3$ and 4.

Keywords: Phase transitions. Reduced Fisher Zeros. Ferromagnetism. p -states Clock Model. Monte Carlo Method.

Lista de ilustrações

Figura 1 – Linhas de força de um campo magnético ao redor de um ímã de barra (cima) e de um circuito de corrente (baixo)	18
Figura 2 – Representação esquemática do campo magnético gerado por uma bobina cilíndrica	20
Figura 3 – Configuração do dipolo atômico de um material paramagnético com e sem campo aplicado	22
Figura 4 – Representação esquemática do alinhamento mútuo de dipolos atômicos para um material ferromagnético (igual na ausência e na presença do campo magnético externo)	23
Figura 5 – Modelo de <i>clock</i> para $p = 2$ (as setas em vermelho indicam os estados possíveis que o <i>spin</i> pode assumir)	26
Figura 6 – Modelo de <i>clock</i> para $p = 3$ (as setas em vermelho indicam os estados possíveis que o <i>spin</i> pode assumir)	26
Figura 7 – Modelo de <i>clock</i> para $p = 4$ (as setas em vermelho indicam os estados possíveis que o <i>spin</i> pode assumir)	27
Figura 8 – Modelo XY clássico bidimensional	28
Figura 9 – Representação dos spins por vetores confinados num plano	28
Figura 10 – Rede quadrada com condições de contorno periódicas	29
Figura 11 – Efeito da temperatura sobre a magnetização de um material ferromagnético	33
Figura 12 – Descontinuidades (a) da entropia e (b) do volume que caracterizam uma transição de fase de primeira ordem	40
Figura 13 – Diagrama de fase da água	40
Figura 14 – Comportamento da energia livre sobre a curva de coexistência	42
Figura 15 – Representação esquemática dos pares de vórtice e anti-vórtice ligados	52
Figura 16 – Comportamento dos <i>spins</i> do modelo de <i>clock</i> 2D para $p = 7$	54
Figura 17 – Sistema S em contato com o reservatório térmico R	62
Figura 18 – Algoritmo de Metropolis	73
Figura 19 – Configuração inicial e primeira troca de estado do <i>spin</i>	73
Figura 20 – Energia por <i>spin</i> em função de MCS	75
Figura 21 – Histograma da densidade de estados	77
Figura 22 – Rotina dos zeros reduzidos	80
Figura 23 – Histograma para $p = 5$ e $L = 20$, em $T_j = 1, 10J \vec{\sigma} ^2/k_B$	83
Figura 24 – Zeros reduzidos referente ao $h(E)$ da Figura 23	84
Figura 25 – Distâncias entre o ponto $x_c = (1, 0)$ e os pontos mais próximos	85
Figura 26 – Efeito do corte de 10^{-4} no histograma $h(E)$ para $L = 20$	86
Figura 27 – Efeito do corte de 10^{-3} no histograma $h(E)$ para $L = 20$	86

Figura 28 – Efeito do corte de 10^{-2} no histograma $h(E)$ para $L = 20$	87
Figura 29 – Efeito do corte de 10^{-1} no histograma $h(E)$ para $L = 20$	87
Figura 30 – Processo de convergência para $p = 7$ e $L = 20$	88
Figura 31 – Zeros reduzidos para $p = 3$ em $L = 20$ (esquerda) e $L = 90$ (direita) . .	89
Figura 32 – Mapa de zeros para $p \leq 4$ para $L \geq 20$	90
Figura 33 – Mapa de zeros para $p \geq 5$ em T_1 para $L \geq 20$	91
Figura 34 – Mapa de zeros para $p \geq 5$ em T_2 para $L \geq 20$	92
Figura 35 – Ajuste linear do gráfico log-log de $Im(x_c)$ pelo tamanho de rede L para $p \geq 2$	95
Figura 36 – Ajuste linear do gráfico da temperatura pseudo-crítica em função de $L^{-1/\nu}$ para $p \leq 5$	96
Figura 37 – Ajuste linear do gráfico da temperatura pseudo-crítica em função de $L^{-1/\nu}$ para $p \geq 5$	97
Figura 38 – Diagrama de fases	98
Figura 39 – Ajuste linear do gráfico log-log da magnetização e do calor específico pelo tamanho de rede L para $p = 2, 3$ e 4	99
Figura 40 – Ajuste linear do gráfico log-log da susceptibilidade magnética pelo tamanho de rede L para $p = 2, 3$ e 4	100

Lista de tabelas

Tabela 1	–	Expoentes críticos para um sistema magnético com dimensão espacial d	43
Tabela 2	–	Zeros reduzidos e temperaturas pseudo-críticas para $p \leq 4$	89
Tabela 3	–	Zeros reduzidos e temperaturas pseudo-críticas para $p \geq 5$ em T_1	90
Tabela 4	–	Zeros reduzidos e temperaturas pseudo-críticas para $p \geq 5$ em T_2	91
Tabela 5	–	Valores de $1/\nu$ para $p \geq 2$	92
Tabela 6	–	Valores de T_c para $p \geq 2$	93
Tabela 7	–	Resultados obtidos dos expoentes críticos α , β e γ para $p = 2, 3$ e 4	94

Sumário

1	INTRODUÇÃO	15
2	SISTEMAS MAGNÉTICOS	17
2.1	Conceitos gerais	19
2.2	Tipos de magnetismo	21
2.2.1	Paramagnetismo	21
2.2.2	Ferromagnetismo	22
2.3	Modelos de <i>spins</i>	23
2.3.1	Modelo de Ising 2D	24
2.3.2	Termo de troca	25
2.3.3	Modelo de <i>clock</i> de <i>p</i> -estados 2D	25
3	TRANSIÇÃO DE FASE	32
3.1	Conceitos termodinâmicos	33
3.1.1	Formulação da energia interna	35
3.1.2	Formulação da entropia	36
3.1.3	Potencial de Helmholtz	37
3.1.4	Energia livre de Gibbs magnética	39
3.2	Fenômenos críticos	39
3.2.1	Expoentes críticos	42
3.3	Teoria de escala de tamanho finito	46
3.4	Transição BKT	50
4	SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL	56
4.1	Conceitos sobre estatística e probabilidade	56
4.1.1	Probabilidade	56
4.1.2	Estatística	58
4.2	Ensemble canônico	62
4.3	Análise canônica e grandezas de interesse	65
4.4	Método de Monte Carlo	67
4.4.1	Gerador de números pseudo-aleatórios	67
4.4.2	Médias termodinâmicas	68
4.4.3	Cadeia de Markov	69
4.4.4	Equação mestra e balanço detalhado	70
4.4.5	Algoritmo de Metropolis	72
4.4.6	Grandezas de interesse via dinâmica de Monte Carlo	74

4.5	Zeros da função de partição	76
4.5.1	Zeros da densidade de probabilidade	79
5	DISCUSSÃO DOS RESULTADOS	82
5.1	Parâmetros para obter o zero dominante	82
5.2	Corte no histograma $h(E)$	85
5.3	Convergência do algoritmo	88
5.4	Expoentes críticos	91
6	CONSIDERAÇÕES FINAIS	101
	REFERÊNCIAS	103
	APÊNDICES	111
	APÊNDICE A – ALGORITMO DESENVOLVIDO PARA OBTER OS ZEROS DA FUNÇÃO DE PARTIÇÃO	112

1 Introdução

Apesar dos fenômenos magnéticos já serem conhecidos desde a antiguidade, o estudo sistemático do magnetismo começou somente no século XIX, tendo seu auge no desenvolvimento da teoria eletromagnética. Contudo, o magnetismo só foi plenamente compreendido com o desenvolvimento da Mecânica Quântica, já no século XX. Hoje em dia, os fenômenos magnéticos estão presentes em inúmeras aplicações tecnológicas. Uma das aplicações mais importantes é em meios de armazenamento de informação. Para a aplicação de materiais magnéticos necessitamos de uma compreensão teórica a respeito dos mecanismos relacionados as suas propriedades, especialmente relacionado com a temperatura. Logo, os métodos computacionais estão sendo amplamente utilizados no estudo do magnetismo, pois permitem realizar experimentos virtuais (simulações) em condições que não são tão acessíveis a sistemas físicos reais.

Outro fenômeno físico de grande interesse e presente no dia a dia é a transição de fase. Uma fase pode ser entendida como uma região do espaço de parâmetros termodinâmicos na qual o sistema apresenta propriedades físicas homogêneas, pictoricamente representado nos chamados diagramas de fase. Por exemplo, os intervalos de temperatura e pressão em que a água se apresenta no estado líquido (ou sólido, ou gasoso). A transição do sistema termodinâmico de uma fase para outra indica que há coexistência entre as fases; por exemplo, coexistência entre sólido e líquido (ou líquido e gás, ou sólido e gás).

Quando há coexistência entre as fases dizemos que essa é uma transição descontínua, ou de primeira ordem. O termo descontínuo se deve à descontinuidade observada na entropia em função da temperatura no ponto de transição. A diferença de entropia dos estados nesse ponto é relacionada ao calor latente. Essa grandeza termodinâmica é a quantidade de calor, fornecida ou retirada do sistema, necessária para transformar uma fase em outra. Se não há coexistência entre as fases, conseqüentemente não há calor latente, e dizemos que essa é uma transição contínua, ou de segunda ordem.

Segundo o teorema de Mermin–Wagner [1] sistemas de duas dimensões ou menos, com interações de curto alcance, não apresentam quebra espontânea de simetria em temperatura finita. Ou seja, não se observa uma ordem de longo alcance. Portanto, não há uma transição do tipo ordem-desordem em temperatura diferente de zero. O modelo XY (ou rotor planar) satisfaz essas condições, porém apresenta uma fase quase-ordenada à baixa temperatura em que a correlação espacial entre os *spins* decai com a distância por uma lei de potência. Em altas temperaturas, essa correlação decai exponencialmente, como esperado para uma fase desordenada. Essa mudança de comportamento caracteriza uma transição de fase à temperatura finita, esse novo tipo de transição é comumente chamado

de transição de Berezinskii–Kosterlitz–Thouless (BKT).

Neste trabalho, o interesse é em estudar as transições de fase de um modelo de *spin* bidimensional, chamado de modelo de *clock* de p -estados ($p = 2, 3, \dots$). O comportamento de um filme fino magnético, em determinadas condições, pode ser compreendido através desse modelo. Para $p = 2$ o modelo de *clock* se reduz ao modelo de Ising. Já para $p \rightarrow \infty$, ele se reduz ao modelo XY. Enquanto o primeiro apresenta uma transição contínua, na classe de universalidade Ising, o segundo apresenta uma transição BKT. Entretanto, há uma controvérsia na literatura a respeito da quantidade e dos tipos de transições observadas no modelo de *clock* de p -estados. Alguns resultados indicam que a transição BKT aparece já para $p \geq 3$. Contudo, há trabalhos que apresentam duas transições à temperaturas finitas e distintas para $p = 4$ e 5 .

2 Sistemas Magnéticos

Embora alguns historiadores acreditem que as primeiras observações sobre magnetismo tenham sido realizadas pelos chineses por volta de 2000 a.C, algumas fontes bibliográficas indicam que este fenômeno tornou-se conhecido pelos gregos antigos em aproximadamente 800 a.C [2, 3, 4]. Em função disso, a descoberta do magnetismo e suas primeiras aplicações não possuem registros históricos precisos [5].

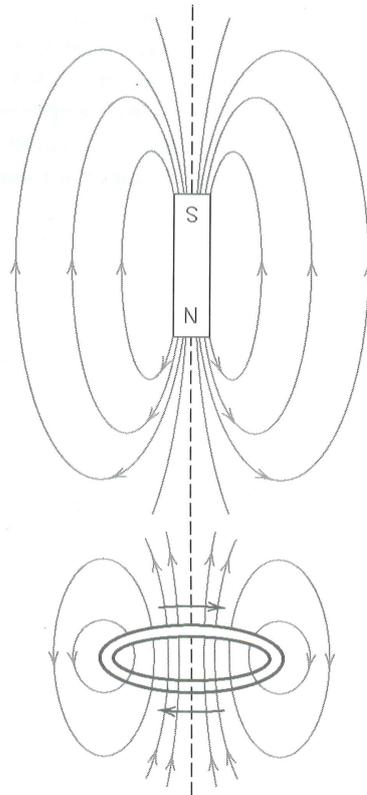
Existe também uma ambiguidade em relação a origem do termo "magnetismo". Alguns autores acreditam que ele deriva do nome da região onde foi observado, pela primeira vez, o único material naturalmente no estado magnético já encontrado na natureza, a magnetita (Fe_3O_4). Essa região seria a Magnésia, atualmente localizada na costa da Turquia [2, 3, 5]. Porém, outras literaturas defendem que a origem do termo tenha sido atribuída a um pastor de ovelhas, chamado Magnes. Ele teria observado inicialmente a atração que uma rocha exercia sobre a ponta metálica de seu cajado [5].

No século XIII surgiram estudos significativos sobre o magnetismo, porém destaca-se o trabalho realizado por Pierre Maricourt em 1269. Ele observou que ao colocar uma agulha de ferro em diversas posições de um ímã esférico natural, a mesma orientava-se ao longo de linhas que passavam por dois pontos diametralmente opostos. Estes pontos foram denominados como polos do ímã. Entretanto, outras experiências constataram que qualquer ímã, independente de sua forma, possui dois polos (norte e sul) que exibem forças entre si de maneira análoga às cargas elétricas (veja a Figura 1). Isto é, polos de mesmo tipo se repelem, enquanto polos diferentes se atraem [3, 4].

Estes nomes foram atribuídos aos polos por causa do comportamento de um ímã diante do campo magnético da Terra. Se considerarmos uma barra imantada suspensa por seu ponto médio com movimento livre em um plano horizontal, esta gira até que seu polo norte aponte para o polo norte geográfico da Terra (polo sul magnético). Já seu polo sul apontará para o polo sul geográfico da Terra (polo norte magnético) [2, 3]. William Gilbert ampliou esta experiência, em 1600, com outros materiais e constatou que, se consideramos que uma agulha de bússola se orienta em direções preferidas, os ímãs são atraídos pelas massas terrestres. Mas, foi em 1750, utilizando uma balança de torção, que John Michell observou que os polos magnéticos exercem forças atrativas ou repulsivas entre si [3].

Embora exista semelhança entre os dois polos magnéticos e duas cargas elétricas, estas podem ser isoladas. Já os polos magnéticos não podem ser isolados. É por este motivo que os polos magnéticos sempre são observados aos pares [3]. Décadas depois, Hans Oersted observou, em 1819, que a passagem de uma corrente elétrica forma um campo magnético que conseqüentemente afeta a agulha imantada de uma bússola [3, 7]. Este

Figura 1 – Linhas de força de um campo magnético ao redor de um ímã de barra (cima) e de um circuito de corrente (baixo)



Fonte: [6].

evento comprovou que os fenômenos elétricos e magnéticos estão inter-relacionados.

Outras pesquisas também sustentaram a opinião de Oersted. André Ampère conseguiu deduzir conceitos importantes sobre a força magnética entre condutores conduzindo corrente. Além disso, o mesmo sugeriu que todos os fenômenos magnéticos são provocados por correntes elétricas circulares de dimensões moleculares. Em 1820, tanto Faraday quanto Joseph Henry demonstraram que uma corrente elétrica podia ser produzida em um circuito posicionando um ímã próximo ou alterando a corrente em um circuito próximo. Essas observações comprovaram que um campo magnético variável consegue produzir um campo elétrico. Anos depois, James Clerk Maxwell demonstrou que o reverso também é possível [3].

A lista de aplicações tecnológicas do magnetismo é extensa. Desde o uso de grandes eletroímãs para levantar cargas pesadas até o uso de fitas magnéticas para registrar informações digitais em computadores [3]. Logo, o magnetismo desempenha um papel fundamental no cotidiano do homem, por isso é interessante compreender os efeitos que o campo magnético exerce sobre as propriedades magnéticas de muitos materiais.

2.1 Conceitos gerais

As interações magnéticas podem ser descritas em duas etapas. Primeiro, o dipolo magnético (espira de corrente ou carga movimentando-se em *loop*) cria um campo magnético em suas vizinhanças [2, 8]. O campo magnético gerado por dipolos magnéticos é análogo ao campo elétrico gerado por dipolos elétricos. No segundo instante, o campo magnético exerce uma força sobre qualquer outra corrente ou carga que esteja se movimentando no interior do campo [2]. Essa força magnética é gerada através do movimento da partícula eletricamente carregada e pode ser adicionada a qualquer outra força eletrostática existente [8].

Um solenoide (ou bobina) é um dispositivo eletromagnético que consiste basicamente de um fio enrolado na forma de hélice. Cada volta completa do fio é chamada de espira. Cada espira gera um campo magnético similar ao do circuito de corrente ilustrado na Figura 1. Logo, devido ao princípio da sobreposição os campos das espiras se somam. Para um solenoide longo, e no qual as espiras são enroladas bem próximas uma das outras, o campo magnético em seu interior é praticamente uniforme e no exterior tende para zero, desde que sejam considerados pontos longe das extremidades para evitar efeitos de borda. Esse é o protótipo de um solenoide ideal, que possui campo uniforme no seu interior e nulo no exterior. A partir de agora, sempre que falarmos de solenoide estaremos nos referindo ao dispositivo ideal.

O campo magnético aplicado externamente também pode ser chamado de intensidade do campo magnético, e é representado por H [8]. Se o campo magnético for gerado por um solenoide com N espiras de comprimento l e conduzindo uma corrente com magnitude I (veja as Figuras 2a e 2b), então:

$$H = \frac{NI}{l}. \quad (2.1)$$

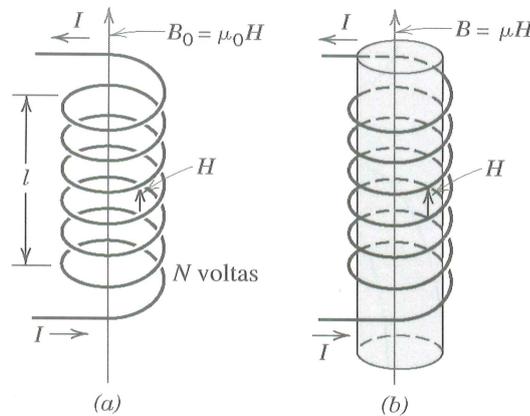
A indução magnética (ou densidade de fluxo magnético), representada por B , é a magnitude da força do campo interno no interior de uma determinada substância que esteja sujeita a um campo H [8], conforme podemos ver na Figura 2b. Podemos considerar que a indução magnética é uma intensificação do campo magnético externo, pois ela é a soma do campo interno aplicado e do campo magnético fora do solenoide [9].

A intensidade do campo magnético e a densidade do fluxo magnético estão relacionadas da seguinte maneira:

$$B = \mu H, \quad (2.2)$$

onde μ é a permeabilidade. Isto é, uma propriedade do meio específico no qual H passa e

Figura 2 – Representação esquemática do campo magnético gerado por uma bobina cilíndrica



Fonte: [6].

B é medido [8]. No vácuo (veja a Figura 2a) esta relação é dada por:

$$B_0 = \mu_0 H. \quad (2.3)$$

Os parâmetros μ_0 e B_0 representam a permeabilidade do vácuo e densidade do fluxo no vácuo, respectivamente. Podemos utilizar a razão entre a permeabilidade em um material e a permeabilidade no vácuo para descrever as propriedades magnéticas dos sólidos [8]. Essa grandeza adimensional, capaz de definir a permeabilidade magnética, é comumente chamada de permeabilidade relativa. Podemos defini-la por meio da seguinte razão:

$$\mu_r = \frac{\mu}{\mu_0}. \quad (2.4)$$

Este parâmetro mede a intensidade do campo magnético induzido. Os materiais magnéticos que se magnetizam facilmente possuem permeabilidades magnéticas consideravelmente altas [9].

O momento magnético induzido por causa da substância presente no interior do solenoide é chamado de intensidade de magnetização, ou simplesmente de magnetização [9]. Essa grandeza magnética é representada pelo símbolo M e é definida pela expressão:

$$B = \mu_0 H + \mu_0 M = \mu_0 (H + M). \quad (2.5)$$

Na presença de um campo H , os momentos magnéticos presentes no interior de um material paramagnético tendem a se alinhar na direção do campo e reforçá-lo. Isso

ocorre porque a força do campo exerce um torque capaz de provocar essa reorientação [8]. Em função disso, a magnetização de um material magnético é proporcional ao campo aplicado através de um fator adimensional, chamado susceptibilidade magnética [8, 9]. O material diamagnético se orienta no sentido oposto ao campo. Respostas magnéticas fracas de materiais são regularmente medidas por meio deste fator de proporcionalidade [9], definido da seguinte forma:

$$\chi_m H = M. \quad (2.6)$$

As explicações sobre o campo magnético produzido por um solenoide nos dá uma ideia sobre como os materiais exibem propriedades magnéticas. Porém, para uma compreensão mais ampla, é necessário recorrer a dois fenômenos da Mecânica Quântica: o *spin* [10, 11] e o princípio de exclusão de Pauli [12, 13]. O *spin* do elétron (comumente chamado de momento magnético do elétron) é uma característica intrínseca desta partícula. Ou seja, o momento angular intrínseco do elétron. Já o princípio de exclusão de Pauli estabelece que duas partículas elementares de *spin* semi-inteiro, como o elétron, não podem ocupar o mesmo estado quântico (estado de energia) simultaneamente, dando origem à interação de troca. Não é objetivo deste trabalho discutir a respeito dessas duas propriedades da Mecânica Quântica, mas sim sobre a interação das propriedades magnéticas dos materiais em relação à temperatura e ao campo magnético externo.

2.2 Tipos de magnetismo

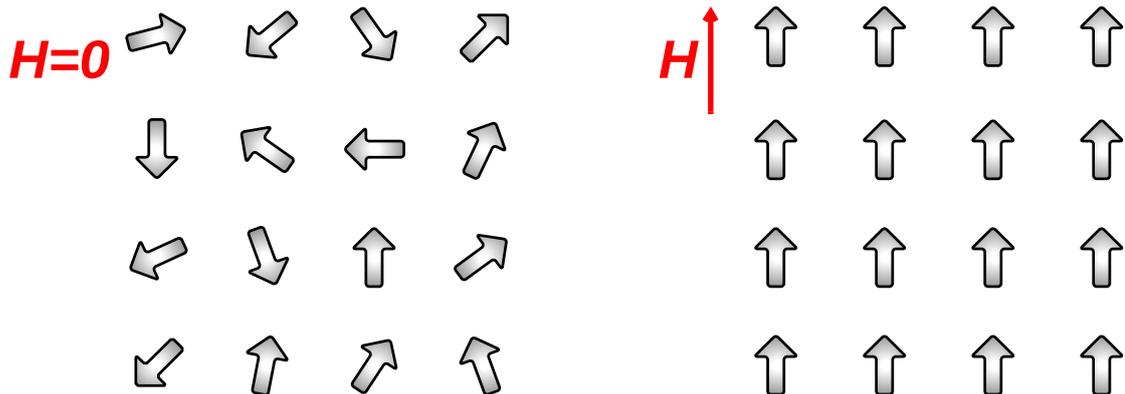
Os materiais podem exibir os seguintes tipos de magnetismo: diamagnetismo, paramagnetismo, ferromagnetismo, antiferromagnetismo e ferrimagnetismo. Cada um desses comportamentos magnéticos depende da resposta do elétron e dos dipolos atômicos magnéticos na presença de um campo magnético externo [8]. Todavia, serão apresentados apenas conceitos relevantes sobre dois comportamentos magnéticos discutidos neste trabalho: o ferromagnetismo e o paramagnetismo.

2.2.1 Paramagnetismo

Em alguns materiais, cada átomo ou molécula apresenta um momento de dipolo permanente resultante de um cancelamento incompleto dos momentos magnéticos de *spin* e/ou orbital do elétron [2, 8]. Quando não há a atuação de um campo magnético externo, as orientações dos momentos magnéticos são aleatórias. Além disso, estes dipolos atômicos estão livres para girar, conseqüentemente não apresentam magnetização macroscópica global [8].

O paramagnetismo surge quando as orientações randômicas dos momentos de dipolo atômico se alinham, preferencialmente através de rotação, com um campo externo [4, 8]. A Figura 3 ilustra este comportamento. Se o campo magnético aplicado for removido, este efeito nos materiais desaparece [9].

Figura 3 – Configuração do dipolo atômico de um material paramagnético com e sem campo aplicado



Fonte: elaborado pelo autor.

Estes dipolos magnéticos não exercem nenhuma interação mútua com os dipolos adjacentes.

Por estarem alinhados com o campo externo, estes dipolos magnéticos tendem a aumentá-lo [2, 8]. Consequentemente, há uma pequena susceptibilidade magnética positiva (na faixa de 10^{-6} e 10^{-2}) [8, 9].

2.2.2 Ferromagnetismo

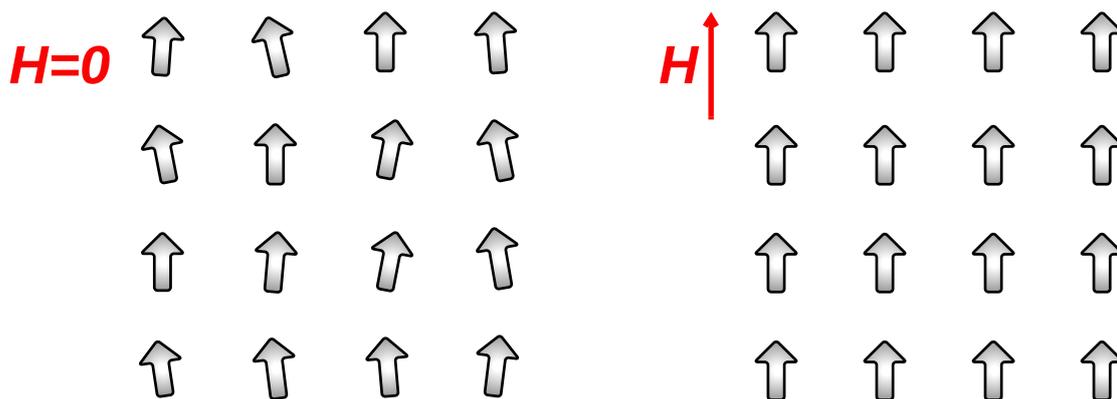
Entre todos os tipos de efeitos magnéticos, o ferromagnetismo é o de maior importância na engenharia porque apresenta magnetização muito grande e permanente [8, 9]. Como este trabalho realiza um estudo voltado para este tipo de material, serão apresentados, a seguir, informações mais detalhadas sobre este efeito magnético.

Do ponto de vista industrial, os elementos ferromagnéticos mais importantes são: o ferro (*Fe*), o cobalto (*Co*) e o níquel (*Ni*). Alguns metais terras-raras, como o gadolínio (*Gd*), também apresentam o efeito ferromagnético [8, 9].

As substâncias ferromagnéticas possuem átomos com momentos magnéticos de *spin* que tendem a se alinhar paralelamente na ausência (veja a Figura 4) ou na presença de um campo magnético externo (fraco ou forte) [3, 8, 9]. Mesmo após a remoção do campo externo, o material ferromagnético permanece magnetizado por causa do alinhamento

permanente dos momentos magnéticos gerado por um forte acoplamento entre átomos vizinhos. A Mecânica Quântica defende que a origem das forças que impulsionam este acoplamento ocorre na estrutura eletrônica do metal [3, 8].

Figura 4 – Representação esquemática do alinhamento mútuo de dipolos atômicos para um material ferromagnético (igual na ausência e na presença do campo magnético externo)



Fonte: elaborado pelo autor.

A interação de troca entre os elétrons de uma camada incompleta de um átomo ou entre elétrons de átomos vizinhos é capaz de produzir energia [4]. Porém, o alinhamento dos dipolos atômicos é fundamental na magnitude desta grandeza. Se os *spins* estiverem apontando no mesmo sentido haverá uma energia menor do que se estiverem apontando em sentidos opostos (fenômeno chamado de magnetização espontânea) [4].

2.3 Modelos de *spins*

A simulação computacional é uma ferramenta capaz de estudar sistemas complexos, aferindo algumas hipóteses do comportamento ou predizendo o desempenho destes sob novas condições [14]. Porém, para simular um sistema real necessitamos de um modelo que represente matematicamente o seu comportamento [7]. Para simular uma rede cristalina com os *spins* de um sistema magnético e estudar o fenômeno físico da transição de fase, podemos usar os modelos matemáticos de *spins*.

Os modelos de *spins* realizam uma modelagem teórica da dinâmica de *spins* em uma rede cristalina, seja ela cúbica, quadrada, triangular ou de outro tipo. Estes modelos são representados por Hamiltonianos efetivos de *spins* que simulam o comportamento de um determinado sítio em relação aos seus vizinhos mais próximos, e vice-versa. Entre todos os modelos existentes na literatura, acredita-se que o mais relevante seja o modelo

de Ising 2D, pois é a referência para o estudo inicial dos fenômenos críticos e transições de fase. No Capítulo 3 explicamos os conceitos relevantes a respeito de transição de fase e criticalidade.

2.3.1 Modelo de Ising 2D

O modelo de Ising 2D foi proposto inicialmente por Wilhelm Lenz, em 1920, com o propósito de investigar os fenômenos magnéticos de alguns materiais [15]. Em 1925, Ernst Ising, então aluno de doutorado orientado por Lenz, resolveu este modelo para um sistema unidimensional e percebeu que, neste caso, o modelo não apresenta transição de fase para uma determinada temperatura finita [16]. Porém, em 1944 Lars Onsager solucionou este modelo para um sistema bidimensional [17] e confirmou a teoria, levantada por Lenz, que existe uma transição de fase de segunda ordem em sistemas com dimensões maiores que 1D. A temperatura crítica (ou temperatura de Curie) encontrada por Onsager foi [17]:

$$T_c = \frac{2}{\ln\{1 + \sqrt{2}\}} \cong 2,2691853143. \quad (2.7)$$

O modelo de Ising 2D é representado pelo seguinte Hamiltoniano [18]:

$$\mathcal{H}_I = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - H \sum_{i=1}^N S_i, \quad (2.8)$$

onde o termo $\langle i,j \rangle$ indica a interação entre sítios vizinhos, J é o termo de troca entre primeiros vizinhos e H é o campo magnético externo. Enquanto a primeira soma é feita sobre os pares de primeiros vizinhos, o segundo somatório é realizado sobre os N spins existentes na rede cristalina. Logo, na rede quadrada, N equivale ao quadrado da dimensão linear do sistema ($N = L \times L$).

No modelo de Ising bidimensional, os spins podem assumir apenas dois estados possíveis: $S_i = +1$ (seta para cima) ou $S_i = -1$ (seta para baixo). A energia do sistema é descrita pela Equação 2.8. Já a magnetização corresponde a soma dos N spins da rede:

$$M = \sum_{i=1}^N S_i. \quad (2.9)$$

Neste trabalho estudamos uma generalização do modelo de Ising, chamado de modelo de *clock* de p -estados. Tal generalização se deve ao fato de que para $p = 2$ conseguimos recuperar e estudar o modelo de Ising. Mas antes de explicar este modelo de spins, iremos discutir a respeito do termo de troca J (ou integral de troca), que representa a energia de interação entre primeiros vizinhos.

2.3.2 Termo de troca

O termo de troca descreve a interação entre dois elétrons cujas funções de onda se sobrepõem. A origem desse termo está na equação de Schrödinger para o potencial de Coulomb [11], junto com o requerimento de assimetria imposto pelo princípio de exclusão de Pauli [19]. Como a função de onda total deve ser anti-simétrica, haverá um acoplamento entre as funções espaciais e de *spins* dos elétrons interagentes. Isto é, se as funções espaciais forem anti-simétricas as de *spins* serão simétricas, e vice e versa.

Quando temos átomos isolados na rede cristalina do material, podemos desprezar mudanças nas funções de onda referentes a esses átomos; e tais funções apresentam um decaimento acentuado. Em função disso, a sobreposição é desprezível para átomos além dos primeiros vizinhos.

A interação de troca será escrita através da combinação linear das funções de onda espaciais dos átomos isolados. Se J é positivo, a função de onda espacial total será anti-simétrica. Dessa forma, os spins paralelos minimizarão esse termo de energia. Essa é a causa primária do ferromagnetismo. No caso de J negativo, os spins antiparalelos minimizarão esse termo de energia, portanto, teremos um antiferromagneto. Porém, se $J = 0$ não há interação entre os *spins* dos elétrons.

Como este trabalho estuda um sistema ferromagnético bidimensional, então consideramos $J > 0$. Decidiu-se utilizar $J = 1$ porque este valor não exerce uma mudança matemática no Hamiltoniano, além de favorecer menores valores de energia por *spin*. Neste trabalho, a temperatura T é medida em unidades de $J|\vec{\sigma}|^2/k_B$ e a energia é medida em unidades de $J|\vec{\sigma}|^2$. Logo, k_B é a constante de Boltzmann e $|\vec{\sigma}|$ representa o módulo do *spin*. Como usamos medidas de temperatura em unidades de energia, então consideramos $k_B = 1$.

2.3.3 Modelo de *clock* de p -estados 2D

A ideia inicial do modelo de *clock* de p -estados 2D foi proposta, no início da década de 1950, por Cyrill Domb [20]. Logo, o objetivo deste modelo é que o *spin* tenha p estados possíveis na rede cristalina, ao invés de apenas dois como ocorre no modelo de Ising bidimensional. Porém, os *spins* são alocados na rede cristalina com p direções simétricas definidas pela seguinte relação de ângulo:

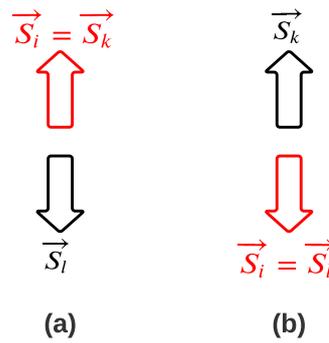
$$\theta_n = \frac{2\pi n}{p}, \quad (2.10)$$

onde $n = 0, 1, 2, \dots, p-1$ [21, 22, 23, 24, 25, 26, 27, 28, 29, 30].

Se $p = 2$, o modelo de *clock* 2D possui dois estados possíveis, com orientações

paralela e antiparalela [28, 31]. Isto é, o modelo se comporta da mesma forma que o modelo de Ising 2D [23, 26, 27, 28, 29, 31, 32, 33]. O ângulo formado por dois *spins* pode ser $\theta_i = 0$, se tiverem os mesmos estados, e $\theta_i = \pi$, se possuírem estados distintos (veja a Figura 5). Desse modo, a contribuição na energia vai ser -1 (mesmos estados) ou $+1$ (estados opostos) [34].

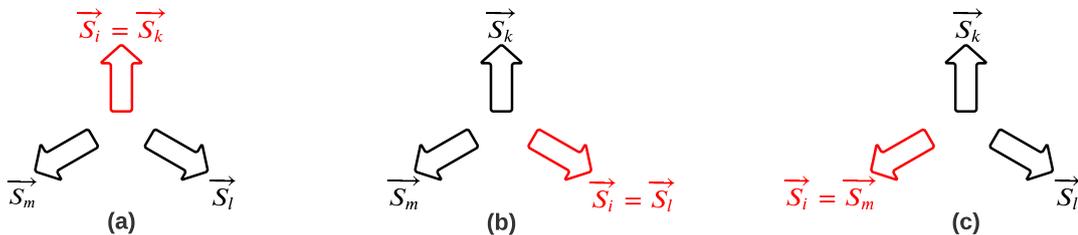
Figura 5 – Modelo de *clock* para $p = 2$ (as setas em vermelho indicam os estados possíveis que o *spin* pode assumir)



Fonte: elaborado pelo autor.

Se $p = 3$, o modelo de *clock* bidimensional equivale ao modelo de Potts 2D [35] com três estados possíveis [23, 28, 33, 36]. Neste caso, os *spins* possuem três direções diferentes, porém com o mesmo ângulo (equivalente a $\theta_i = 2\pi/3$) entre pares de *spins*, conforme ilustra a Figura 6.

Figura 6 – Modelo de *clock* para $p = 3$ (as setas em vermelho indicam os estados possíveis que o *spin* pode assumir)

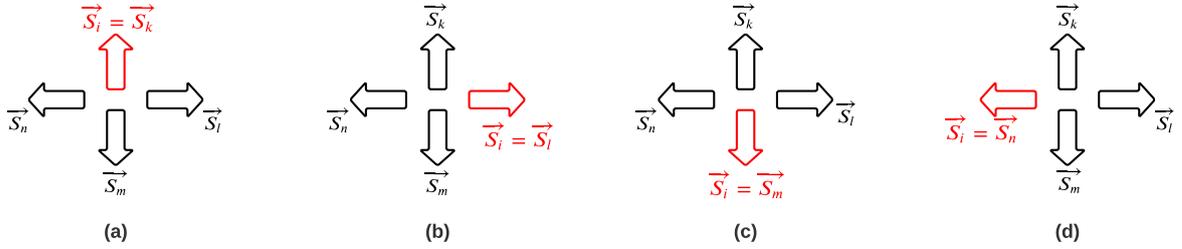


Fonte: elaborado pelo autor a partir de [34].

Para $p = 4$, o modelo de *clock* de duas dimensões apresenta quatro estados possíveis, conforme ilustra a Figura 7. O ângulo entre dois *spins* vizinhos pode ser: $\theta_i = 0, \pi/2, \pi$ e $3\pi/2$. Se um sítio i está localizado na vertical, não há contribuição para a energia por parte dos vizinhos que estão na horizontal. A contribuição na energia também é nula no

caso contrário. Sendo assim, é correto afirmar que para $p = 4$ o modelo de *clock* apresenta apenas três estados com energias $+1$, 0 e -1 para cada par de *spins* [34].

Figura 7 – Modelo de *clock* para $p = 4$ (as setas em vermelho indicam os estados possíveis que o *spin* pode assumir)



Fonte: elaborado pelo autor a partir de [34].

Como não há contribuição da energia para estados perpendiculares, é viável analisar separadamente as direções horizontal e vertical. Na direção vertical (Figuras 7a e 7c) os spins podem ocupar um estado $+1$ ou um estado -1 . O mesmo acontece na direção horizontal (Figuras 7b e 7d) [34]; por este motivo é correto afirmar que para $p = 4$ o modelo de *clock* apresenta a universalidade do modelo de Ising 2D, uma vez que equivale a dois modelos de Ising 2D desacoplados [26, 37]. Ainda não há solução exata quando $p > 4$ [28]; porém se $p \rightarrow \infty$, o modelo de *clock* bidimensional é equivalente ao modelo XY clássico 2D [23, 26, 27, 29, 30, 31, 32, 1].

A distribuição dos *spins* do modelo de *clock* 2D, quando $p \rightarrow \infty$, é igual a configuração apresentada pelo modelo XY clássico bidimensional. Em função disso, usamos a ilustração (veja Figura 8) de uma rede quadrada do modelo XY clássico para explicar o Hamiltoniano do modelo de *clock* de duas dimensões.

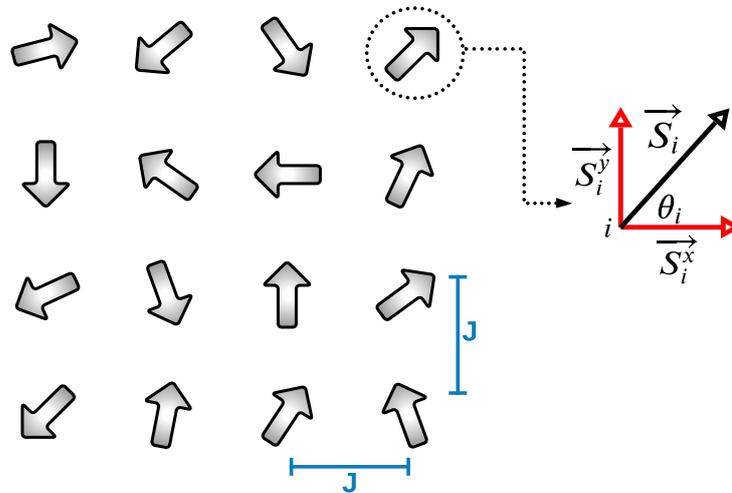
A Figura 8 indica que cada *spin* do modelo de *clock* 2D é um vetor de duas componentes, que está localizado em cada sítio da rede cristalina [38]. Consideramos a seguinte relação para o *spin* de um determinado sítio i , cuja posição é medida em unidades de parâmetro de rede (a):

$$|\vec{S}_i| = \sqrt{(S_i^x)^2 + (S_i^y)^2} = 1. \quad (2.11)$$

Logo [38]:

$$S_i^x = |\vec{S}_i| \cos(\theta_i) = \cos(\theta_i) \quad (2.12)$$

Figura 8 – Modelo XY clássico bidimensional



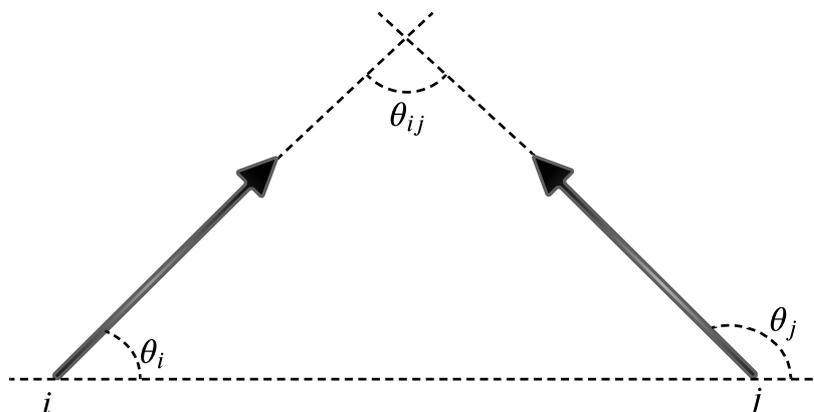
Fonte: elaborado pelo autor a partir de [38].

e

$$S_i^y = |\vec{S}_i| \sin(\theta_i) = \sin(\theta_i). \quad (2.13)$$

A interação entre dois *spins* vizinhos mais próximos depende do ângulo entre essas direções [39], conforme ilustra a Figura 9.

Figura 9 – Representação dos spins por vetores confinados num plano



Fonte: elaborado pelo autor a partir de [39].

O ângulo entre os *spins* de sítios i e j pode ser expresso da seguinte forma [39]:

$$\theta_{ij} = \theta_j - \theta_i. \quad (2.14)$$

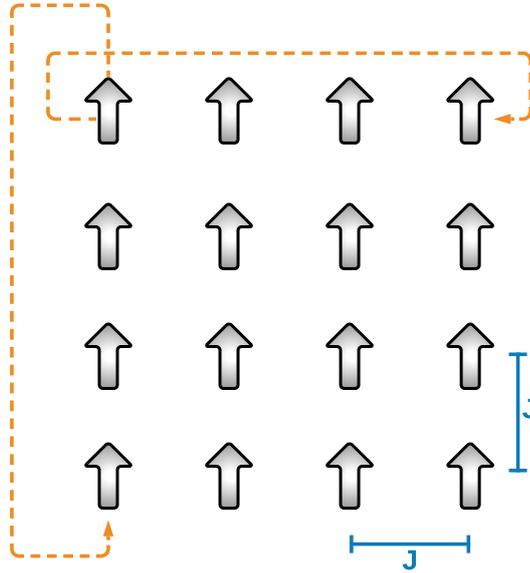
O $\cos(\theta_{ij})$ pode ser determinado por meio do produto escalar entre os vetores $|\vec{S}_i\rangle$ e $|\vec{S}_j\rangle$. Logo, podemos definir o Hamiltoniano do modelo de *clock* 2D como [25, 26, 40, 41]:

$$\mathcal{H}_C = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \cos(\theta_j - \theta_i) - H \sum_{i=1}^N \cos(\theta_i), \quad (2.15)$$

onde $\theta_i \in [0, 2\pi]$ [33], $\langle i,j \rangle$ representa a interação entre sítios vizinhos, J é a constante de troca e H é o campo magnético aplicado. A primeira soma é sobre os pares de primeiros de vizinhos. Já o segundo somatório é referente a todos os sítios da rede, no qual os ângulos θ_i são contínuos [31].

Neste trabalho consideramos condições de contorno periódicas. A Figura 10 ilustra a dinâmica deste recurso sobre os *spins* presentes nas bordas de uma rede quadrada.

Figura 10 – Rede quadrada com condições de contorno periódicas



Fonte: elaborado pelo autor.

Se considerarmos a rede cristalina da Figura 10 como uma matriz $A_{4 \times 4}$, os vizinhos mais próximos do *spin* do sítio a_{11} seriam os elementos: a_{14} (esquerda), a_{12} (direita), a_{41} (cima) e a_{21} (baixo). Além disso, se sabemos como o *spin* do sistema magnético estudado se comporta diante da atuação de um campo magnético externo, podemos definir o sinal da grandeza H da Equação 2.15 da seguinte forma:

- $H > 0$, caso o *spin* deseje se alinhar na direção positiva;
- $H < 0$, caso o *spin* deseje se alinhar na direção negativa;
- $H = 0$, caso não exista influência externa sobre a rotação do *spin*.

Como este trabalho não leva em conta a presença de um campo magnético externo em um sistema ferromagnético 2D, então consideramos $H = 0$. Logo, usamos a seguinte redefinição do Hamiltoniano da Equação 2.15 para obter a energia do sistema a campo nulo [22, 23, 24, 27, 28, 29, 31, 32, 33, 42]:

$$\mathcal{H}_C = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \cos(\theta_j - \theta_i). \quad (2.16)$$

A magnetização de um determinado sítio i também é um vetor de duas componentes [25, 30, 31, 41, 42, 43, 44, 45], em função disso pode ser obtida por meio da seguinte relação:

$$M = \left[\sum_{i=1}^N \cos(\theta_i), \sum_{i=1}^N \sin(\theta_i) \right]. \quad (2.17)$$

O Teorema de Mermin-Wagner [1] indica que o modelo de *clock* 2D (para $p \rightarrow \infty$) não apresenta quebra espontânea de simetria em temperatura finita, pois possui interações de curto alcance. Logo, como não se observa uma ordem de longo alcance, então não há uma transição do tipo ordem-desordem em uma temperatura diferente de zero. Porém, este sistema apresenta uma fase quase-ordenada a baixa temperatura, e então a função de correlação do sistema apresenta um decaimento por lei de potência. A alta temperatura, a função de correlação apresenta um decaimento exponencial, indicando a presença de uma fase desordenada. Essa mudança de comportamento da função de correlação caracteriza uma transição de fase do tipo Berezinskii-Kosterlitz-Thouless (BKT) [46, 47] a temperatura finita. Discutiremos sobre a função de correlação e a respeito da transição BKT no Capítulo 3.

O modelo de *clock* 2D de p -estados apresenta uma fase ferromagnética a baixa temperatura, uma fase paramagnética a alta temperatura e uma fase BKT (com ordem de quase longo alcance) entre essas duas, para a maioria dos valores intermediários de p [22, 29, 43, 48, 49, 50, 51]. É certo que para $p=2$ o modelo de *clock* 2D apresenta uma transição de fase contínua (na classe de universalidade Ising). Contudo, não há uma certeza de qual valor intermediário de p apresenta primeiro duas transições de fase em temperaturas distintas e finitas. Isso é um desafio ao estudar o modelo de *clock* 2D de p -estados. A simulação computacional desenvolvida neste trabalho não só indica este valor

intermediário de p , como também informa as fases apresentadas por cada valor de p do modelo de *clock* 2D e as respectivas temperaturas críticas.

No Capítulo 3 também apresentamos uma discussão a respeito dos fenômenos críticos que ocorrem nas proximidades da temperatura crítica, a fim de entender o porquê os *spins*, em estado de equilíbrio, apresentam grandes flutuações nesta região. Sendo assim, é importante deixar claro que este trabalho estuda o sistema em equilíbrio termodinâmico. A técnica de caracterização das fases do modelo de *clock* 2D de p -estados deste trabalho, utiliza os zeros da função de partição e conceitos do método de Monte Carlo. No Capítulo 4 explicamos a respeito dos zeros reduzidos obtidos através da função de partição e também sobre o método de Monte Carlo.

3 Transição de fase

A energia vibracional dos átomos, em torno de suas posições de equilíbrio, e a energia cinética dos elétrons livres são os principais tipos de energia térmica em um sólido [7]. Se houver gradientes de temperatura no material, a energia pode ser direcionada para regiões mais frias e fundir a amostra. Em função disso, a capacidade, a expansão e a condutividade térmicas são propriedades que devem ser levadas em consideração para a utilização prática de um sólido [8]. A capacidade térmica C (ou capacidade calorífica) é uma propriedade capaz de apontar a aptidão da amostra em absorver calor do meio externo, ou seja, representa a quantidade de energia necessária para que haja um aumento na temperatura. Geralmente, o calor específico (representado pela letra c minúscula) é a grandeza que representa a capacidade calorífica por unidade de massa [7, 8].

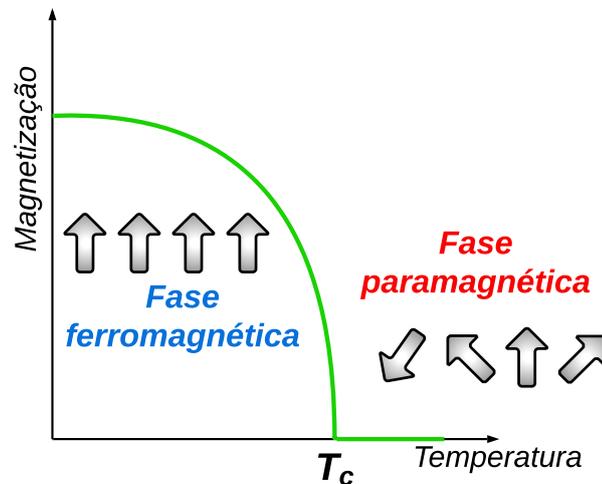
Na maioria dos materiais (especialmente, nos ferromagnetos), a principal forma de assimilação de energia térmica se dá através do aumento da energia vibracional dos átomos. Os átomos estão sempre vibrando com frequências muito altas e com baixas amplitudes. Entretanto, não vibram independentemente uns dos outros, mas sim acoplados aos seus vizinhos por meio das ligações atômicas. Essas vibrações produzem ondas, com uma variedade de distribuições e frequências, que se propagam pela rede cristalina do material produzindo energia térmica [7, 8].

Quando os elétrons são excitados e mudam de estados preenchidos para estados vazios acima da energia de Fermi, recebem o nome de elétrons livres. As ondas vibracionais provocam um espalhamento térmico desses elétrons livres durante a condução eletrônica. Logo, esses elétrons absorvem energia aumentando a energia cinética, e conseqüentemente exercem uma pequena contribuição para o aumento da capacidade calorífica. Todavia, essa contribuição eletrônica só é significante em temperaturas próximas de 0 K [7, 8].

Os materiais ferromagnéticos apresentam outro processo de absorção de energia, quando aquecidos acima da temperatura de transição. Acima de T_c os *spins* dos elétrons tomam direções aleatórias por causa de um maior movimento térmico dos átomos. Em função disso, a capacidade calorífica apresenta um pico na temperatura onde ocorre essa transformação dos momentos magnéticos atômicos. Além disso, conforme a temperatura aumenta, a magnetização reduz gradualmente e, em seguida, cai para zero nestes materiais (veja a Figura 11) [8].

Na temperatura de transição, o ferromagnetismo do material desaparece completamente e este se torna paramagnético [9]; o ímã serve como exemplo para este processo, pois perde a imantação acima desta temperatura [15]. Isso ocorre porque as forças mútuas de acoplamento de *spins* são completamente destruídas [8]. No entanto, se a amostra for

Figura 11 – Efeito da temperatura sobre a magnetização de um material ferromagnético



Fonte: elaborado pelo autor.

resfriada, a partir de uma temperatura acima de T_c , os domínios ferromagnéticos são restaurados e o material volta a ser ferromagnético [9].

Percebe-se, então, que os materiais ferromagnéticos apresentam um comportamento de transição (ou mudança) de fase em uma temperatura específica (T_c). Este comportamento ocorre diariamente nos mais variados sistemas físicos [52, 53, 54, 55]. Além dos materiais magnéticos, destacam-se entre esses sistemas: ligas metálicas, materiais ferroelétricos, superfluidos, supercondutores e cristais líquidos [15, 53].

A análise sobre transições de fase e fenômenos críticos envolve muitos conceitos termodinâmicos específicos. Pensando nisso, recordaremos a seguir alguns destes conceitos que são relevantes para este trabalho. Logo em seguida serão apresentadas discussões a respeito da definição e caracterização de transição de fase, mas também sobre o comportamento do sistema na região onde ocorre este fenômeno físico.

3.1 Conceitos termodinâmicos

A termodinâmica clássica, através de uma formulação axiomática, é constituída de quatro postulados [56, 53]. No primeiro postulado são definidos os estados de equilíbrio dos sistemas simples¹ que, em uma escala macroscópica, são totalmente caracterizados por U e por parâmetros extensivos (parâmetros que dependem da escala do sistema, como: V , $\{N\}$ e M) [57]. U é a energia interna, V é o volume, M é a magnetização e $\{N\}$ é o

¹ **Sistemas simples** são sistemas macroscopicamente homogêneos, isotrópicos, descarregados, quimicamente inertes e suficientemente grandes. Um fluido puro, por exemplo, pode ser considerado um sistema simples com um único componente e na ausência de um campo externo [53].

número de mols de todos os elementos químicos, ou seja, $\{N\} = N_1, \dots, N_r$. Já o segundo postulado define a entropia S do sistema como uma função dos parâmetros extensivos do sistema simples:

$$S = S(U, V, M, \{N\}). \quad (3.1)$$

Além disso, esse axioma afirma que, quando não há vínculos internos, os parâmetros extensivos assumem valores que maximizam a entropia sobre quaisquer estados de equilíbrio possíveis.

No terceiro postulado a entropia de um sistema composto² é aditiva entre os subsistemas:

$$S(U_1, V_1, M_1, N_1; U_2, V_2, M_2, N_2) = S_1(U_1, V_1, M_1, N_1) + S_2(U_2, V_2, M_2, N_2). \quad (3.2)$$

A entropia de um sistema simples é uma função homogênea de primeira ordem dos parâmetros extensivos. Por este motivo, se todos estes parâmetros forem multiplicados por uma determinada constante λ , a entropia também é multiplicada por λ ; conforme demonstra a seguinte notação matemática [53, 58]:

$$S = S(\lambda U, \lambda V, \lambda M, \lambda \{N\}) = \lambda S(U, V, M, \{N\}). \quad (3.3)$$

A entropia é uma função contínua, diferenciável e monótona³ crescente com a energia:

$$\left(\frac{\partial S}{\partial U} \right)_{V, M, \{N\}} > 0. \quad (3.4)$$

Além disso, a entropia pode ser invertida em relação a energia interna. Logo, a equação 3.1 pode ser reescrita da seguinte forma:

$$U = U(S, V, M, \{N\}). \quad (3.5)$$

² **Sistemas compostos** são aqueles constituídos por um conjunto de sistemas simples, separados por paredes ou por vínculos [53].

³ **Função monótona** (ou monotônica) é uma função entre dois conjuntos ordenados que preserva (ou inverte) a relação de ordem. A função monótona pode ser crescente, quando preserva a relação, ou decrescente, quando inverte a relação.

O postulado de número quatro estabelece que a entropia de qualquer sistema é anulada num estado para o qual [53]

$$\left(\frac{\partial U}{\partial S}\right)_{V,M,\{N\}} = 0. \quad (3.6)$$

3.1.1 Formulação da energia interna

Derivando a relação da Equação 3.5, considerando a energia interna como a variável dependente, temos:

$$dU = \left(\frac{\partial U}{\partial S}\right)_{V,M,\{N\}} dS + \left(\frac{\partial U}{\partial V}\right)_{S,M,\{N\}} dV + \left(\frac{\partial U}{\partial M}\right)_{S,V,\{N\}} dM + \sum_{i=1}^r \left(\frac{\partial U}{\partial N_i}\right)_{S,V,M,\dots,N_r} dN_i \quad (3.7)$$

As derivadas parciais da Equação 3.7 são chamadas de parâmetros intensivos [53], ou seja, parâmetros que não dependem da escala do sistema, como por exemplo: temperatura T , pressão P , campo magnético H e potencial químico do elemento químico i (μ_i) [57]. Em função disso, podemos estabelecer as seguintes notações:

$$\left(\frac{\partial U}{\partial S}\right)_{V,M,\{N\}} = T, \quad (3.8)$$

$$\left(\frac{\partial U}{\partial V}\right)_{S,M,\{N\}} = -P, \quad (3.9)$$

$$\left(\frac{\partial U}{\partial M}\right)_{S,V,\{N\}} = H \quad (3.10)$$

e

$$\left(\frac{\partial U}{\partial N_i}\right)_{S,V,M,\dots,N_r} = \mu_i. \quad (3.11)$$

Como os parâmetros intensivos são derivadas de uma função, então podemos representá-los como funções com as mesmas variáveis independentes [57]. Logo, as Equações 3.8 a 3.11 podem ser reescritas da seguinte forma:

$$T = T(S, V, M, \{N\}), \quad (3.12)$$

$$P = P(S, V, M, \{N\}), \quad (3.13)$$

$$H = H(S, V, M, \{N\}) \quad (3.14)$$

e

$$\mu_i = \mu_i(S, V, M, \{N\}). \quad (3.15)$$

Essas relações são chamadas de equações de estado [53], pois expressam os parâmetros intensivos em função dos parâmetros extensivos [57]. Podemos, então, reescrever a notação da Equação 3.7 como:

$$dU = TdS - PdV + HdM + \sum_{i=1}^r \mu_i dN_i, \quad (3.16)$$

onde

$$dQ = TdS \quad (3.17)$$

representa a diferencial inexata do calor quase-estático que pode ser transformada em uma diferencial exata dS , graças ao fator integrante $1/T$. Além disso, HdM é o trabalho magnético realizado sobre o sistema, isto é, $dW_{mag} = HdM$ [58].

3.1.2 Formulação da entropia

Na relação da Equação 3.1 a variável dependente é S . Se derivarmos essa relação, encontramos:

$$dS = \left(\frac{\partial S}{\partial U} \right)_{V, M, \{N\}} dU + \left(\frac{\partial S}{\partial V} \right)_{U, M, \{N\}} dV + \left(\frac{\partial S}{\partial M} \right)_{U, V, \{N\}} dM + \sum_{i=1}^r \left(\frac{\partial S}{\partial N_i} \right)_{U, V, M, \dots, N_r} dN_i. \quad (3.18)$$

As derivadas parciais apresentadas na Equação 3.18 também são parâmetros intensivos. Utilizando as definições dos parâmetros intensivos na formulação da energia interna (Equações 3.8 a 3.11), podemos estabelecer que

$$\left(\frac{\partial S}{\partial U} \right)_{V, M, \{N\}} = \left(\frac{\partial U}{\partial S} \right)_{V, M, \{N\}}^{-1} = \frac{1}{T}. \quad (3.19)$$

Se

$$\left(\frac{\partial x}{\partial y}\right)_z = -\left(\frac{\partial x}{\partial z}\right)_y \left(\frac{\partial z}{\partial y}\right)_x, \quad (3.20)$$

então podemos estabelecer que

$$\left(\frac{\partial S}{\partial V}\right)_{U,M,\{N\}} = -\left(\frac{\partial S}{\partial U}\right)_{V,M,\{N\}} \left(\frac{\partial U}{\partial V}\right)_{S,M,\{N\}}. \quad (3.21)$$

A partir dos resultados das Equações 3.9 e 3.19, podemos definir

$$\left(\frac{\partial S}{\partial V}\right)_{U,M,\{N\}} = \frac{P}{T}. \quad (3.22)$$

A partir da mesma ideia podemos encontrar

$$\left(\frac{\partial S}{\partial M}\right)_{U,V,\{N\}} = -\left(\frac{\partial S}{\partial U}\right)_{V,M,\{N\}} \left(\frac{\partial U}{\partial M}\right)_{U,V,\{N\}} = -\frac{H}{T} \quad (3.23)$$

e

$$\left(\frac{\partial S}{\partial N_i}\right)_{U,V,M,\dots,N_r} = -\left(\frac{\partial S}{\partial U}\right)_{V,M,\{N\}} \left(\frac{\partial U}{\partial N_i}\right)_{S,V,M,\dots,N_r} = -\frac{\mu_i}{T}. \quad (3.24)$$

Logo, a Equação 3.18 pode ser reescrita da seguinte forma:

$$dS = \frac{1}{T}dU + \frac{P}{T}dV - \frac{H}{T}dM - \frac{1}{T}\sum_{i=1}^r \mu_i dN_i. \quad (3.25)$$

3.1.3 Potencial de Helmholtz

A transformada de Legendre favorece a troca da variável independente S por T na função da energia interna U . Em função disso, a energia livre de Helmholtz magnética $F(T, M, \{N\})$ e a energia livre de Gibbs magnética $G(T, H, \{N\})$ podem ser definidas como [58]:

$$F = \min_S(U - TS); \quad (3.26)$$

$$G = \min_M(F - HM). \quad (3.27)$$

Se derivarmos a Equação 3.26, encontramos:

$$dF = dU - SdT - TdS. \quad (3.28)$$

Substituindo a Equação 3.16 neste resultado, encontramos:

$$dF = -SdT - PdV + HdM + \sum_{i=1}^r \mu_i dN_i. \quad (3.29)$$

Logo, podemos descrever as seguintes relações:

$$\left(\frac{\partial F}{\partial T} \right)_{V,M,\{N\}} = -S, \quad (3.30)$$

$$\left(\frac{\partial F}{\partial V} \right)_{T,M,\{N\}} = -P, \quad (3.31)$$

$$\left(\frac{\partial F}{\partial M} \right)_{T,V,\{N\}} = H \quad (3.32)$$

e

$$\left(\frac{\partial F}{\partial N_i} \right)_{T,V,M,\dots,N_r} = \mu_i. \quad (3.33)$$

O calor específico mede o calor absorvido por um sistema, a um dado parâmetro extensivo fixo (como o volume, por exemplo), em resposta a uma temperatura. Porém, para sistemas magnéticos, o calor específico pode ser representado da seguinte forma (considerando a definição da Equação 3.17 e H constante)[58]:

$$c_H = \left(\frac{\partial Q}{\partial T} \right)_H = T \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_H. \quad (3.34)$$

Outra resposta importante de um sistema é a susceptibilidade magnética, pois mede a taxa de variação da magnetização em relação a variação do campo H . Podemos, então, representar essa medida da seguinte forma[58]:

$$\chi_T = \left(\frac{\partial M}{\partial H} \right)_T. \quad (3.35)$$

3.1.4 Energia livre de Gibbs magnética

A diferencial da Equação 3.27 é expressa por:

$$dG = dF - MdH - HdM. \quad (3.36)$$

Substituindo a Equação 3.29 neste resultado, podemos encontrar a seguinte definição:

$$dG = -SdT - PdV - MdH + \sum_{i=1}^r \mu_i dN_i. \quad (3.37)$$

Logo, podemos definir as relações:

$$\left(\frac{\partial G}{\partial T}\right)_{V,H,\{N\}} = -S, \quad (3.38)$$

$$\left(\frac{\partial G}{\partial V}\right)_{T,H,\{N\}} = -P, \quad (3.39)$$

$$\left(\frac{\partial G}{\partial H}\right)_{T,V,\{N\}} = -M \quad (3.40)$$

e

$$\left(\frac{\partial G}{\partial N_i}\right)_{T,V,H,\dots,N_r} = \mu_i. \quad (3.41)$$

Por meio da Equação 3.38, podemos definir [53]:

$$\frac{\partial^2 G}{\partial T^2} = -\left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_{V,H,\{N\}} = -\frac{1}{T}c_H. \quad (3.42)$$

Considerando H constante, podemos medir o calor absorvido pelo sistema, em resposta a uma dada temperatura, da seguinte forma [53]:

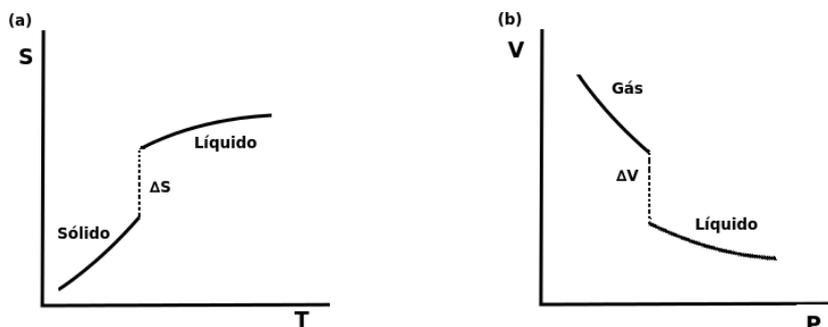
$$c_H = -T \left(\frac{\partial^2 G}{\partial T^2}\right)_H. \quad (3.43)$$

3.2 Fenômenos críticos

Como já foi adiantado, as transições de fase ocorrem por causa de mudanças bruscas e descontínuas nas propriedades termodinâmicas do sistema, provocadas por uma variação

contínua de algum parâmetro externo, como: temperatura, pressão, campo magnético aplicado, entre outros (veja as Figuras 12a e 12b) [15, 59, 60, 57]. As mudanças de estado físico da água (H_2O) são exemplos clássicos deste fenômeno [15, 55, 57]. Por exemplo, se aquecida a uma temperatura específica e com pressão constante, a água no estado líquido entra em ebulição e passa para a fase gasosa [15]. Portanto, o termo "fase" se refere a qualquer estado específico da matéria [61].

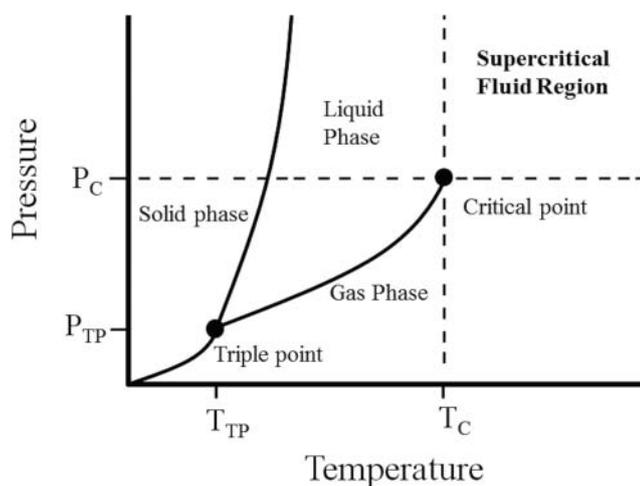
Figura 12 – Descontinuidades (a) da entropia e (b) do volume que caracterizam uma transição de fase de primeira ordem



Fonte: [62].

Uma ou mais transições de fase podem ser representadas pictoricamente através dos diagramas de fases (veja a Figura 13). Nesses diagramas, as regiões (fases) são divididas por curvas de coexistência. O calor cedido pelo sistema na linha de coexistência é chamado de calor latente [62].

Figura 13 – Diagrama de fase da água



Fonte: [63].

Percebe-se que há a presença de dois pontos relevantes na Figura 13 (triplo e crítico). No ponto triplo existe a coexistência de três fases; enquanto no ponto crítico ocorre uma transição contínua (ou crítica), onde o calor latente é igual a zero. A temperatura no ponto crítico é chamada de temperatura crítica.

O calor específico e a susceptibilidade magnética do material se intensificam ou mudam de forma descontínua em um determinado instante, indicando a presença de uma transição de fase de segunda ordem. Para analisar a região onde ocorre tal fenômeno, é necessário investigar como as grandezas físicas se comportam diante da variação dos parâmetros externos (especialmente a temperatura e o campo magnético).

Em 1873, Van der Waals conseguiu estabelecer uma análise do comportamento crítico em sistemas fluidos que possibilitou caracterizar a transição entre as fases líquida e gasosa [15, 53, 57]. Porém, as transições de fase dos materiais ferromagnéticos começaram a ser estudadas no início do século XX, por meio do modelo fenomenológico de Curie-Weiss para o ferromagneto uniaxial [53, 57].

Na década de 1930, Lev Landau conseguiu estabelecer o conceito de parâmetro de ordem, utilizando as teorias clássicas para a transição de fase [15, 53]. De acordo com ele, o parâmetro de ordem de um sistema é uma grandeza que na fase desordenada assume um valor nulo e na fase ordenada um valor não nulo. Identificar um parâmetro de ordem de um sistema não é muito simples porque esta grandeza pode ser: um escalar, um vetor, um tensor, um número real ou um número complexo [57, 64]. Todavia, nos sistemas ferromagnéticos esse parâmetro de ordem corresponde a magnetização espontânea por *spin*, uma vez que apresenta ambos os comportamentos acima e abaixo de T_c , respectivamente (veja a Figura 11) [15, 57].

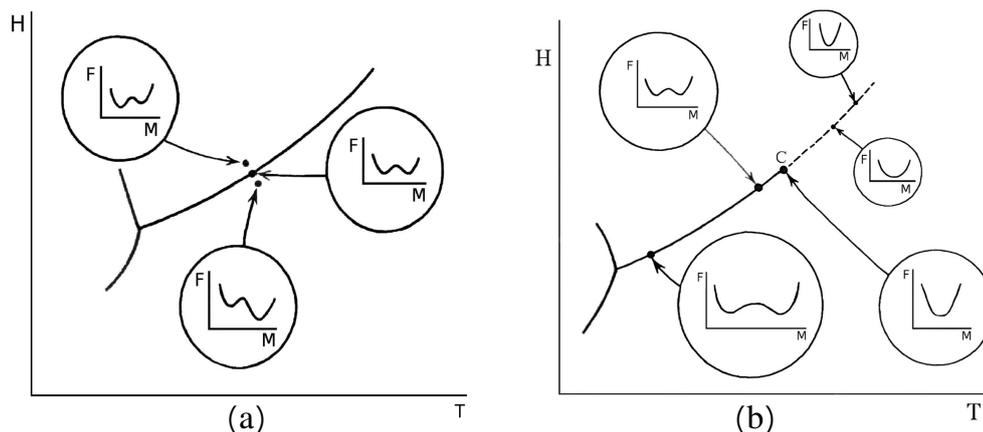
Em 1932, Ehrenfest constatou que as transições de fase podem ser classificadas como sendo de ordem n se a n -ésima derivada da energia livre for descontínua em relação ao parâmetro de ordem [15, 60, 57, 64, 65]. Atualmente, a teoria utilizada para classificar as transições de fase foi apresentada por Fisher em 1974 [15, 57, 66], após uma atualização dos conceitos propostos por Ehrenfest [64].

De acordo com Fisher, se a primeira derivada da energia livre é descontínua em relação ao parâmetro de ordem, então existe uma transição de primeira ordem. No entanto, se a primeira derivada da energia livre for contínua e a sua segunda derivada descontínua (ou infinita), temos uma transição de segunda ordem (também chamada de transição contínua ou crítica, ou desordenada) [60, 57, 67].

Utilizaremos as Figuras 14a e 14b para apresentar uma ideia mais intuitiva sobre o comportamento da energia livre em relação ao parâmetro de ordem. O potencial de Helmholtz apresenta dois mínimos sobre a curva de coexistência do diagrama de fases, um local que define o estado meta-estável e outro global. Quando dois mínimos são idênticos

(ou seja, se ambos são globais), os dois estados são estáveis e a coexistência entre as fases é de primeira ordem. Vemos isso no círculo superior à direita da Figura 14a. Esses dois mínimos começam a se coalescer e se unirão completamente em um determinado ponto (no ponto crítico). Neste ponto a transição é de segunda ordem, pois não há mais coexistência entre fases. Esse comportamento pode ser visto na Figura 14b. O ponto crítico é representado pelo ponto C .

Figura 14 – Comportamento da energia livre sobre a curva de coexistência



Fonte: [57].

3.2.1 Expoentes críticos

O objetivo do estudo de transições de fase é, então, compreender o comportamento do sistema em regiões próximas da temperatura de transição [15, 60]. Alguns estudos teóricos e experimentais indicam que o comportamento das propriedades do sistema na região de criticalidade pode ser descrito por leis de potência simples, caracterizando um conjunto de expoentes críticos [15, 57, 60, 68]. Os expoentes críticos são parâmetros responsáveis por descrever o comportamento do sistema na região crítica [15, 62].

Os mesmos valores de expoentes críticos podem ser apresentados por sistemas muito distintos, indicando um princípio de universalidade. Logo, os sistemas podem ser agrupados em classes de universalidade [15, 69]. A vantagem da universalidade é a simplificação da análise dos fenômenos críticos, uma vez que é possível inferir os expoentes críticos para sistemas complexos através de resultados obtidos por estudos de transições de fase de sistemas simples da mesma classe de universalidade [57].

O expoente crítico λ associado a uma grandeza termodinâmica $y(t)$ pode ser obtido através da seguinte derivada logarítmica [52, 57, 60, 59, 62, 70, 71]:

$$\lambda \equiv \lim_{t \rightarrow 0^+} \frac{\ln|y(t)|}{\ln|t|}. \quad (3.44)$$

A temperatura reduzida t é expressa como:

$$t \equiv \frac{T - T_c}{T_c} = \frac{T}{T_c} - 1. \quad (3.45)$$

No contexto geral, a dependência de $y(t)$ com a temperatura reduzida t é representada por [57, 59]:

$$y(t) = At^\lambda(1 + Bt^\theta + \dots), \quad (3.46)$$

onde A é a amplitude crítica, B é a correção principal na amplitude e $\theta > 0$ é a correção principal no expoente. Por causa disso, com $t \rightarrow 0^+$, o expoente crítico λ é expresso pela seguinte forma, mais usual [59]:

$$y(t) \sim |t|^\lambda. \quad (3.47)$$

É interessante destacar que ao calcular o limite no sentido contrário ($t \rightarrow 0^-$), o expoente λ' é determinado de uma forma semelhante. Em virtude disso, $\lambda = \lambda'$, porém as amplitudes geralmente são distintas [57, 59].

Embora a temperatura crítica dependa de diversos parâmetros associados a cada sistema, os expoentes críticos dependem de poucos fatores associados ao sistema [57]. Esses fatores são a dimensionalidade do sistema físico (d), a dimensionalidade do parâmetro de ordem (n) e o alcance das interações microscópicas (curto ou longo) [15, 57]. Os materiais ferromagnéticos apresentam, nas proximidades da região crítica, os expoentes críticos apresentados na Tabela 1. Nos parágrafos posteriores há informações importantes sobre cada.

Tabela 1 – Expoentes críticos para um sistema magnético com dimensão espacial d

Grandeza	Expoente crítico	Lei de potência	Condições
Calor específico	α	$c \sim t^{-\alpha}$	$H = 0, T > T_c$
Magnetização	β	$m \sim (-t)^\beta$	$H = 0, T < T_c$
Susceptibilidade	γ	$\chi \sim t^{-\gamma}$	$H = 0, T > T_c$
Comprimento de correlação	ν	$\xi \sim t^{-\nu}$	$H = 0, T > T_c$
Função de correlação	η	$\Gamma(r) \sim r^{-(d-2+\eta)}$	$T = T_c, H = 0$

Elaborado pelo autor. Fonte: [52, 55, 60, 62].

O expoente β é o responsável por descrever o comportamento do parâmetro de ordem do sistema em função de t na criticalidade, quando $H=0$. Para $T < T_c$, o parâmetro

de ordem se comporta da seguinte forma [53]:

$$m = m(T, H \rightarrow 0^+) \sim (-t)^\beta \quad (3.48)$$

O parâmetro de ordem também pode ser definido com $H \rightarrow 0^-$. O sinal \sim indica que existe um comportamento assintótico nas vizinhanças do ponto crítico [53]. Consideramos apenas a condição anterior, em relação a temperatura crítica; já que para $T > T_c$ a magnetização espontânea se anula.

O expoente crítico γ descreve a conduta da susceptibilidade magnética do sistema na região crítica em função de t , na ausência de um campo externo. Se a susceptibilidade é uma resposta do parâmetro de ordem em relação ao campo termodinamicamente conjugado (veja a Equação 3.35) [53], então:

$$\chi(T, H = 0) \sim \begin{cases} \chi_+ t^{-\gamma}, & \text{para } T > T_c \\ \chi_- (-t)^{-\gamma}, & \text{para } T < T_c \end{cases} \quad (3.49)$$

Já o expoente α caracteriza o comportamento do calor específico na criticalidade em função de t , se $H=0$, da seguinte forma [53]:

$$c_H(T, H = 0) \sim \begin{cases} c_{H+} t^{-\alpha}, & \text{para } T > T_c \\ c_{H-} (-t)^{-\alpha}, & \text{para } T < T_c \end{cases} \quad (3.50)$$

Como a susceptibilidade magnética e o calor específico do sistema ferromagnético se intensificam positivamente na criticalidade, então utilizamos a primeira notação (para $T > T_c$) estabelecida para os expoentes críticos α e γ .

A medida de correlação entre dois *spins* i e j separados pelo vetor

$$\vec{r} = \vec{r}_i - \vec{r}_j \quad (3.51)$$

(\vec{r}_i é o vetor posição do *spin* i) é dada pela seguinte função de correlação espacial [57, 60, 59]:

$$\Gamma(\vec{r}) \equiv (\vec{S}_i - \langle \vec{S}_i \rangle) \cdot (\vec{S}_j - \langle \vec{S}_j \rangle). \quad (3.52)$$

O símbolo $\langle \dots \rangle$ significa média térmica.

Para um sistema invariante à translação, a função correlação depende apenas da distância entre os spins ($|\vec{r}| = r$) [52, 57, 60, 59] e acima de T_c espera-se uma dependência na forma Ornstein-Zernike [52]:

$$\Gamma(r) \sim r^{-p} \exp\left(\frac{-r}{\xi}\right), \quad (3.53)$$

onde p é um número real e ξ representa o comprimento de correlação. Longe da região crítica, ξ é finito e a função de correlação apresenta um comportamento predominantemente exponencial. Porém, na criticalidade o comprimento de correlação diverge e a função de correlação apresenta um decaimento por lei de potência [60]. Logo, próximo do ponto crítico, o expoente responsável por descrever o comportamento da função de correlação é o η ; e pode ser obtido através da seguinte relação [60, 62, 72]:

$$\Gamma \sim \Gamma_0 r^{-(d-2+\eta)}. \quad (3.54)$$

Já o expoente crítico ν é responsável por descrever o comportamento do comprimento de correlação ξ na região crítica, em função de t [62]. Este expoente está relacionado ao ξ , na criticalidade, por meio da seguinte divergência:

$$\xi \sim \xi_0 t^{-\nu}. \quad (3.55)$$

Nota-se, pela relação de t , que o expoente ν só pode ser obtido para $T > T_c$.

Também seria possível definir outros expoentes críticos, como o tempo de relaxação τ do sistema e o expoente crítico dinâmico z [15]. Além de apresentar um método robusto que possibilita estimar a(s) temperatura(s) crítica(s) (T_c) de um sistema ferromagnético, este trabalho tem a intenção de estimar os expoentes críticos ν , α , β e γ .

É importante destacar que os expoentes críticos também podem ser medidos experimentalmente. Além disso, estão relacionados entre si por meio de algumas relações de escala [15, 52]. Entre essas relações destacam-se as desigualdades de Rushbrooke e de Griffiths [52]:

$$\alpha + 2\beta + \gamma \geq 2 \quad (3.56)$$

e

$$\alpha + \beta(1 + \delta) \geq 2, \quad (3.57)$$

respectivamente.

3.3 Teoria de escala de tamanho finito

As divergências nas grandezas termodinâmicas na criticalidade só ocorrem se a energia livre do sistema possuir uma parte singular. Todavia, a energia livre de um sistema finito é uma função não singular dos parâmetros externos, por isso as transições de fase só podem ocorrer no limite termodinâmico [53, 60]. Logo, os sistemas finitos (limitados em tamanho) apresentam máximos arredondados na região crítica, ao invés dessas divergências. Além disso, a posição do máximo é deslocada no ponto crítico [60, 73].

A grande maioria dos sistemas estudados através de simulações computacionais são exemplos de sistemas finitos [15]. Para analisar o comportamento destes na criticalidade utilizamos a teoria de escala finita, ou FSS (*Finite Size Scaling*), que foi apresentada inicialmente em 1971, por Fisher [15, 74]. Essa teoria descreve a relação entre o comportamento do sistema finito e seu equivalente no limite termodinâmico [60, 66]. Desse modo, quando analisamos a variação de algumas grandezas termodinâmicas em relação a dimensão linear do sistema (L), conseguimos estimar a temperatura e os expoentes críticos da transição de fase. Visto que, é possível extrair essas relações em termos de leis de potência que caracterizam o comportamento das grandezas nas vizinhanças da transição de fase contínua [15].

Como na criticalidade o sistema se apresenta altamente correlacionado, dizemos que o comprimento característico do sistema na região crítica é o comprimento de correlação do parâmetro de ordem [57]. Porém, nos sistemas finitos, especialmente em simulações, ξ é limitado pela dimensão do sistema [15, 60]. Se $L \gg \xi$, os efeitos do sistema finito não são relevantes [60]; mas, se $L \ll \xi$, as correlações de grande alcance são excluídas, as divergências dos parâmetros termodinâmicos desaparecem e o ponto crítico é deslocado [57]. Percebemos, então, que há uma dependência de ξ com L :

$$\xi \sim L. \quad (3.58)$$

Se levarmos em consideração a Equação 3.55, temos:

$$t \sim \xi^{-1/\nu}. \quad (3.59)$$

Logo, podemos afirmar que a dependência de ξ e L pode ser associada a temperatura

reduzida da seguinte forma:

$$t \sim L^{-1/\nu}. \quad (3.60)$$

Retornaremos nessa definição mais adiante.

Se um sistema é suficientemente grande, em uma determinada temperatura T próxima da temperatura crítica a energia livre de Gibbs pode ser dividida em uma parte singular (G_s) e em uma parte não singular (G_{ns}) [60, 73]:

$$G(t, H) = G_s(t, H) + G_{ns}(t, H), \quad (3.61)$$

Se este sistema tiver condições de contorno periódicas, a parte não singular será independente do tamanho do sistema. Já a parte singular é representada pela seguinte função homogênea generalizada [52, 57]:

$$G_s(t, H) = \Lambda G_s(\Lambda^a t, \Lambda^b H), \quad (3.62)$$

onde Λ é um parâmetro arbitrário (pode assumir qualquer valor) e os termos a e b são dois expoentes bem definidos que dependem do sistema. Devido a arbitrariedade, é correto considerar que $\Lambda^a t = 1$, conseqüentemente $\Lambda = t^{-1/a}$. Logo, a Equação 3.62 pode ser reescrita da seguinte forma [57]:

$$G_s(t, H) = t^{-1/a} G_s(1, t^{-b/a} H). \quad (3.63)$$

Nos sistemas magnéticos o parâmetro de ordem, o calor específico e a susceptibilidade magnética podem ser obtidos através das derivadas da Equação 3.63. Podemos ver que resultados dessas derivações sustentam as relações propostas nas Equações 3.48 a 3.50, além de definir os expoentes críticos α , β e γ .

O parâmetro de ordem em $T < T_c$ é:

$$m(t, H) = -\frac{1}{N} \left(\frac{\partial G_s}{\partial H} \right)_T = -t^{-(\frac{1}{a} + \frac{b}{a})} G'_s(1, t^{-b/a} H), \quad (3.64)$$

onde N representa o número de partículas.

Considerando a definição da susceptibilidade magnética fornecida pela Equação 3.35 e a relação da Equação 3.64, podemos considerar para $T > T_c$:

$$\chi = \left(\frac{\partial m}{\partial H} \right)_T = -\frac{1}{N} \left(\frac{\partial^2 G_s}{\partial H^2} \right)_T = t^{-\left(\frac{1}{a} + \frac{2b}{a}\right)} G_s''(1, t^{-b/a} H). \quad (3.65)$$

Na ausência de campo magnético, as relações das Equações 3.64 e 3.65 se tornam:

$$m(t, 0) = -t^{-\left(\frac{1}{a} + \frac{b}{a}\right)} G_s'(1, 0) = -t^{-\left(\frac{1}{a} + \frac{b}{a}\right)} m_0 \quad (3.66)$$

e

$$\chi = t^{-\left(\frac{1}{a} + \frac{2b}{a}\right)} G_s''(1, 0) = t^{-\left(\frac{1}{a} + \frac{2b}{a}\right)} \chi_0. \quad (3.67)$$

Logo, podemos extrair as seguintes definições para os expoentes críticos β e γ :

$$\beta = -\frac{1}{a} - \frac{b}{a} \quad (3.68)$$

e

$$\gamma = \frac{1}{a} + \frac{2b}{a}. \quad (3.69)$$

Já sabemos que o calor específico é definido pela Equação 3.43, considerando H constante. Se determinarmos a primeira derivada da energia livre de Gibbs com respeito a temperatura, encontramos:

$$\left(\frac{\partial G_s}{\partial T} \right)_H = -\frac{1}{a} t^{-\left(\frac{1}{a} + 1\right)} G_s(1, t^{-b/a} H) - \frac{b}{a} t^{-\left(\frac{1}{a} + \frac{b}{a} + 1\right)} H G_s'(1, t^{-b/a} H). \quad (3.70)$$

A segunda derivada fica:

$$\left(\frac{\partial^2 G_s}{\partial T^2} \right)_H = \mathcal{A} + \mathcal{B}, \quad (3.71)$$

onde

$$\mathcal{A} = \frac{1}{a} \left(\frac{1}{a} + 1 \right) t^{-\left(\frac{1}{a} + 2\right)} G_s(1, t^{-b/a} H) + \frac{b}{a^2} t^{-\left(\frac{1}{a} + \frac{b}{a} + 2\right)} H G_s'(1, t^{-b/a} H) \quad (3.72)$$

e

$$\mathcal{B} = \frac{b}{a} \left(\frac{1}{a} + \frac{b}{a} + 1 \right) t^{-(\frac{1}{a} + \frac{b}{a} + 2)} H G'_s(1, t^{-b/a} H) + \left(\frac{b}{a} \right)^2 t^{-(\frac{1}{a} + \frac{2b}{a} + 2)} H^2 G''_s(1, t^{-b/a} H). \quad (3.73)$$

A campo nulo para $T > T_c$, o calor específico fica:

$$c_H = -\frac{T}{N} \left(\frac{1}{a} \right) \left(\frac{1}{a} + 1 \right) t^{-(\frac{1}{a} + 2)} G_s(1, 0) = t^{-(\frac{1}{a} + 2)} c_0. \quad (3.74)$$

Logo, é possível extrair a seguinte definição para o expoente α :

$$\alpha = \frac{1}{a} + 2. \quad (3.75)$$

Em posse das relações de α , β e γ conseguimos definir que

$$\alpha + 2\beta + \gamma = 2. \quad (3.76)$$

A definição da Equação 3.60 contribui para as seguintes relações:

$$c_H = L^{\alpha/\nu} c_0, \quad (3.77)$$

$$m(t, 0) = L^{-\beta/\nu} m_0 \quad (3.78)$$

e

$$\chi = L^{\gamma/\nu} \chi_0 \quad (3.79)$$

A teoria de escala possibilita extrapolar os dados de um sistema finito com diversos valores de L no limite termodinâmico (ou seja, quando $L \rightarrow \infty$), possibilitando encontrar a temperatura e expoentes críticos do sistema infinito [15]. Para isso só precisamos realizar o logaritmo das Equações 3.77 a 3.79 (conforme demonstrado a seguir) e realizar um ajuste de curvas linear simples [75, 76].

$$\ln\{c_H(T_c)\} = \frac{\alpha}{\nu} \ln\{L\} + \ln\{c_0\}; \quad (3.80)$$

$$\ln\{m(T_c)\} = -\frac{\beta}{\nu} \ln\{L\} + \ln\{m_0\}; \quad (3.81)$$

$$\ln\{\chi_H(T_c)\} = \frac{\gamma}{\nu}\ln\{L\} + \ln\{\chi_0\}. \quad (3.82)$$

As relações $\frac{\alpha}{\nu}$, $\frac{-\beta}{\nu}$ e $\frac{\gamma}{\nu}$ correspondem às inclinações dos ajustes dos gráficos *log-log*. Porém, percebemos que há a necessidade de encontrar primeiro a T_c e o expoente crítico ν , para em seguida achar os expoentes críticos α , β e γ . Já sabemos que o expoente ν está associado ao comprimento de correlação ξ (veja a Equação 3.55). Logo, a temperatura crítica de um sistema no limite termodinâmico pode ser obtida por meio de um ajuste de curvas linear simples da temperatura pseudo-crítica para cada L (T_c^L) em relação a $L^{-\nu}$, haja vista que T_c é a intersecção deste gráfico com o eixo das temperaturas T_c^L [15, 57, 60]. É importante destacar também que quando $L \rightarrow \infty$, a temperatura T_c^L do sistema finito obedece a seguinte lei de escala [15, 60]:

$$T_c^L = T_c + wL^{-1/\nu}. \quad (3.83)$$

As relações apresentadas pelas Equações 3.77, 3.79 e 3.83 se referem à transição de segunda ordem. Nas transições de fase de primeira ordem, os seguintes parâmetros termodinâmicos escalam com L^d (sendo d a dimensão do sistema)[57, 60, 77]:

$$T_c^L = T_c + wL^{-d}, \quad (3.84)$$

$$c_H = L^d c_0 \quad (3.85)$$

e

$$\chi = L^d \chi_0. \quad (3.86)$$

É importante destacar que os parâmetros c_0 , m_0 e χ_0 , presentes nas Equações 3.80 a 3.82, são chamados de funções de escala e não dependem da dimensão linear do sistema. Em função disso, nas estimativas deste trabalho não consideramos esses parâmetros.

3.4 Transição BKT

O modelo XY clássico 2D é especificamente utilizado para estudar defeitos topológicos do tipo vórtice, em sistemas bidimensionais. Os filmes finos⁴ supercondutores ou superfluidos são da mesma classe de universalidade que magnetos planares [80]; em função

⁴ Um filme fino pode ser compreendido como uma deposição de uma camada de um material sobre um substrato, com a finalidade de modificar ou ajustar propriedades superficiais deste substrato [78].

disso, podemos utilizar o modelo XY clássico 2D para compreender a transição de fase topológica destes sistemas [81]. A energia livre deste modelo corresponde exatamente a energia de vórtices em filmes de hélio superfluido, por exemplo [82]. Pensando nessas informações, podemos levantar a hipótese de que o modelo de *clock* de p -estados bidimensional também poderia ser utilizado para simular e estudar estes sistemas, dependendo do valor intermediário de p ; já que este modelo equivale ao modelo XY clássico 2D discretizado [33].

O filme fino supercondutor pode apresentar propriedades magnéticas interessantes, dependendo da técnica de deposição, o que favorece a sua aplicação em dispositivos eletrônicos. Por este motivo, há um interesse significativo em estudar diferentes técnicas de nanofabricação de supercondutores e compreender a nucleação e a movimentação de vórtices nestes sistemas. A descrição da dinâmica destes defeitos topológicos, da primeira nucleação até a acomodação de vários vórtices, depende dos seguintes fatores: temperatura, campo magnético externo aplicado, tipo de material e geometria da amostra [83].

Um vórtice é uma configuração onde os *spins* giram em torno de ponto central. Longe do centro, os *spins* apontam quase em uma mesma direção. No centro do vórtice os *spins* apresentam um comportamento de singularidade, ou seja, não é possível escolher uma direção em que os mesmos irão apontar. Se alterarmos a orientação de um *spin*, o vórtice permanece na rede porque são excitações topológicas de alta energia.

A soma da diferença entre os ângulos dos *spins* num caminho fechado percorrido no sentido horário em torno do centro do vórtice é igual a $+2\pi$. Já no sentido anti-horário, ou seja, no anti-vórtice essa soma é igual a -2π . Por isso, os ângulos dos *spins* da rede são múltiplos de 2π . Na Figura 15 podemos ver os tipos de pares de vórtice de carga $+1$ (esquerda) e o anti-vórtice de carga -1 (direita), devidamente ligados, que podem ser vistos em sistemas ferromagnéticos bidimensionais.

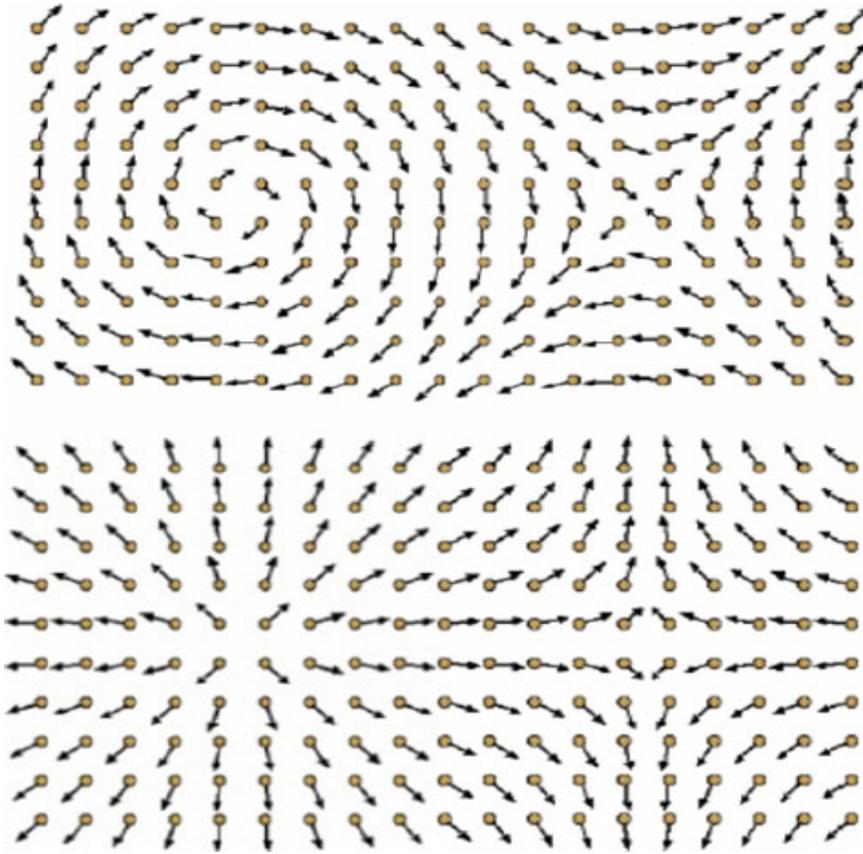
A perturbação da ordem provocada pelo par de vórtice e anti-vórtice é local e limitada. Ou seja, com exceção da região central onde o par de vórtice e anti-vórtice estão ligados, os *spins* mais distantes tendem a se orientar praticamente em uma mesma direção.

O módulo de helicidade mede a resposta do sistema ao aplicarmos uma pequena torção nos momentos magnéticos. Isto é, essa grandeza consegue medir todos os vórtices e antivórtices que surgem na criticalidade BKT. A helicidade na direção \hat{x} , para o modelo XY 2D, é dada por [64]:

$$\Upsilon_x = -\frac{1}{2}\langle E \rangle - \beta \left\langle \left(-J \sum_{i \neq j} (\vec{r}_{ij} \cdot \hat{x}) (\sigma_i^x \sigma_j^y - \sigma_i^y \sigma_j^x) \right)^2 \right\rangle, \quad (3.87)$$

onde $\langle E \rangle$ é a energia média por *spin*, enquanto σ_i^x e σ_i^y se referem ao i -ésimo momento magnético na direção x e y , respectivamente. Logo, σ_j^x e σ_j^y representam o vizinho do

Figura 15 – Representação esquemática dos pares de vórtice e anti-vórtice ligados



Fonte: [84].

momento magnético do sítio i , nas direções x e y . Já \vec{r}_{ij} é a distância entre o momento magnético do sítio i e seu vizinho do sítio j .

A energia necessária para o surgimento de um único vórtice é dada por [64]:

$$E_{\text{único vórtice}} = J\pi \left(\frac{L}{a} \right), \quad (3.88)$$

onde L é o tamanho de rede e a é o espaçamento da rede. Logo, o custo energético do surgimento de um vórtice está diretamente relacionado com o tamanho do sistema. Já a energia necessária para criar um par de vórtice e anti-vórtice é dada por [64]:

$$E_{\text{par}} = J2\pi \left(\frac{r}{a} \right), \quad (3.89)$$

onde r é a distância entre os centros dos vórtices. Portanto, somente os pares de vórtices e anti-vórtices podem ser excitados por flutuações térmicas em sistemas grandes, já que a energia envolvida é menor.

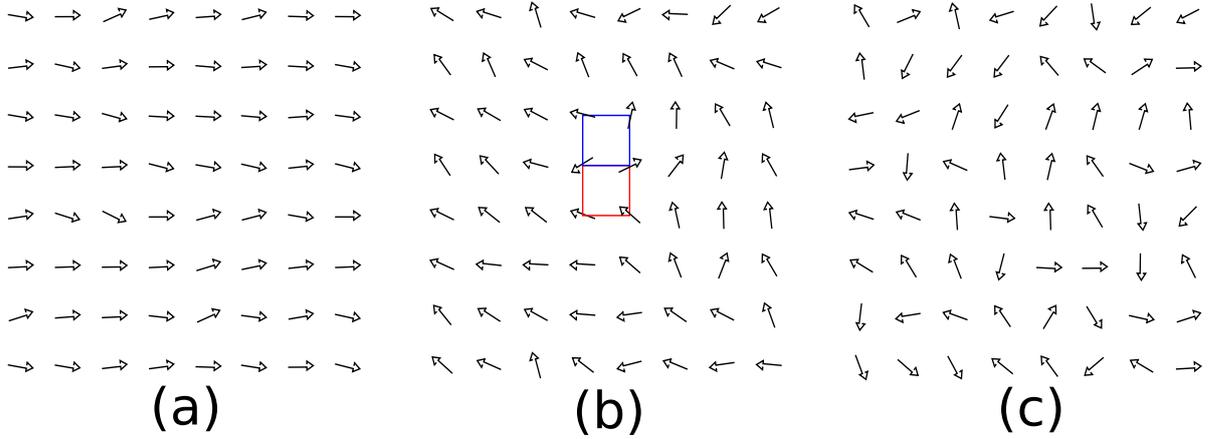
Devido a dimensão mais baixa dos sistemas bidimensionais, as flutuações térmicas são muito significativas e não há uma ordem de longo alcance; conseqüentemente, não há transição do tipo ordem-desordem [1]. Todavia, apresentam transição de ordem infinita entre um estado de ordem topológica e um estado de desordem, conhecida como transição BKT [85].

A transição de fase BKT foi apresentada por J. Michael Kosterlitz e David J. Thouless, em 1973 [46]. Vadim Berezinskii também realizou um estudo sobre esse tipo de transição e chegou a publicá-lo um ano antes [86], mas somente em periódico soviético. Por este motivo, algumas literaturas se referem a esse fenômeno simplesmente como transição de fase KT. Mas foi em 2016 que David J. Thouless, J. Michael Kosterlitz e F. Duncan M. Haldane foram agraciados com o prêmio Nobel de Física em virtude das descobertas teóricas a respeito das fases topológicas da matéria, que contribuíram de forma significativa para o entendimento dos estados da matéria, e sobre a transição Berezinskii-Kosterlitz-Thouless [87].

Esse tipo de transição de fase ocorre por causa da presença de defeitos topológicos do tipo vórtice na rede cristalina do material. Mais especificamente, em baixas temperaturas os materiais ferromagnéticos apresentam vórtices e anti-vórtices ligados em pares (iguais ao que vemos na Figura 15) que provocam excitações topológicas estáveis [85]. Em altas temperaturas, esses pares tendem a se dissociar [64]; porém, a desvinculação total dos pares de vórtices e anti-vórtices ocorre na temperatura crítica [85].

O *software open source* STP-XYModel [88] é utilizado pela comunidade acadêmica para estudar o comportamento dos pares de vórtice e anti-vórtice do modelo XY bidimensional, conforme a temperatura do sistema é modificada. Esta ferramenta computacional possibilita controlar a quantidade de direções simétricas que o *spin* pode assumir na rede quadrada. Desse modo, realizamos as configurações devidas para visualizar a dinâmica de *spins* do modelo de *clock* 2D para $p = 7$, em um tamanho de rede $L = 20$. Na Figura 16 podemos ver: (a) o comportamento ordenado deste sistema em uma temperatura baixa ($T = 0,1 J|\vec{\sigma}|^2/k_B$), (b) a presença de pares de vórtice (quadrado azul) e anti-vórtice (quadrado vermelho) ligados também à baixa temperatura ($T = 0,85 J|\vec{\sigma}|^2/k_B$) e (c) o desaparecimento dos pares de vórtice e anti-vórtice em uma temperatura elevada ($T = 3,0 J|\vec{\sigma}|^2/k_B$).

Em baixas temperaturas existem poucos pares de vórtice e anti-vórtice porque a sua criação exige muita energia. Logo, esses pares limitados não afetam de forma significativa as correlações a longa distância. À medida que a temperatura aumenta, ocorre o desacoplamento dos vórtices. Logo, em um estado completamente desordenado a altas temperaturas, os pares de vórtices e anti-vórtices se desvinculam e passam a existir livremente pela rede, provocando um efeito de desordem. Por conseqüência, o sistema perde as correlações entre os *spins* muito distantes.

Figura 16 – Comportamento dos *spins* do modelo de *clock* 2D para $p = 7$


Fonte: elaborado pelo autor por meio do STP-XYModel [88].

O surgimento e a dissociação dos vórtices ocorrem entre as fases ordenada e desordenada. O estado da matéria referente a essa região é mais ordenado do que a fase desordenada, porém não é possível encontrar um padrão de ordem local nessa região. Portanto, a fase BKT não é uma fase desordenada e nem verdadeiramente ordenada. Mas sim, definida como um estado de quase-ordenamento da matéria.

A transição BKT segue uma lei de potências para $T < T_{BKT}$ e tem um decaimento exponencial para $T > T_{BKT}$. Sendo assim, a função de correlação segue as seguintes relações para a transição BKT [64]:

$$\Gamma(r) \sim r^{-\eta(t)}, \text{ para } T < T_{BKT}; \quad (3.90)$$

$$\Gamma(r) \sim e^{-r/\xi(t)}, \text{ para } T > T_{BKT}. \quad (3.91)$$

Percebe-se que o expoente crítico η possui uma dependência com a temperatura reduzida t , que é expressa como

$$t = \frac{T}{T_{BKT}} - 1. \quad (3.92)$$

Como a transição topológica diverge para todos os pontos em baixas temperaturas e apresenta um comportamento exponencial em temperaturas elevadas, o comprimento de correlação ξ possui o seguinte comportamento [64]:

$$\xi \sim \infty, \text{ para } T < T_{BKT}; \quad (3.93)$$

$$\xi \sim e^{t^{-\nu}}, \text{ para } T > T_{BKT}. \quad (3.94)$$

Já o comportamento de escala para o calor específico e para a susceptibilidade magnética, neste tipo de transição é dada por [64]:

$$c_H(t, H = 0) \sim \xi^{-2} \quad (3.95)$$

e

$$\chi(t, H = 0) \sim \xi^{2-\eta(t)}. \quad (3.96)$$

O calor específico não diverge quando $|t| \sim 0$. Contudo, essa grandeza apresenta um pico imediatamente após a temperatura crítica T_{BKT} . Por este motivo, temos a impressão que o sistema apresenta uma transição de segunda ordem neste ponto, onde de fato há uma transição BKT-desordem.

4 Simulação computacional

A análise canônica utiliza alguns conceitos de probabilidade para se conectar com a termodinâmica e definir as quantidades termodinâmicas de interesse em um modelo de *spins*, como: energia interna, magnetização, calor específico e susceptibilidade magnética. Pensando nisso, apresentamos primeiro uma revisão sobre estes conceitos e em seguida discutimos a respeito do ensemble canônico que nos leva até a personagem principal em questão: a função de partição canônica. Outras informações relacionadas, direta ou indiretamente, com a obtenção dos zeros da função de partição canônica e com o desenvolvimento da simulação computacional deste trabalho, também serão apresentadas neste capítulo.

4.1 Conceitos sobre estatística e probabilidade

Tendo em vista uma revisão mais clara e objetiva, separamos os conceitos de interesse sobre probabilidade e algumas noções de estatística. Na parte que se refere a estatística, definimos e explicamos os parâmetros estatísticos, ligados a uma distribuição de probabilidade, que serão utilizados mais adiante.

4.1.1 Probabilidade

O espaço amostral (ou espaço de probabilidades) representa todos os resultados que podem ocorrer em um experimento aleatório, já o evento é um subconjunto de resultados deste espaço amostral [89, 90, 91]. Além disso, temos também o evento simples (ou evento elementar) que é um resultado (ou evento) que não pode mais ser decomposto em resultados mais simples, isto é, consiste em um único resultado possível [92, 93]. Consideremos que um espaço amostral A possui M resultados possíveis:

$$A = A_1, A_2, A_3, \dots, A_M \quad (4.1)$$

Considere que em N amostragens desse espaço o evento A_j seja observado N_j vezes, a probabilidade do evento A_j ocorrer é

$$P_j = P(A_j) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{N_j}{N}. \quad (4.2)$$

Logo, a probabilidade P_j deve satisfazer a seguinte condição [89, 92]:

$$0 \leq P_j \leq 1. \quad (4.3)$$

Se dois eventos A_j e A_k não podem ocorrer simultaneamente, dizemos que estes são eventos mutuamente excludentes (ou disjuntos). Isso ocorre porque os eventos A_j e A_k não possuem resultados em comum (a intersecção é vazia) [89, 91], ou seja, a ocorrência de A_j impossibilita a ocorrência de A_k . Logo, a probabilidade da intersecção entre os dois eventos é nula [89]:

$$P(A_j \cap A_k) = 0. \quad (4.4)$$

A união entre dois eventos A_j e A_k é definida como o evento que consiste em todos os resultados possíveis em cada um dos dois eventos [91]. Isto é, pode ocorrer apenas o evento A_j , ou só o evento A_k , ou A_j e A_k simultaneamente. Em função disso, podemos representar a probabilidade da união entre dois eventos por meio da regra da adição:

$$P(A_j \cup A_k) = P(A_j) + P(A_k) - P(A_j \cap A_k). \quad (4.5)$$

Essa regra pode ser simplificada se, e somente se, os eventos A_j e A_k forem mutuamente exclusivos. A partir da Equação 4.4, podemos obter:

$$P(A_j \cup A_k) = P(A_j) + P(A_k). \quad (4.6)$$

Se todos os eventos do espaço amostral A são mutuamente excludentes, então a soma das probabilidades é igual a 1 [92]:

$$P(A) = P(A_1) + P(A_2) + P(A_3) + \dots + P(A_M) = 1. \quad (4.7)$$

A partir de agora, trataremos de eventos sequenciais. Em função disso, utilizaremos a variável \mathbb{P} para nos referir a probabilidade da intersecção entre dois eventos sequenciais, e então evitar uma ambiguidade em relação a Equação 4.4. A probabilidade do evento A_k ocorrer, na hipótese do evento A_j ter ocorrido é representada da seguinte forma:

$$P(A_k|A_j) = \frac{\mathbb{P}(A_j \cap A_k)}{P(A_j)}, \quad (4.8)$$

onde $P(A_k|A_j)$ é a probabilidade condicional. Como o evento A_j ocorreu, A_j passa a ser o novo espaço amostral [92]. Utilizando a regra da multiplicação, podemos encontrar:

$$\mathbb{P}(A_j \cap A_k) = P(A_k|A_j) \cdot P(A_j). \quad (4.9)$$

Logo, podemos obter a probabilidade da intersecção por meio do produto entre uma probabilidade marginal e uma probabilidade condicional.

Os eventos A_j e A_k são considerados independentes se, e somente se, a probabilidade do evento A_k ocorrer não é afetada pela ocorrência, ou não, do evento A_j [92]. Podemos verificar se dois eventos são independentes de duas formas:

$$P(A_j|A_k) = P(A_j) \quad (4.10)$$

e

$$P(A_k|A_j) = P(A_k). \quad (4.11)$$

Desse modo, se o evento A_j é independente de A_k , espera-se que A_k também seja independente de A_j . Logo, temos outra alternativa para determinar a probabilidade da intersecção:

$$\mathbb{P}(A_j \cap A_k) = P(A_j) \cdot P(A_k). \quad (4.12)$$

4.1.2 Estatística

Na estatística, definimos como população o conjunto formado por todos os indivíduos ou objetos que precisamos examinar para tirar conclusões. Como na grande maioria das vezes é muito difícil ou impossível analisar toda população; utilizamos uma pequena parte dela, chamada de amostra. Logo, o processo de inferência estatística se refere a ação de inferir certos fatos sobre a população, a partir dos resultados estatísticos apresentados pela amostra [92].

As amostras podem ser extraídas da população por meio de métodos de amostragem probabilísticos ou não-probabilísticos. A amostragem probabilística é aquela em que os elementos da população são coletados aleatoriamente. Ou seja, possuem a mesma probabilidade de fazer parte da amostra. Já a metodologia de amostragem não-probabilística é aquela em que há uma escolha deliberada dos elementos da população, isto é, a escolha

depende de critérios ou julgamentos. Consequentemente, os elementos não possuem a mesma probabilidade de fazer parte da amostra.

Em algumas situações é necessário resumir certas características das distribuições de dados (ou das distribuições de probabilidades) por meio de medidas, capazes de quantificar alguns aspectos de interesse. Existem duas classes dessas medidas: as medidas de posição (ou de tendência central) e as medidas de dispersão (ou de variabilidade). A medida de posição representa um valor no centro ou no meio de um conjunto de dados; mas, como há diferentes formas de definir o centro de um conjunto de dados, existem diferentes definições de medidas de posição. A que mais nos interessa no momento é a média.

A média amostral é considerada a melhor estimativa pontual da média populacional porque não tende a superestimar ou subestimar o valor populacional. Uma vez que, essa medida procura centralizar em torno do valor da média populacional, com uma variação consideravelmente baixa.

Todavia, é relevante destacar que tanto a média amostral quanto a média populacional são igualmente sensíveis a valores muito grandes ou muito pequenos. Além disso, não há distinção nas maneiras de se calcular essas duas medidas de tendência central. Baseado nesses motivos, apresentamos apenas a definição da média populacional (também chamada de valor médio).

A média de uma quantidade de interesse do experimento, como a energia e/ou a magnetização, pode ser determinada somando todos estes valores obtidos e dividindo o total por N . Isto é, calculando a média aritmética comum:

$$\mu = \frac{A_1 + A_2 + A_3 + \cdots + A_N}{N} = \frac{\sum_{j=1}^N A_j}{N}. \quad (4.13)$$

Podemos mensurar μ de uma forma mais robusta: somando os produtos de cada quantidade de interesse pela sua respectiva frequência absoluta e dividindo o total por N . Logo,

$$\mu = \sum_{j=1}^N A_j \cdot P_j. \quad (4.14)$$

onde P_j é a probabilidade.

As medidas de dispersão são as responsáveis por informar o quanto os dados de um determinado conjunto estão dispersos em relação a região central. Ou seja, servem para informar o grau de variação existente no conjunto de dados, seja ele amostral ou populacional, em relação a média, por exemplo. Apresentamos a seguir as seguintes medidas de variabilidade: variância (amostral e populacional) e desvio-padrão (amostral e populacional).

A variância amostral, comumente representada por s^2 , é dada por

$$s^2 = \frac{\sum_{j=1}^N (A_j - \bar{A})^2}{N - 1}, \quad (4.15)$$

onde N é o tamanho da amostra e \bar{A} é a média amostral dos resultados possíveis de um determinado conjunto amostral do experimento A . Já a variância populacional, indicada por σ^2 , é dada por

$$\sigma^2 = \frac{\sum_{j=1}^N (A_j - \mu)^2}{N}, \quad (4.16)$$

onde μ é o valor médio de todos os resultados possíveis do experimento A .

O desvio-padrão, seja ele amostral ou populacional, é definido como a raiz quadrada da variância. Logo, calculamos o desvio-padrão de um conjunto de valores amostrais da seguinte forma:

$$s = \sqrt{s^2} = \sqrt{\frac{\sum_{j=1}^N (A_j - \bar{A})^2}{N - 1}}. \quad (4.17)$$

Já o desvio-padrão populacional é dado por

$$\sigma = \sqrt{\sigma^2} = \sqrt{\frac{\sum_{j=1}^N (A_j - \mu)^2}{N}}. \quad (4.18)$$

Tanto na Mecânica Quântica quanto na Mecânica Estatística, existe o interesse em determinar o valor médio de uma distribuição de probabilidades de variáveis aleatórias discretas. Logo, μ passa a ser um valor de interesse que, então, é chamado de valor esperado.

O valor esperado $E(X)$ de uma variável aleatória discreta X representa a média de todos os valores que esperaríamos obter, caso a variável X fosse medida um número muito grande de vezes. Sendo assim, o valor esperado é uma média ponderada de todos os valores possíveis de X . O peso, ou ponderação, de cada valor equivale a probabilidade de X tomar esse valor. Portanto, o valor esperado de X é frequentemente chamado de média da distribuição de X [90].

Logo, o valor esperado do experimento aleatório A é definido como

$$E(A) = \mu = \sum_{j=1}^N A_j \cdot P_j. \quad (4.19)$$

Desse modo, por uma questão óbvia temos que

$$E(A^2) = \sum_{j=1}^N A_j^2 \cdot P_j. \quad (4.20)$$

Já a variância do experimento aleatório A , isto é, o valor esperado dos desvios quadráticos é dado por

$$\sigma^2 = E[(A - \mu)^2] = \sum_{j=1}^N (A_j - \mu)^2 \cdot P_j. \quad (4.21)$$

Se determinarmos o produto notável, temos que

$$\sigma^2 = \sum_{j=1}^N (A_j^2 - 2A_j\mu + \mu^2) \cdot P_j. \quad (4.22)$$

Podemos reescrever esta soma longa da seguinte forma:

$$\sigma^2 = \left(\sum_{j=1}^N A_j^2 \cdot P_j \right) - \left(2\mu \sum_{j=1}^N A_j \cdot P_j \right) + \left(\mu^2 \sum_{j=1}^N P_j \right). \quad (4.23)$$

Considerando a Equação 4.19 e que a soma das probabilidades deve ser sempre igual a 1, temos que

$$\sigma^2 = \left(\sum_{j=1}^N A_j^2 \cdot P_j \right) - 2\mu^2 + \mu^2 = \left(\sum_{j=1}^N A_j^2 \cdot P_j \right) - \mu^2. \quad (4.24)$$

Já que o valor esperado de A equivale a μ e como já conhecemos a definição do $E(A^2)$ (veja a Equação 4.20), podemos estabelecer que a variância de um determinado experimento aleatório A é dada por

$$\sigma^2 = E(A^2) - [E(A)]^2. \quad (4.25)$$

Contudo, por uma questão de formalismo [11], o valor esperado é dado por

$$\langle A \rangle = \sum_{j=1}^N A_j \cdot P_j. \quad (4.26)$$

Sendo assim, podemos estabelecer que a definição ideal da variância é

$$\sigma^2 = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2. \quad (4.27)$$

Já o desvio-padrão é dado por

$$\sigma = \sqrt{\sigma^2} = \sqrt{\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2}. \quad (4.28)$$

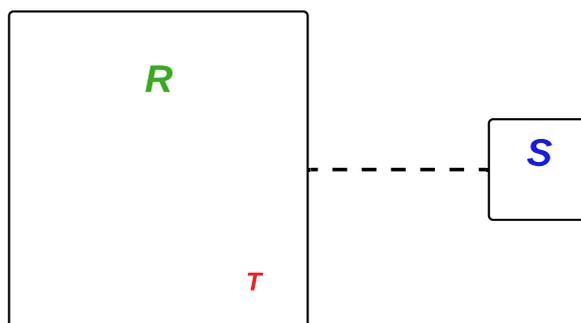
Logo, podemos estabelecer o erro-padrão, associado a estimativa do valor médio, como

$$\varepsilon = \sqrt{\frac{\sigma^2}{N}} = \frac{\sigma}{\sqrt{N}}. \quad (4.29)$$

4.2 Ensemble canônico

Considere um reservatório térmico (R) a uma temperatura T em contato com um sistema termodinâmico simples (S), por meio de uma parede diatérmica, fixa e impermeável. Se o reservatório R for muito maior que o sistema S (veja a Figura 17), então o número de graus de liberdade (Ω) que descreve R é muito maior que o de S [53]. Isto é, $\Omega_R \gg \Omega_S$.

Figura 17 – Sistema S em contato com o reservatório térmico R



Fonte: elaborado pelo autor a partir de [53].

Em sistemas ergódicos, se o sistema composto ($S + R$) estiver isolado, com energia total U_0 , e todos os seus microestados são igualmente prováveis, a probabilidade P_j de encontrar o sistema S em um determinado estado microscópico j é dada por

$$P_j = c \cdot \Omega_R(U_0 - U_j), \quad (4.30)$$

onde c é uma constante de normalização e U_j é a energia do sistema S no estado microscópico j . Como o reservatório térmico R é muito grande, então a energia U_j é muito menor do que a energia U_0 , para qualquer estado microscópico j [53]. Determinando o logaritmo da Equação 4.30, encontramos:

$$\ln(P_j) = \ln(c) + \ln\{\Omega_R(U_0 - U_j)\}. \quad (4.31)$$

O segundo postulado da Mecânica Estatística define a entropia como

$$S(U, V, M, N) = -k_B \sum_j P_j \ln(P_j), \quad (4.32)$$

onde k_B é a constante de Boltzmann. Contudo, é a seguinte definição, estabelecida pelo logaritmo de Ω , que possibilita a conexão do ensemble microcanônico com a entropia:

$$S(U, V, M, N) = k_B \ln\{\Omega(U, V, M, N)\}. \quad (4.33)$$

Substituindo essa definição na Equação 4.31, encontramos:

$$\ln(P_j) = \ln(c) + \frac{1}{k_B} S(U_0 - U_j). \quad (4.34)$$

Como o logaritmo de uma constante é outra constante ($\ln(c) = const$), então podemos reescrever a Equação 4.34 da seguinte forma:

$$\ln(P_j) = const + \frac{1}{k_B} S(U_0 - U_j). \quad (4.35)$$

Se expandirmos a Equação 4.35 em uma série de Taylor, em torno de U_0 , encontramos:

$$\ln(P_j) = const + \frac{1}{k_B} \left(\frac{\partial S}{\partial U} \right) (-U_j) + \frac{1}{k_B} \left(\frac{\partial^2 S}{\partial U^2} \right) (-U_j)^2 + \dots \quad (4.36)$$

Considerando a definição da Equação 3.19 e que a temperatura é constante ($T = T_R$), então temos que

$$\left(\frac{\partial^2 S}{\partial U^2} \right) = \frac{\partial}{\partial U} \left(\frac{1}{T} \right) = 0. \quad (4.37)$$

Logo, a Equação 4.36 se torna:

$$\ln(P_j) = \text{const} - \frac{1}{k_B T} U_j. \quad (4.38)$$

A Mecânica Estatística estabelece que o beta termodinâmico é definido pela seguinte notação:

$$\beta = \frac{1}{k_B T}. \quad (4.39)$$

Assim sendo,

$$\ln(P_j) = \text{const} - \beta U_j. \quad (4.40)$$

A função exponencial $y = e^x$ é a inversa da função logaritmo, isto é,

$$y = e^x \Leftrightarrow x = \ln(y). \quad (4.41)$$

Dessa forma, podemos reescrever a Equação 4.40 e obter a distribuição de Boltzmann:

$$P_j = \frac{e^{-\beta U_j}}{Z}, \quad (4.42)$$

onde Z é a constante de normalização.

Contudo, P_j é a probabilidade de encontrar o sistema S em apenas um estado microscópico j . Como S pode estar em qualquer estado microscópico j , então é necessário efetuar uma soma, em j , de P_j para encontrarmos a representação da **função de partição no ensemble canônico**:

$$Z = \sum_j e^{-\beta U_j}, \quad (4.43)$$

onde j é o índice de microestados do sistema e U_j representa a energia total do sistema no respectivo microestado j [53]. A partir de agora, iremos nos referir a função de partição canônica apenas como função de partição.

Logo, podemos definir a função de partição como a soma (sobre todos os estados microscópicos) que está associada à normalização da probabilidade P_j [53]. Ou seja, para um conjunto canônico clássico e discreto, a função de partição canônica é responsável por descrever as propriedades estatísticas do sistema no limite termodinâmico.

4.3 Análise canônica e grandezas de interesse

Como as transições de fase são caracterizadas por divergências, um método natural para determiná-las é através da análise dos picos e "ombros" nas funções termodinâmicas. Um sistema termodinâmico, com volume e temperatura constantes, pode ser descrito pela energia livre de Helmholtz, que se conecta com o ensemble canônico por meio da relação

$$F = -\frac{1}{\beta} \ln Z, \quad (4.44)$$

onde Z é a função de partição e β é o beta termodinâmico (Equação 4.39).

No limite termodinâmico, a energia interna U é igual ao valor esperado da energia $E(X)$ e pode ser escrita como

$$U = \langle E \rangle = \sum_i \frac{E(X_i) e^{-\beta E(X_i)}}{Z} = \sum_E \frac{E g(E) e^{-\beta E}}{Z}, \quad (4.45)$$

onde o primeiro somatório é feito para todas as configurações X_i e o segundo para todas as energias E , no qual $g(E)$ representa o número de estados com energia E . Como

$$Z = \sum_i e^{-\beta E(X_i)} = \sum_E g(E) e^{-\beta E}, \quad (4.46)$$

temos que

$$\frac{\partial Z}{\partial \beta} = - \sum_i E(X_i) e^{-\beta E(X_i)} = - \sum_E E g(E) e^{-\beta E}, \quad (4.47)$$

assim sendo,

$$U = -\frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta} = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta}. \quad (4.48)$$

Conforme vimos na Equação 3.34, em sistemas magnéticos é interessante trabalhar com a capacidade calorífica a campo magnético H constante,

$$C_H = \left(\frac{\partial Q}{\partial T} \right)_H. \quad (4.49)$$

Como $dQ = TdS$, temos que

$$C_H = T \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_H = \frac{1}{k_B \beta} \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_H. \quad (4.50)$$

A partir da Equação 4.39, temos que $T = 1/k_B\beta$, assim sendo $dT = (-1/k_B\beta^2)d\beta$, portanto

$$C_H = -\beta \left(\frac{\partial S}{\partial \beta} \right)_H. \quad (4.51)$$

Para a energia livre de Helmholtz a entropia é dada por

$$S = - \left(\frac{\partial F}{\partial T} \right)_H = k_B\beta^2 \left(\frac{\partial F}{\partial \beta} \right)_H, \quad (4.52)$$

considerando a Equação 4.44, temos que

$$S = k_B \ln Z - k_B\beta \left(\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} \right)_H. \quad (4.53)$$

Logo,

$$C_H = k_B\beta^2 \left(\frac{\partial^2 \ln Z}{\partial \beta^2} \right)_H = k_B\beta^2 \left[\sum_i \frac{E^2(X_i)e^{-\beta E(X_i)}}{Z} - \left(\sum_i \frac{E(X_i)e^{-\beta E(X_i)}}{Z} \right)^2 \right]. \quad (4.54)$$

Portanto, a capacidade calorífica pode ser vista como uma função da variância da energia, ou seja, mede a flutuação da energia. Logo,

$$C_H = k_B\beta^2 (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2) = k_B\beta^2 \sigma^2(E). \quad (4.55)$$

O calor absorvido (ou cedido) por (ou de) um sistema devido a um estímulo de temperatura por número de partículas é dado pelo calor específico, definido como

$$c_H = \frac{C_H}{N} = \frac{k_B\beta^2}{N} \left(\frac{\partial^2 \ln Z}{\partial \beta^2} \right)_H = \frac{k_B\beta^2}{N} (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2). \quad (4.56)$$

A susceptibilidade magnética pode ser calculada do mesmo modo, através da flutuação do parâmetro de ordem (magnetização) [18]. Sendo assim,

$$\chi_T = \frac{k_B\beta}{N} (\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2). \quad (4.57)$$

4.4 Método de Monte Carlo

O método de Monte Carlo foi proposto oficialmente pelo matemático Stanisław Marcin Ulam na Segunda Guerra Mundial (1939-1945), durante a sua participação no Projeto Manhattan ¹, no laboratório americano *Los Alamos* [95]. O desenvolvimento do método também contou com o apoio dos cientistas Jon von Neumann e Nicholas Constantine Metropolis. A ideia central do projeto era usar a aleatoriedade, isto é, o acaso para estimar informações de interesse a respeito da difusão de partículas em reação nuclear [96, 97, 98].

Por se tratar de um projeto secreto, Metropolis sugeriu utilizar o codinome "Monte Carlo" para a técnica; em referência aos jogos de azar de um famoso cassino de Mônaco, no qual o tio de Ulam jogava com dinheiro emprestado [97]. Logo, a simulação do método de Monte Carlo foi fundamental para resolver problemas de otimização e computar valores relacionados ao desenvolvimento da bomba de hidrogênio.

Em geral, o método de Monte Carlo é utilizado para solucionar alguns problemas, considerados demasiadamente complexos para resolver analiticamente. Ou também, para simular alguns fenômenos com incerteza significativa e determinados sistemas com um número muito elevado de graus de liberdade acoplados. Por este motivo, essa técnica é amplamente utilizada em diversos ramos da ciência, como: física, matemática, estatística, engenharia, finanças e negócios, entre outras. A estimativa numérica do valor de π (também conhecido como constante de Arquimedes) é um exemplo clássico do método de Monte Carlo.

4.4.1 Gerador de números pseudo-aleatórios

Conforme já adiantamos, os experimentos de Monte Carlo utilizam a aleatoriedade para estimar resultados numéricos. Essa aproximação é feita por meio de um espalhamento uniforme de pontos sorteados aleatoriamente. Se estes pontos não forem espalhados uniformemente, a aproximação pode ser considerada ruim. Além disso, a aproximação melhora à medida que a quantidade de pontos amostrados aumenta.

Um número aleatório pode ser definido como uma amostra independente de uma distribuição uniforme e contínua no intervalo $I = [0, 1]$ [91]. Além de serem aplicados em simulações de fenômenos físicos, os números aleatórios também são úteis: no processo de coleta de amostras de populações, na programação de computadores, na tomada de decisões, entre outros. Antes da computação moderna, os números aleatórios eram obtidos através de sorteios ou por meio de tabelas de números aleatórios já existentes.

¹ O Projeto Manhattan foi um empreendimento secreto americano, responsável pelo desenvolvimento das primeiras bombas atômicas funcionais ("*Little Boy*" e "*Fat Man*") que foram lançadas no Japão, especificamente sobre as cidades de Hiroshima e Nagasaki [94].

Contudo, a grande maioria dos computadores digitais contemporâneos não produz números verdadeiramente aleatórios. Tecnicamente, o que ocorre é a utilização de algoritmos para aproximar algumas propriedades das variáveis aleatórias. Uma vez que, a produção de um gerador de números aleatórios eficiente, que utilize métodos aritméticos, não é uma tarefa simples de ser implementada. O próprio Jon von Neumann, que foi um pioneiro dos geradores de números aleatórios por meio de computadores, acreditava que a produção de dígitos através de alguns métodos aritméticos não era completamente eficiente [99]. Esses números que "simulam" o comportamento dos números aleatórios são chamados de pseudo-aleatórios.

Gerar números pseudo-aleatórios é um processo rápido e de baixo custo computacional. Por este motivo, optou-se por utilizar o gerador de números pseudo-aleatórios proposto por George Marsaglia e Arif Zaman. As informações completas a respeito deste método aritmético podem ser consultadas em [100]. Assim como os demais geradores de números pseudo-aleatórios, este método aritmético precisa de pelo menos um valor inteiro para inicializar o processo de geração de uma sequência cíclica de números pseudo-aleatórios. Esse ponto exato de início é chamado de *seed* ("semente", em inglês). Neste trabalho, as sementes são geradas no algoritmo da simulação computacional (em linguagem de programação Fortran90) utilizando as informações vigentes de data e hora do computador, no momento da compilação do código, por meio da rotina *DATE_AND_TIME(date, time, zone, values)*. As informações detalhadas desta rotina podem ser consultadas em [101].

4.4.2 Médias termodinâmicas

O valor esperado de alguma propriedade termodinâmica A (por exemplo, magnetização e energia) pode ser obtido através de uma média ponderada de todos os estados de um sistema S , onde o peso é dado pela distribuição de Boltzmann:

$$\langle A \rangle = \sum_{j=1} A_j \cdot P_j = \sum_{j=1} A_j \cdot \frac{e^{-\beta U_j}}{Z}. \quad (4.58)$$

Como é impossível visitar todos os estados acessíveis do sistema, podemos utilizar o método de amostragem por importância (*importance sampling*) para determinar o valor esperado de cada grandeza de interesse. Esse método possibilita estimar o valor esperado de A , a partir de uma parte do sistema. Se sortearmos uma amostra das configurações do sistema, podemos substituir a soma de todos os estados possíveis do ensemble por uma soma das N configurações desta amostra:

$$\langle A \rangle \approx \sum_{j=1}^N A_j \cdot \frac{e^{-\beta U_j}}{Z}. \quad (4.59)$$

A estimativa do valor médio de A converge para o resultado exato quando a amostra for suficientemente grande, pois os estados significativos terão uma maior probabilidade de serem escolhidos. Tendo em vista que Z é uma constante de normalização, e a partir da Equação 4.43, podemos estabelecer que

$$\langle A \rangle \approx \frac{1}{Z} \cdot \sum_{j=1}^N A_j e^{-\beta U_j} \approx \frac{\sum_{j=1}^N A_j e^{-\beta U_j}}{\sum_{j=1}^N e^{-\beta U_j}}. \quad (4.60)$$

Se uma determinada configuração A_j é selecionada com uma probabilidade $P_j = e^{-\beta U_j}/Z$, podemos reescrever a estimativa da média canônica da seguinte forma:

$$\langle A \rangle \approx \frac{\sum_{j=1}^N A_j P_j^{-1} e^{-\beta U_j}}{\sum_{j=1}^N P_j^{-1} e^{-\beta U_j}} \approx \frac{\sum_{j=1}^N Z \cdot A_j}{\sum_{j=1}^N Z}. \quad (4.61)$$

Desse modo, a estimativa da média canônica de A pode ser escrita como uma média aritmética:

$$\langle A \rangle \approx \frac{\sum_{j=1}^N A_j}{N}. \quad (4.62)$$

É importante destacar que essa estimativa pode apresentar erros sistemáticos, se utilizarmos uma região restrita do espaço de configurações do sistema.

4.4.3 Cadeia de Markov

Um processo estocástico é definido como um conjunto (ou família) de variáveis aleatórias (discretas ou contínuas) definidas no mesmo espaço de probabilidade. O objetivo desta "coleção" de variáveis é estudar a evolução de um sistema ao longo do tempo. A propriedade de Markov (esse nome é em homenagem ao matemático Andrei Andreyevich Markov) estabelece que os estados anteriores não influenciam a predição dos estados seguintes, desde que o estado atual seja conhecido [102]. Desse modo, o processo estocástico é considerado markoviano se, e somente se, o estado futuro depende apenas do estado presente [103].

Um processo de tempo discreto é chamado de cadeia de Markov de tempo discreto ou finito enumerável, ou seja, a cadeia muda de estado em etapas de tempo discretas (t_1, t_2, \dots, t_n) [103, 104]. Já o processo de tempo contínuo é chamado de cadeia de Markov de tempo contínuo ou infinito enumerável, pois troca de estado continuamente no tempo [105, 106]. O interesse deste trabalho é discutir a aplicação da cadeia de Markov de tempo discreto na simulação de Monte Carlo.

Na cadeia de Markov de tempo discreto, a probabilidade de um estado X_{t_n} , no tempo t_n , mudar para qualquer estado possível $(x_{t_1}, x_{t_2}, \dots, x_{t_n})$ é dada por

$$P(X_{t_{n+1}} = x \mid X_{t_1} = x_{t_1}, X_{t_2} = x_{t_2}, \dots, X_{t_n} = x_{t_n}). \quad (4.63)$$

Como no processo markoviano a probabilidade condicional depende apenas do estado atual, então podemos reescrever a Equação 4.63 da seguinte maneira:

$$P(X_{t_{n+1}} = x \mid X_{t_n} = x_{t_n}). \quad (4.64)$$

Logo, a Equação 4.64 pode ser chamada de probabilidade de transição entre os estados x_{t_n} e $x_{t_{n+1}}$. Isto é,

$$W_{x_i \rightarrow x_j} = P(X_{t_{n+1}} = x_j \mid X_{t_n} = x_i). \quad (4.65)$$

As probabilidades de transição de um estado para outro imediatamente possível são mutuamente excludentes. Em função disso, as condições estabelecidas pelas Equações 4.3 e 4.7 podem ser aplicadas as probabilidades de transição. Isto é,

$$W_{x_i \rightarrow x_j} \geq 0; \sum_j W_{x_i \rightarrow x_j} = 1. \quad (4.66)$$

4.4.4 Equação mestra e balanço detalhado

A energia de um sistema, em um estado específico i , na simulação de Monte Carlo normalmente é representada por E_i . Logo, a probabilidade de um sistema ser encontrado no estado i é dada por P_i (essa probabilidade pode ser determinada através da Equação 4.2). A cadeia de Markov exerce um papel fundamental sobre a simulação de Monte Carlo, pois possibilita que quaisquer configurações para o estado seguinte j sejam escolhidas com certa probabilidade. Isto é, a probabilidade P_j do sistema ser encontrado no estado j , depende apenas da probabilidade P_i referente ao estado imediatamente anterior i . A probabilidade do sistema transicionar do estado i para o estado j é dada por $W_{ij} = W_{i \rightarrow j}$, enquanto a probabilidade de transição contrária é dada por $W_{ji} = W_{j \rightarrow i}$ [66].

Se $P(j, t)$ é a probabilidade de encontrar o sistema no estado j , no tempo t . A variação dessa probabilidade, no tempo t , é dada por [66]:

$$\frac{\partial}{\partial t} P(j, t) = - \sum_i P(j, t) W_{ji} + \sum_i P(i, t) W_{ij}. \quad (4.67)$$

Logo, a equação mestra é dada por [66]:

$$\frac{\partial}{\partial t}P(j, t) = - \sum_{i \neq j} [P(j, t)W_{ji} - P(i, t)W_{ij}]. \quad (4.68)$$

A função $P(j, t)$, nos estados estacionários, não deve ser uma função explícita do tempo [53]. Desse modo, a derivada parcial, em relação ao tempo, de qualquer propriedade desta função deve ser nula. Isto é, na situação de equilíbrio, a função $P(j, t)$ é inalterável no tempo [66]:

$$\frac{\partial}{\partial t}P_{eq}(j, t) = 0. \quad (4.69)$$

Consequentemente,

$$- \sum_{i \neq j} [P_{eq}(j, t)W_{ji} - P_{eq}(i, t)W_{ij}] = 0. \quad (4.70)$$

A Equação 4.70 possui várias soluções, em função disso a situação de equilíbrio é garantida apenas quando os termos do somatório se cancelam termo a termo. Portanto, podemos considerar como solução particular a condição onde a taxa de variação da probabilidade W_{ji} seja igual a taxa de variação da probabilidade W_{ij} . Isto é,

$$P_{eq}(j)W_{ji} = P_{eq}(i)W_{ij}. \quad (4.71)$$

Essa relação é chamada de Princípio do Balanço Detalhado (PBD) [66].

Logo, a taxa de transição W_{ij} precisa satisfazer o PBD para que se tenha uma distribuição de probabilidades em uma situação de equilíbrio. Por este motivo, podemos escolher $P_{eq}(j)$ como uma distribuição de Boltzmann, ou seja como uma probabilidade do j -ésimo estado ocorrer no equilíbrio. Ao estabelecer uma relação entre as Equações 4.42 e 4.71, a constante Z presente na Equação 4.42 é automaticamente cancelada. Portanto, a diferença de energia entre os dois estados (ΔE) é dada por [66]:

$$\Delta E = E_j - E_i. \quad (4.72)$$

Já a relação que satisfaz o balanço detalhado é dada por:

$$\frac{W_{ij}}{W_{ji}} = \frac{e^{-\beta E_j}}{e^{-\beta E_i}} = e^{-\beta \Delta E}. \quad (4.73)$$

O princípio do balanço detalhado é uma condição necessária e suficiente para se utilizar um algoritmo de Monte Carlo, porém não é o suficiente para que o sistema atinja o estado de equilíbrio de Boltzmann. Sendo assim, é preciso garantir um critério adicional, chamado de ergodicidade [15]. A ergodicidade garante que as médias em ensemble sejam iguais as médias no tempo, ou seja, é possível atingir qualquer microestado do sistema a partir de qualquer parte do espaço de configurações [15, 18]. Logo, podemos garantir a ergodicidade utilizando uma probabilidade diferente de zero para quaisquer configurações possíveis do sistema.

4.4.5 Algoritmo de Metropolis

O algoritmo de Metropolis foi criado pelo mesmo grupo de pesquisadores que desenvolveram o método de Monte Carlo, no início da década de 1950 [107]. Nesse algoritmo, todas as configurações possíveis são geradas de acordo com a distribuição de Boltzmann, por meio de uma sequência de mudanças randômicas entre os estados, até que a configuração final seja a de equilíbrio.

A taxa de transição W_{ij} , que satisfaz o princípio do balanço detalhado, deve permitir que as configurações mais prováveis do sistema tenham mais chance de ocorrer. Isto é, precisamos garantir que as configurações estacionárias energeticamente favoráveis sejam escolhidas. No algoritmo de Metropolis, as taxas de transição na simulação de Monte Carlo são escolhidas da seguinte forma:

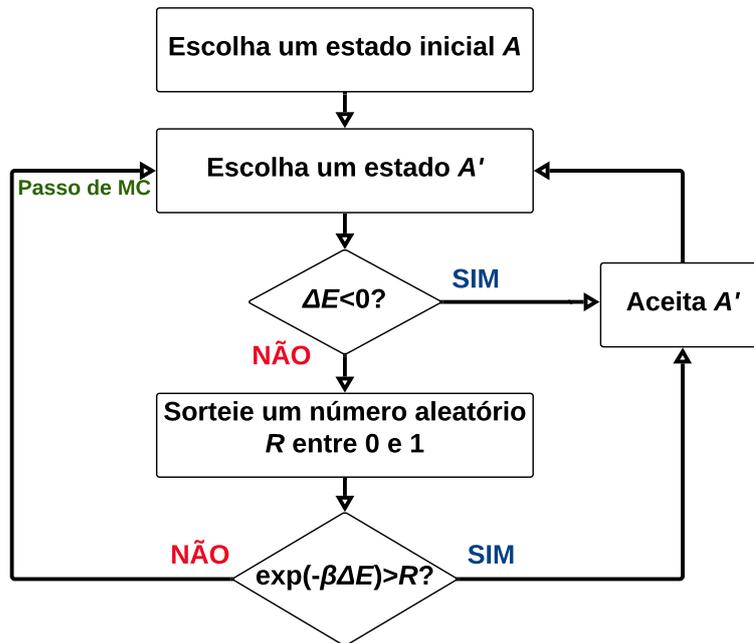
$$W_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{se } \Delta E < 0; \\ e^{-\beta\Delta E}, & \text{se } \Delta E > 0. \end{cases} \quad (4.74)$$

Como W_{ij} é uma grandeza diferente de zero para quaisquer estados possíveis, conseguimos obedecer a condição de ergodicidade. A Figura 18 ilustra a forma que o algoritmo de Metropolis deve ser implementado.

O primeiro passo da implementação é gerar uma configuração inicial (aleatória ou alinhada) em uma rede com $N = L^2$ sítios. Como exemplo, vamos considerar o modelo de *clock* 2D para $p = 2$, no qual os *spins* podem ocupar apenas os estados $S_i = \pm 1$ ("up" ou "down"). A Figura 19 (esquerda) ilustra a configuração inicial onde todos os *spins* estão alinhados para cima. Essa configuração inicial deve apresentar condições de contorno periódicas, conforme já discutimos no Capítulo 2. A energia do sistema no estado fundamental E_i é dada pela Equação 2.16.

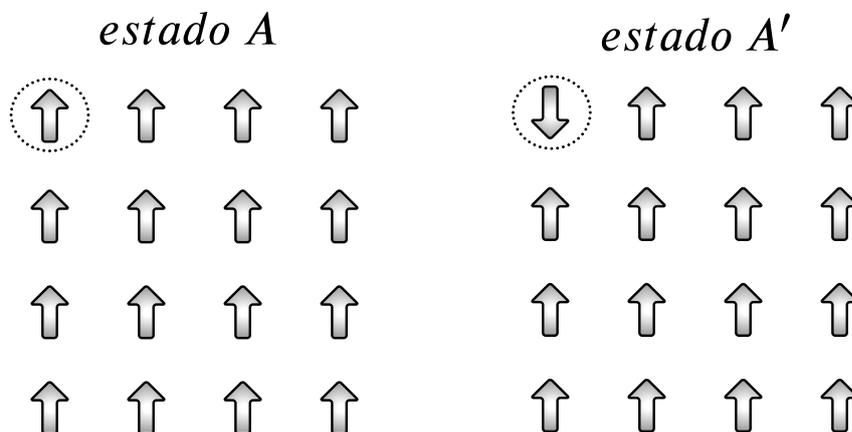
Para gerar uma nova configuração, mudamos a direção do *spin* no sítio i para baixo. A Figura 19 (direita) ilustra essa mudança. Visando otimizar a rotina computacional, optamos por atualizar a energia do sistema, na dinâmica da simulação, em termos de ΔE .

Figura 18 – Algoritmo de Metropolis



Fonte: elaborado pelo autor a partir de [107].

Figura 19 – Configuração inicial e primeira troca de estado do *spin*



Fonte: elaborado pelo autor.

Uma vez que, se já conhecemos E_i , é consideravelmente mais simples encontrar a nova energia do sistema por meio de $E_j = E_i + \Delta E$.

Na dinâmica do algoritmo de Metropolis para o modelo de *clock* de p -estados 2D, podemos considerar que θ_k é o ângulo do *spin* que irá mudar de estado. Logo, a variação

de energia ΔE pode ser reescrita da seguinte forma:

$$\Delta E = - \sum_{\langle i,j \rangle} \cos(\theta_j - \theta_i) - \sum_{\langle i,k \rangle} \cos(\theta_k - \theta_i), \quad (4.75)$$

onde θ_i representa os ângulos dos *spins* vizinhos mais próximos do *spin* que irá mudar de estado. Já θ_j é o ângulo do novo estado.

Se $\Delta E < 0$ para a nova configuração do sistema, então substituímos a antiga configuração do sistema por esta nova configuração. Contudo, se $\Delta E > 0$ verificamos se a mudança de estado pode ser aceita com uma probabilidade $P = e^{-\beta\Delta E}$. Além de determinar a probabilidade P ; neste instante do algoritmo de Metropolis também geramos um número aleatório R uniformemente distribuído no intervalo $[0, 1]$, utilizando o gerador de Marsaglia [100].

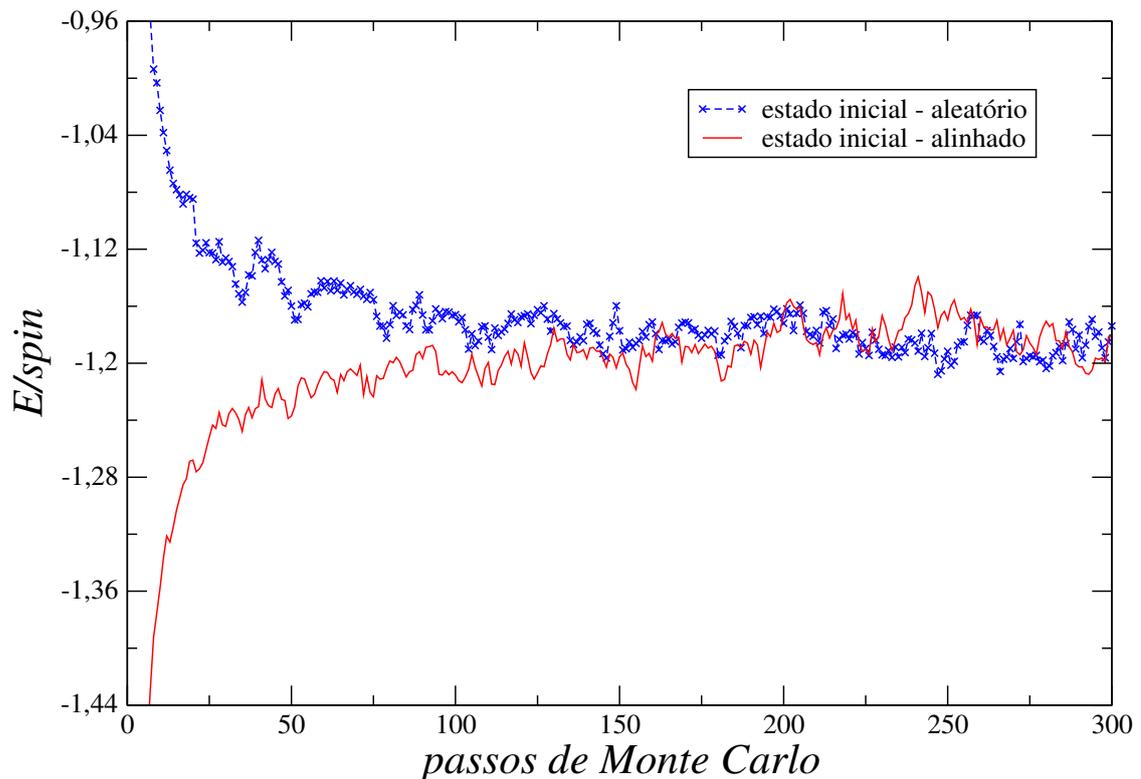
Se $R < e^{-\beta\Delta E}$, então aceitamos a nova configuração. Porém, se $R > e^{-\beta\Delta E}$, recusamos a nova configuração e geramos uma outra configuração, mudando o estado de um único *spin*. Um passo de Monte Carlo (MCS) só é computado quando todos os N *spins* da rede são visitados na dinâmica do algoritmo de Metropolis. Todo processo citado acima se repete durante um número "suficientemente grande" de passos de Monte Carlo, até que uma cadeia markoviana seja gerada obedecendo a condição do balanço detalhado e a hipótese de ergodicidade. Dessa forma, conseguimos garantir que o sistema convergirá para um sistema estacionário [68].

4.4.6 Grandezas de interesse via dinâmica de Monte Carlo

Sabemos que na simulação de Monte Carlo o sistema converge para o equilíbrio, obedecendo o princípio do balanço detalhado e a hipótese de ergodicidade. Contudo, as mudanças aleatórias dos estados da rede de *spins*, que ocorrem no início do algoritmo de Metropolis, acontecem de forma arbitrária e em um estado de não equilíbrio. Em função disso, é preciso descartar as primeiras configurações (ou os primeiros passos de Monte Carlo) para que o sistema entre em equilíbrio antes que as grandezas de interesse sejam computadas. Isso nos possibilita obter boas estimativas das medidas de interesse.

Para descobrirmos o número de configurações que devem ser descartadas, podemos simplesmente plotar um gráfico de algumas quantidades de interesse, como energia e magnetização, em função dos passos de Monte Carlo. A Figura 20 ilustra o comportamento da energia por *spin* em função de MCS, para o modelo de *clock* 2D com $p = 7$ estados possíveis e $H = 0$.

Para obter as duas curvas representadas na Figura 20 utilizamos uma rede de *spins* com tamanho $L = 100$ e uma temperatura igual a $T = 1,10 J|\vec{\sigma}|^2/k_B$. De acordo com [42, 48], essa temperatura está consideravelmente próxima da temperatura de transição

Figura 20 – Energia por *spin* em função de MCS

Fonte: elaborado pelo autor.

BKT do modelo de *clock* 2D para $p = 7$. A curva em vermelho (parte de baixo) representa o comportamento da energia do sistema, a partir de uma configuração inicial com os *spins* alinhados em uma mesma direção. Já a curva em azul (parte de cima) ilustra o comportamento da mesma grandeza, a partir de uma configuração inicial aleatória.

Se analisarmos a evolução da energia por *spin* para cada configuração inicial, percebemos que o sistema atinge o equilíbrio quando as duas curvas começam a flutuar em torno de um valor fixo. Sendo assim, é correto afirmar que o sistema entra em equilíbrio após percorrer um número fixo de passos de Monte Carlo, chamado de tempo de relaxação. À medida que o tamanho da rede cresce, o tempo de relaxação também cresce.

Neste trabalho, utilizamos $100L^2$ passos de Monte Carlo para garantir o equilíbrio do sistema e, então, medir e atualizar os valores de energia e de magnetização do sistema. A cada MCS ocorrem N seleções aleatórias de *spins* para tentar mudar de estado, caracterizando um processo de amostragem por importância. Logo, podemos seguir a ideia da Equação 4.62 para computar as médias da energia e da magnetização. As médias da magnetização quadrada e da energia quadrada também podem ser determinadas da mesma

forma:

$$U = \langle E \rangle = \frac{1}{MCS} \sum_{i=1}^{MCS} E_i; \quad (4.76)$$

$$U^2 = \langle E^2 \rangle = \frac{1}{MCS} \sum_{i=1}^{MCS} E_i^2; \quad (4.77)$$

$$\langle M \rangle = \frac{1}{MCS} \sum_{i=1}^{MCS} M_i; \quad (4.78)$$

$$\langle M^2 \rangle = \frac{1}{MCS} \sum_{i=1}^{MCS} M_i^2. \quad (4.79)$$

4.5 Zeros da função de partição

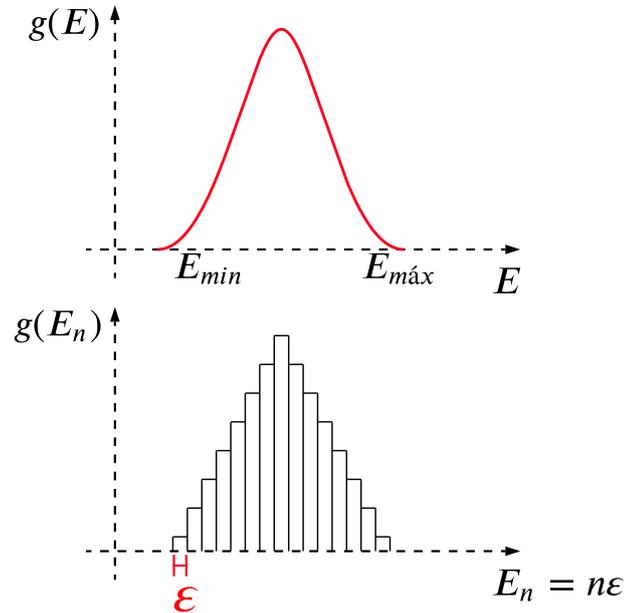
Sabemos que as transições de fase são pontos não analíticos da energia livre, uma vez que as transições são caracterizadas por descontinuidades e singularidades nas derivadas da energia livre (primeira e segunda derivadas da energia livre em relação a beta, respectivamente). A energia livre é proporcional ao log da função de partição. Como o *log* não é definido para zero, então uma função logarítmica ($y = \log_a x$) não é analítica nos pontos em que o domínio é igual a zero ($x = 0$). Portanto, podemos afirmar que as transições de fase são os pontos onde a função de partição é igual a zero.

A função de partição é uma soma de termos positivos. Logo, para entendermos como é possível uma soma de termos positivos ser igual a zero, precisamos utilizar a técnica de continuação analítica, ou seja, ampliar o domínio da função de interesse para todo o plano complexo. Como a função de partição canônica é uma função da temperatura, podemos fazer essa expansão permitindo que a temperatura seja uma variável complexa. A continuação analítica nos permite ter uma melhor compreensão do comportamento da função que estamos estudando, e então realizamos a projeção dessa função para os valores reais da imagem, onde originalmente nossa função foi definida.

Se considerarmos que o espaço de energia de um sistema discreto qualquer pode ser dividido em intervalos de energia ε , então um estado com energia $E_i < E < E_i + \varepsilon$ é contabilizado em $g_i = g(E_i)$. Uma vez que a densidade de estados está discretizada (em k intervalos de energia ε), a função de partição (Equação 4.43) pode ser facilmente escrita como um polinômio [108].

Se os intervalos da densidade de estados forem enumerados de 0 até $M - 1$, então a energia do j -ésimo intervalo é $E_j = E_0 + j\varepsilon$ (veja a Figura 21). Logo, podemos reescrever a Equação 4.46 como

Figura 21 – Histograma da densidade de estados



Fonte: elaborado pelo autor.

$$Z = e^{-\beta E_0} \sum_{j=0}^{M-1} g_j e^{-\beta j \epsilon}, \quad (4.80)$$

onde M é o número de intervalos. Definindo a variável $x \equiv e^{-\beta \epsilon}$ a função de partição, então, vai assumir a forma de um polinômio [109]. Logo,

$$Z = e^{-\beta E_0} \sum_{j=0}^{M-1} g_j x^j. \quad (4.81)$$

Se o último termo dessa relação for decomposto em fatores lineares encontramos [109]:

$$Z = e^{-\beta E_0} \prod_{k=0}^{M-1} (x - x_k), \quad (4.82)$$

onde x_k representa o k -ésimo zero (ou raiz) do polinômio. Essas raízes, comumente chamadas de zeros de Fisher, são complexas. Isto é, possuem a definição $x_k = a_k + ib_k$. Desse modo, possuem duas partes: a parte real [$Re(x_k) = a_k$] e a parte imaginária [$Im(x_k) = b_k$]. O parâmetro i corresponde a unidade imaginária ($i = \sqrt{-1}$), tal que $i^2 = -1$ [110, 111].

As raízes complexas podem ser representados pictoricamente por meio do plano de Argand-Gauss (também chamado de diagrama de Argand). Neste plano complexo, a parte

real $Re(x_k)$ é representada pela abcissa do plano cartesiano, enquanto a parte imaginária $Im(x_k)$ é representada pela ordenada [111].

Os zeros da função de partição descrita na Equação 4.82 carregam toda a informação contida na densidade de estados, ou seja, o conjunto de todos x_k ou todos g_n são equivalentes. Essa definição dos zeros de Fisher é capaz de cobrir todo o espaço de energia, ou seja, tanto valores positivos quanto negativos de energia. Além disso, os zeros ficam restritos ao círculo unitário. Matematicamente, se $T \rightarrow 0$ então $x \rightarrow 0$ e se $T \rightarrow \infty$ então $x \rightarrow 1$.

Considerando a função de partição escrita em fatores lineares, a energia livre pode ser escrita como

$$F = -k_B T \ln Z = E_0 - k_B T \sum_{k=0}^{M-1} \ln(x - x_k). \quad (4.83)$$

Uma vez que os zeros da função de partição foram determinados, podemos extrair as quantidades termodinâmicas de interesse em função deles. Por exemplo, a energia interna e o calor específico, respectivamente:

$$U = E_0 + \sum_{k=0}^{M-1} \left(\frac{\varepsilon x}{x - x_k} \right) = E_0 + \sum_{k=0}^{M-1} \left(\frac{\varepsilon x(x - a_k)}{(x - a_k)^2 + b_k^2} \right); \quad (4.84)$$

$$\begin{aligned} c_H &= \frac{k_B x (\ln x)^2}{N} \sum_{k=0}^{M-1} \left(\frac{-x_k}{(x - x_k)^2} \right) \\ &= \frac{k_B x (\ln x)^2}{N} \sum_{k=0}^{M-1} \left(\frac{-a_k(x - a_k)^2 + b_k^2(2x - a_k)}{[(x - a_k)^2 + b_k^2]^2} \right). \end{aligned} \quad (4.85)$$

Como $c_H > 0$, considerando uma situação em que $x \gg x_k$ para todo k , podemos afirmar que $\sum_k a_k < 0$.

Os zeros principais possuem a parte real positiva e a parte imaginária pequena. No limite termodinâmico esses zeros tendem para um valor real positivo. Além disso, dominam o calor específico próximo da transição, ou seja, se $x = |x_j| \approx a_j$ temos que $c_H \rightarrow \infty$. Assim sendo, pelo menos a princípio, a partir da definição da variável $x \equiv e^{-\beta\varepsilon}$, podemos dizer que

$$T_c = \frac{-\varepsilon}{k_B \ln |x_j|}. \quad (4.86)$$

Logo, a ideia básica deste método é encontrar os pontos de transição identificando os zeros principais.

4.5.1 Zeros da densidade de probabilidade

Existem algumas dificuldades para encontrar os zeros de Fisher, devido ao grau elevado do polinômio e às complicações geradas pela densidade de estados. Em função disso, este trabalho utiliza uma nova abordagem para contornar estes problemas, denominada zeros reduzidos. Multiplicando a Equação 4.46 por $1 = e^{-\beta_0 E} e^{\beta_0 E}$, encontramos:

$$Z = \sum_E g(E) e^{-\beta E} \cdot 1; \quad (4.87)$$

$$Z = \sum_E g(E) e^{-\beta E} \cdot e^{-\beta_0 E} e^{\beta_0 E}; \quad (4.88)$$

$$Z = \sum_E g(E) e^{-\beta_0 E} e^{-E(\beta - \beta_0)}. \quad (4.89)$$

Considerando a distribuição de probabilidade de Boltzmann não normalizada igual a $h(E, \beta_0) = g(E) e^{-\beta_0 E}$, temos que

$$Z_{\beta_0} = \sum_E h(E, \beta_0) e^{-E(\beta - \beta_0)}. \quad (4.90)$$

Discretizando a energia, $E_n = \varepsilon_0 + n\varepsilon$, e redefinindo $h(E, \beta_0) = h(E_n, \beta_0)$, encontramos:

$$Z_{\beta_0} = \sum_{E_n} h(E_n, \beta_0) e^{-E_n(\beta - \beta_0)}. \quad (4.91)$$

Se definirmos $h(E_n, \beta_0) = h(n, \beta_0)$ e $\Delta\beta = \beta - \beta_0$, temos que

$$Z_{\beta_0} = \sum_n h(n, \beta_0) e^{-\varepsilon_0 \Delta\beta} \cdot e^{-n\varepsilon \Delta\beta}. \quad (4.92)$$

Considerando $x = e^{-\varepsilon \Delta\beta}$, podemos reescrever essa relação na seguinte forma polinomial:

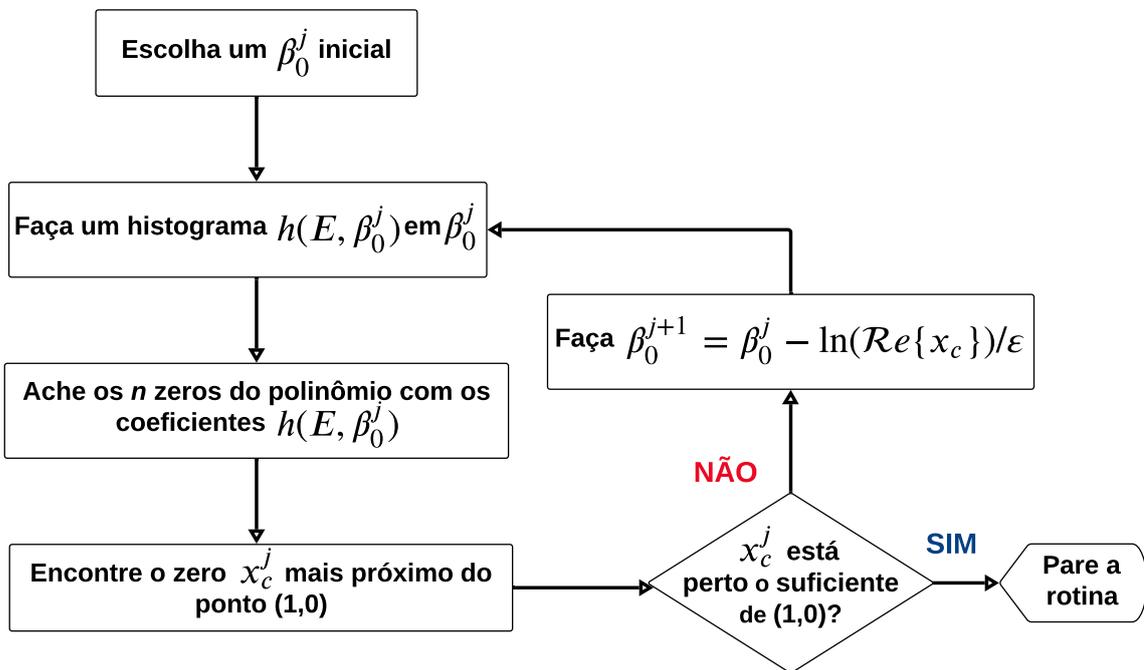
$$Z_{\beta_0} = \sum_n h(n, \beta_0) e^{-\varepsilon_0 \Delta\beta} \cdot x^n. \quad (4.93)$$

O termo $e^{-\varepsilon_0 \Delta\beta}$ é uma constante, portanto:

$$Z_{\beta_0} = e^{-\varepsilon_0 \Delta\beta} \cdot \sum_n h(n, \beta_0) x^n. \quad (4.94)$$

Os zeros encontrados através deste polinômio são os zeros de Fisher reescalados. Com isso, as características dos zeros são as mesmas, ou seja, continuam espalhados pelo plano complexo. Além disso, ao invés de explorarmos todo o espaço de configurações, como ocorre nos zeros de Fisher, podemos trabalhar com o espaço de configurações de interesse. O polinômio descrito na Equação 4.94 pode ser utilizado para identificar a raiz principal da função de partição, também chamada de zero principal ou dominante. Para isso, basta utilizarmos a rotina representada na Figura 22. β_0 é o beta termodinâmico inicial, isto é, refere-se a temperatura inicial da rotina.

Figura 22 – Rotina dos zeros reduzidos



Fonte: elaborado pelo autor a partir de [112].

Por meio do teorema fundamental da Álgebra um polinômio P , de uma variável x , com grau M possui M zeros, contando com as multiplicidades [113]. Se os coeficientes de P são reais ($g_j \in \mathfrak{R}$) e $x_k = a_k + ib_k$ é um zero de P , então seu complexo conjugado $x_{k'} = x_k^* = a_k - ib_k$ também é um zero de P . Além disso, se todos os coeficientes de P são positivos ($g_j > 0 \ \forall j$) então todos os zeros reais serão negativos². Ou seja, a função de partição não apresenta zeros reais positivos.

Por este motivo, ao estudar o mapa dos zeros da função de partição podemos observar que há um zero dominante que tende a "pinçar" o eixo real positivo. Ou seja, o comportamento esperado para sistemas finitos é que exista uma pequena parte imaginária

² Isso pode ser visto como uma solução trivial da regra de Descartes dos sinais, apresentada por [114]. Em particular, como $g_0 > 0$ então zero também não é uma raiz de Z .

que decresça à medida que o tamanho do sistema aumente. Esses zeros dominantes são capazes de indicar as transições de fase do sistema, já que no limite termodinâmico temos valores reais positivos para temperatura que zeram a função de partição e são portanto pontos de transição de fase.

5 Discussão dos Resultados

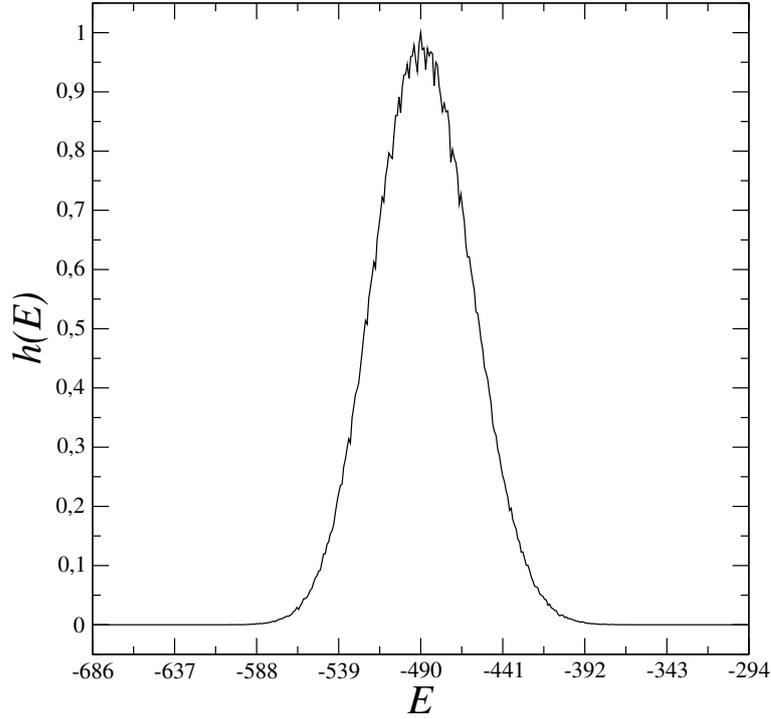
Neste capítulo serão apresentados os resultados obtidos em nosso trabalho. Mas antes disso, na seção 5.1, vamos discutir os detalhes do método utilizado para se definir o zero dominante para cada temperatura. Na seção 5.2 vamos discutir os efeitos observados nos mapas de zeros ao eliminar valores pequenos do histograma da densidade de estados por energia. Já na seção 5.3 apresentaremos o comportamento dos zeros reduzidos para os valores intermediários de $p \leq 7$, nos tamanhos de rede estudados ($L = 20, 30, 40, 50, 60, 70, 80$ e 90), e discutiremos a respeito do processo de convergência dos zeros dominantes. Na seção 5.4 vamos apresentar a análise de tamanho finito utilizada para descobrir as temperaturas e expoentes críticos. Ainda na seção 5.4, apresentaremos o diagrama de fases no espaço $T_c \times p$ do modelo de *clock* 2D a campo externo nulo.

5.1 Parâmetros para obter o zero dominante

Para obter resultados satisfatórios, foram feitas simulações computacionais para diferentes tamanhos do sistema. Ou seja, os resultados que serão apresentados mais adiante, foram obtidos através de redes quadradas com tamanhos L entre 20 e 90. A rotina computacional usada para encontrar os zeros reduzidos se inicia com uma temperatura $T_j = 3,0J|\vec{\sigma}|^2/k_B$, ou seja, com o sistema na fase desordenada. O algoritmo desenvolvido, em linguagem Fortran90, para obter os zeros reduzidos está descrito no Apêndice A.

Após o sistema entrar em equilíbrio por meio do processo de termalização, a rotina computacional percorre 10^6 passos de Monte Carlo para obter os valores de densidade de estados por energia que compõem o histograma $h(E)$. Os coeficientes polinomiais que compõem qualquer histograma $h(E)$ são sempre reais positivos. Além disso, este histograma é normalizado em $[0, 1]$ para então determinar as raízes do polinômio. A temperatura é atualizada por meio da rotina numérica descrita na Figura 22. Na Figura 23 temos o histograma de energias do sistema para $p = 5$, referente a uma rede com tamanho $L = 20$ e $T_j = 1,10J|\vec{\sigma}|^2/k_B$.

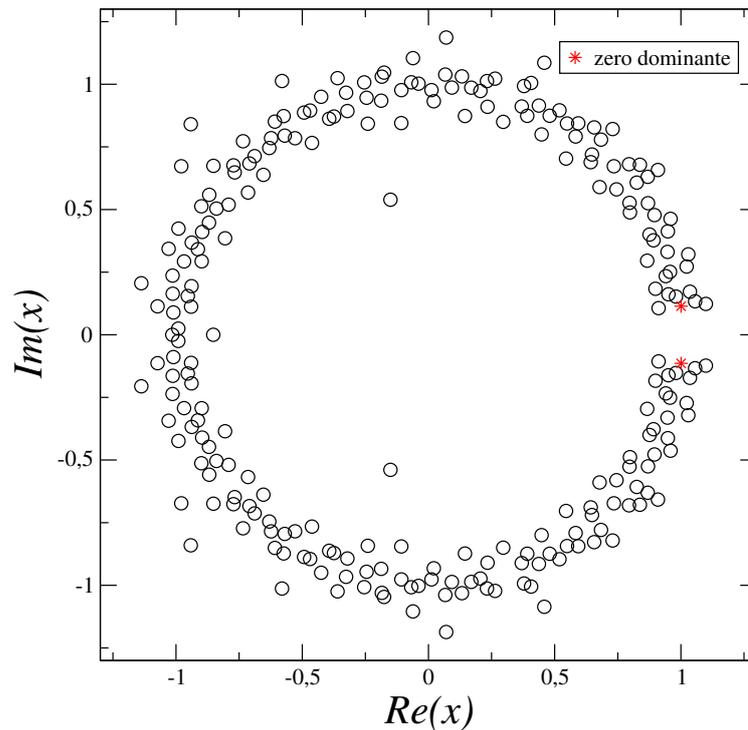
O número de intervalos que dividimos o espaço de energia dá a ordem do polinômio que descreve a função de partição, ou seja, pode chegar facilmente a ordem de 10^4 ou acima. Como polinômios de ordem maior ou igual a cinco não possuem raízes algébricas, como atestado pelo teorema de Abel-Ruffini e demonstrado em [115], precisamos utilizar um método numérico para encontrá-las. Esse método deve ser eficiente devido ao tamanho do polinômio em questão.

Figura 23 – Histograma para $p = 5$ e $L = 20$, em $T_j = 1, 10J|\bar{\sigma}|^2/k_B$ 

Fonte: elaborado pelo autor.

Para encontrar os zeros reduzidos da função de partição, utilizamos o *software open source* Multiprecision Polynomial SOLVER (MPSolve) na versão 3.2.1 [116, 117, 118]. Este *software* utiliza o método Aberth-Ehrlich [119, 120] para localizar as raízes de um polinômio. Logo, esta ferramenta realiza uma aproximação simultânea de todas as raízes do polinômio com uma determinada precisão [121]. Na Figura 24 temos o mapa dos zeros reduzidos referente ao histograma $h(E)$ da Figura 23. Caracterizamos como zero dominante (ou a raiz principal), os pares conjugados que mais se aproximam da parte positiva da abscissa. O zero dominante ilustrado no mapa de zeros da Figura 24 encontra-se no ponto $x_c = (1, 0007, 0, 1140)$.

O MPSolve realiza a leitura de um arquivo contendo os coeficientes da equação polinomial e determina as raízes a partir de algumas configurações determinadas pelo próprio usuário [118]. Como os coeficientes do polinômio que compõem $h(E)$ são números reais, configuramos a dinâmica do MPSolve para realizar operações com esse tipo de dados. Além disso, como estes coeficientes são números de ponto flutuante binário 64 IEEE padrão, utilizamos uma precisão de 53 bits destes valores de entrada. O algoritmo foi configurado para aproximar as raízes complexas. Também definimos que a entrada dos coeficientes do polinômio é dada na base monomial, ou seja, foram inseridos $n + 1$ coeficientes no arquivo de entrada, sendo n o grau do polinômio. Os coeficientes foram listados em ordem crescente de grau no arquivo de entrada do MPSolve.

Figura 24 – Zeros reduzidos referente ao $h(E)$ da Figura 23

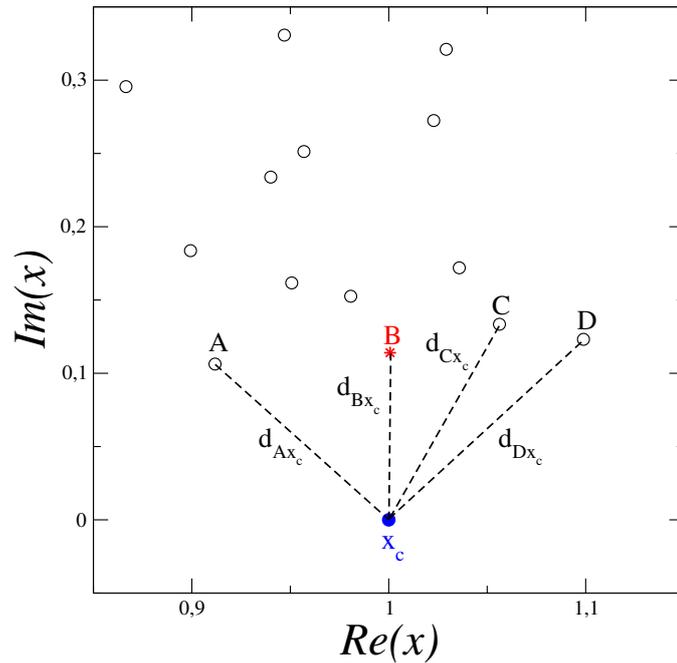
Fonte: elaborado pelo autor.

Conforme o tamanho da rede aumenta, a quantidade de raízes complexas aumenta significativamente, dificultando a identificação da raiz principal. Em função disso, é primordial utilizar uma ferramenta numérica para localizar o zero dominante. Pensando nisso, na rotina computacional calculamos a distância entre o ponto $x_c = (1, 0)$ e cada ponto presente no primeiro quadrante do plano complexo. A distância entre dois pontos quaisquer A e B é definida como

$$d_{AB} = \sqrt{(x_B - x_A)^2 + (y_B - y_A)^2}. \quad (5.1)$$

A Figura 25 mostra a distância entre o ponto x_c e alguns pontos mais próximos, pertencentes ao mapa de zeros da Figura 24.

Todos os resultados obtidos são comparados, até encontrar a menor distância e, então, o zero dominante respectivo. Após esse processo, a rotina computacional inicia todo o processo novamente, para uma nova temperatura.

Figura 25 – Distâncias entre o ponto $x_c = (1, 0)$ e os pontos mais próximos

Fonte: elaborado pelo autor.

5.2 Corte no histograma $h(E)$

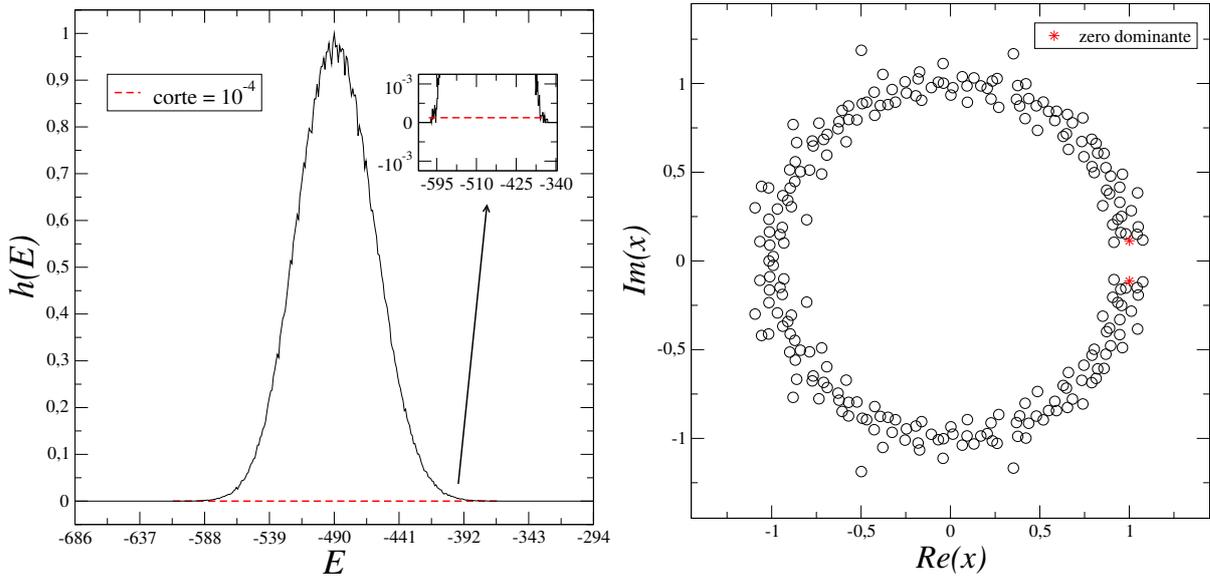
Se desprezarmos alguns coeficientes do polinômio, podemos reduzir o número de raízes a serem encontradas. Contudo, é importante analisar até que ponto podemos realizar um corte em $h(E)$, sem que algumas informações relevantes sejam descartadas. Pensando nisso, optamos por estudar o comportamento dos zeros reduzidos, para os pontos de corte de 10^{-1} , 10^{-2} , 10^{-3} e 10^{-4} . Para uma melhor exemplificação, iremos discutir a seguir sobre os efeitos do corte no histograma ilustrado na Figura 23.

Na Figura 26 temos o comportamento dos zeros reduzidos para um corte de 10^{-4} no histograma de energias. Ao descartar todos os valores de $h(E)$ menores que 10^{-4} , foram obtidas 235 raízes ao todo. O zero dominante para esse tamanho de corte permanece no ponto $x_c = (1,0007, 0,1140)$ do plano complexo.

Já na Figura 27 podemos ver o comportamento dos zeros reduzidos para um corte de 10^{-3} . Para esse tamanho de corte no histograma $h(E)$, o número de raízes obtidas foi igual a 206. A raiz principal está localizada no ponto $x_c = (1,0006, 0,1133)$. Ao desprezar todos os valores de $h(E)$ menores que 10^{-2} , foram obtidas 171 raízes ao todo. A raiz principal está localizada no ponto $x_c = (0,9977, 0,1162)$. A Figura 28 ilustra o mapa de zeros reduzidos referente a tal redução nos coeficientes do polinômio.

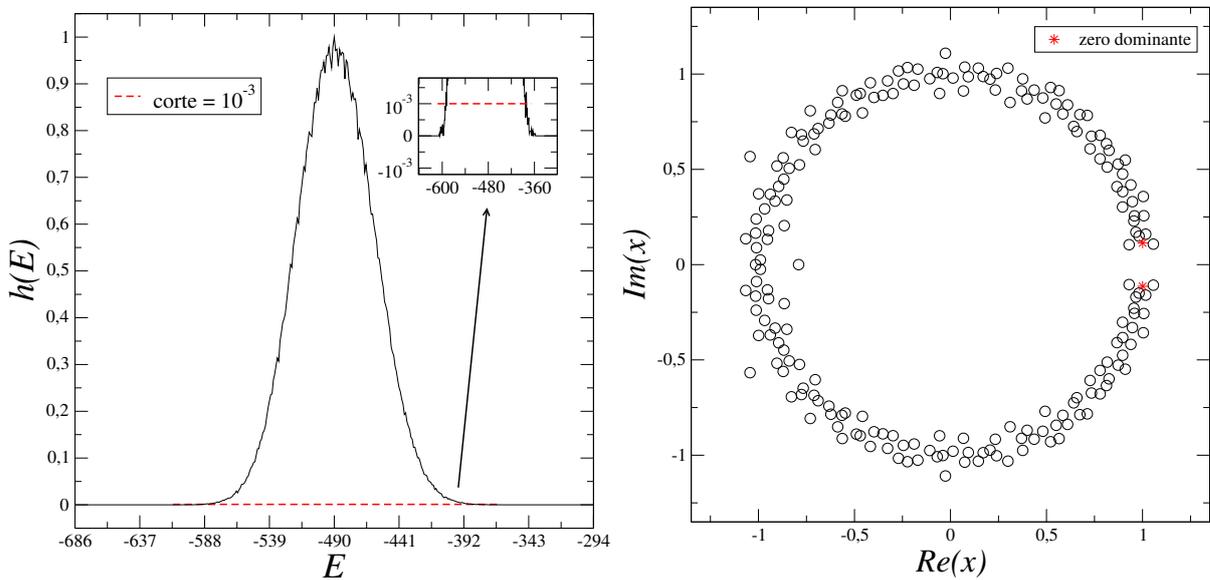
Na Figura 29 podemos ver o efeito que o corte de 10^{-1} em $h(E)$ provoca nos zeros reduzidos. Após descartar os valores de $h(E)$ menores que 10^{-1} , encontramos 123 raízes

Figura 26 – Efeito do corte de 10^{-4} no histograma $h(E)$ para $L = 20$



Fonte: elaborado pelo autor.

Figura 27 – Efeito do corte de 10^{-3} no histograma $h(E)$ para $L = 20$

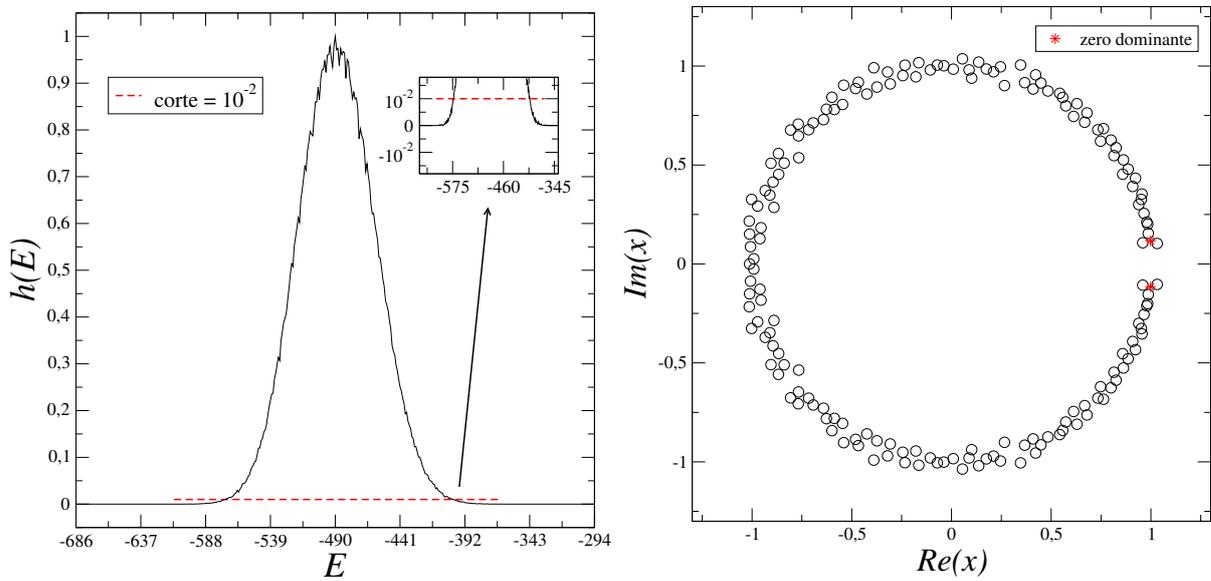


Fonte: elaborado pelo autor.

no plano complexo. O zero dominante se encontra no ponto $x_c = (1, 0,0912)$.

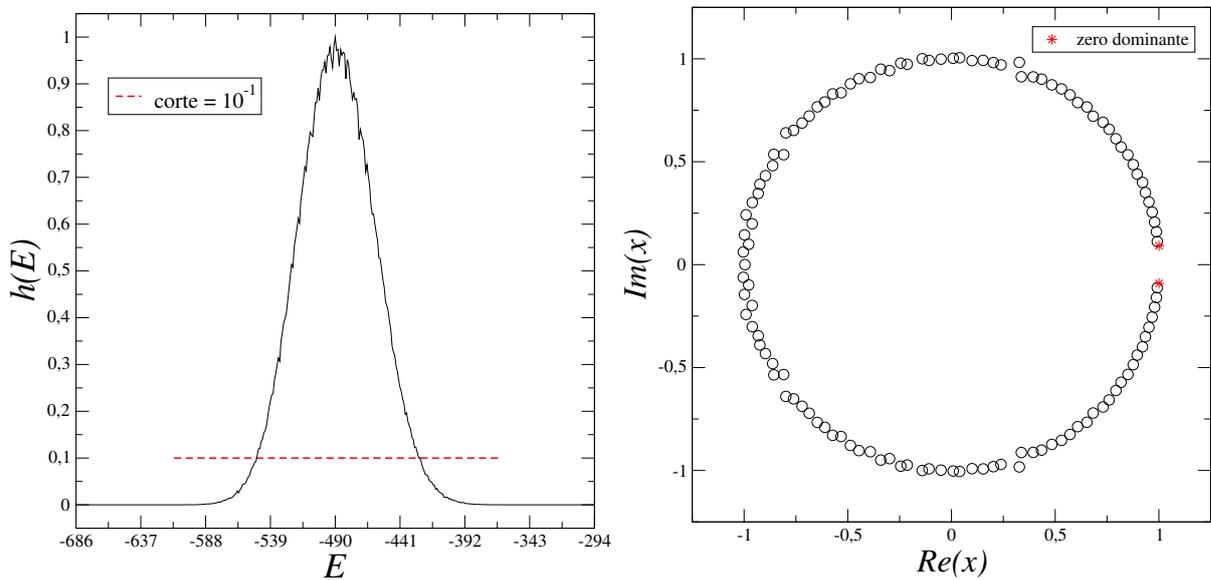
Conforme o tamanho do corte no histograma aumenta, o número de zeros reduzidos diminui consideravelmente no plano complexo. Em contrapartida, percebemos que o zero dominante apresenta uma certa estabilidade, no que diz respeito a sua localização. Com valores de corte maiores que 10^{-1} , teremos uma mudança na posição da raiz principal

Figura 28 – Efeito do corte de 10^{-2} no histograma $h(E)$ para $L = 20$



Fonte: elaborado pelo autor.

Figura 29 – Efeito do corte de 10^{-1} no histograma $h(E)$ para $L = 20$



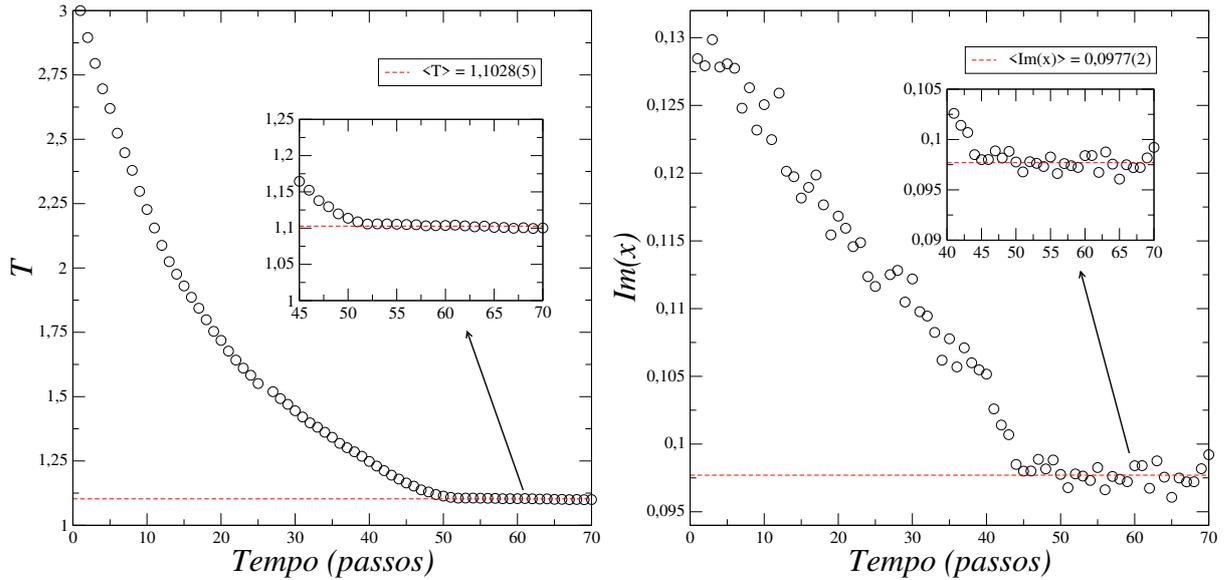
Fonte: elaborado pelo autor.

porque a parte imaginária irá aumentar significativamente. Sendo assim, optamos por aplicar um corte de 10^{-1} nos histogramas de energia, para em seguida determinar os zeros reduzidos para cada temperatura.

5.3 Convergência do algoritmo

A rotina numérica utilizada para encontrar o zero dominante (ilustrada na Figura 22) comporta-se de forma indefinida. Por causa disso, precisamos estabelecer um critério de finalização. O critério utilizado neste trabalho foi $|T_{j+1} - T_j| < 10^{-3}$. Na Figura 30 à esquerda podemos ver o processo de convergência da temperatura para $p = 7$ e $L = 20$.

Figura 30 – Processo de convergência para $p = 7$ e $L = 20$



Fonte: elaborado pelo autor.

Além desse critério de finalização do algoritmo, também poderíamos ter usado a diferença da parte imaginária. Na Figura 30 à direita podemos ver o processo de convergência da parte imaginária da raiz principal para $p = 7$ e $L = 20$. Optamos por apresentar a convergência para $p = 7$ porque esse processo se mostrou mais lento para este valor intermediário de p .

Logo após 50 passos de Monte Carlo, os valores de $Im(x_c)$ começam a oscilar em torno do valor pseudo-crítico da parte imaginária do zero dominante (isso também ocorre com a temperatura). Quando nos aproximamos da temperatura pseudo-crítica, espera-se que o valor de $Im(x_c)$ seja consideravelmente próximo de zero. O comportamento que vemos na Figura 30 à direita corrobora com este efeito esperado.

A parte imaginária de x_c para $p = 3$ é menor do que os valores de $Im(x_c)$ dos demais valores intermediários de p . Na Figura 31 podemos ver o comportamento dos zeros reduzidos para $p = 3$ nos tamanhos de rede $L = 20$ (esquerda) e $L = 90$ (direita). Para uma melhor visualização, optamos por apresentar uma ampliação do comportamento dos zeros reduzidos na proximidade do ponto $x_c = (1, 0)$ para cada tamanho de rede L estudado. Na Figura 32 podemos ver o comportamento dos zeros reduzidos para $p = 2, 3$

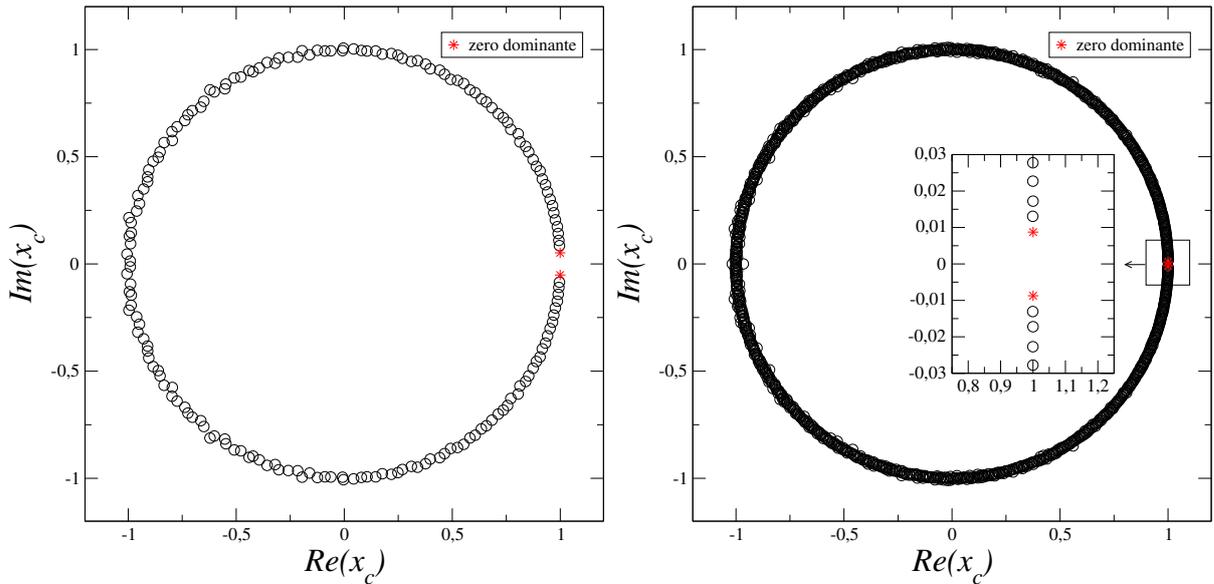
Tabela 2 – Zeros reduzidos e temperaturas pseudo-críticas para $p \leq 4$

L	$p = 2$			$p = 3$			$p = 4$		
	$Re(x_c)$	$Im(x_c)$	T_c	$Re(x_c)$	$Im(x_c)$	T_c	$Re(x_c)$	$Im(x_c)$	T_c
20	1,0001	0,1579	2,2994	0,9992	0,0515	1,5151	0,9981	0,1228	1,1495
30	1,0012	0,1023	2,2908	1,0007	0,0307	1,5048	0,9991	0,0775	1,1464
40	1,0009	0,0754	2,2876	1,0008	0,0221	1,5014	0,9994	0,0572	1,1415
50	1,0007	0,0599	2,2842	1,0000	0,0168	1,5005	1,0004	0,0435	1,1405
60	1,0000	0,0487	2,2829	0,9991	0,0137	1,4994	1,0016	0,0362	1,1399
70	0,9999	0,0416	2,2804	0,9997	0,0110	1,4978	0,9999	0,0308	1,1403
80	0,9999	0,0362	2,2802	0,9993	0,0094	1,4975	0,9988	0,0267	1,1410
90	1,0007	0,0315	2,2775	1,0003	0,0087	1,4963	0,9993	0,0243	1,1407

Fonte: elaborado pelo autor.

e 4 em $L \geq 20$. Os resultados de x_c e da temperatura pseudo-crítica obtidos para esses valores intermediários de p estão descritos na Tabela 2.

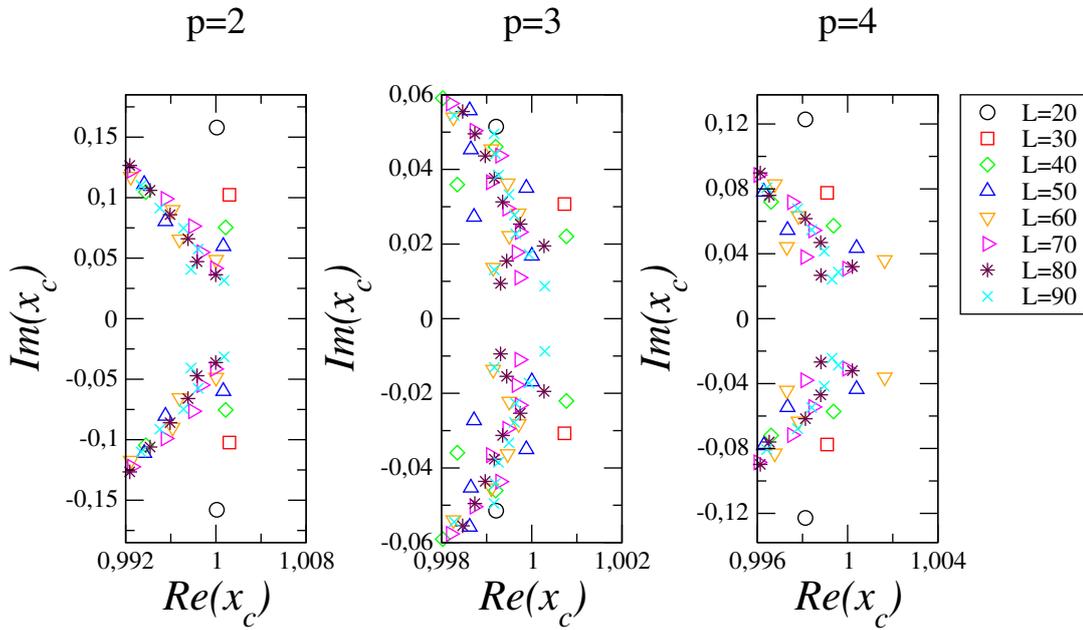
Figura 31 – Zeros reduzidos para $p = 3$ em $L = 20$ (esquerda) e $L = 90$ (direita)



Fonte: elaborado pelo autor.

Como para $p \geq 5$ acreditávamos que existiam duas transições de fase, verificamos se a dinâmica da simulação convergia para as duas temperaturas pseudo-críticas T_1 e T_2 , com as mesmas condições e tamanhos de rede L , em instantes distintos. Sendo assim, para obter a temperatura pseudo-crítica T_2 foi necessário iniciar a rotina novamente com um valor de temperatura inferior a temperatura pseudo-crítica T_1 . A Figura 33 ilustra o comportamento dos zeros reduzidos para $p = 5, 6$ e 7 , em relação ao tamanho de rede L para a temperatura de transição T_1 . Os resultados obtidos para esses valores intermediários de p podem ser vistos na Tabela 3. Já na Figura 34 podemos ver o comportamento dos zeros reduzidos para $p = 5, 6$ e 7 na temperatura pseudo-crítica T_2 . Os resultados de x_c

Figura 32 – Mapa de zeros para $p \leq 4$ para $L \geq 20$



Fonte: elaborado pelo autor.

Tabela 3 – Zeros reduzidos e temperaturas pseudo-críticas para $p \geq 5$ em T_1

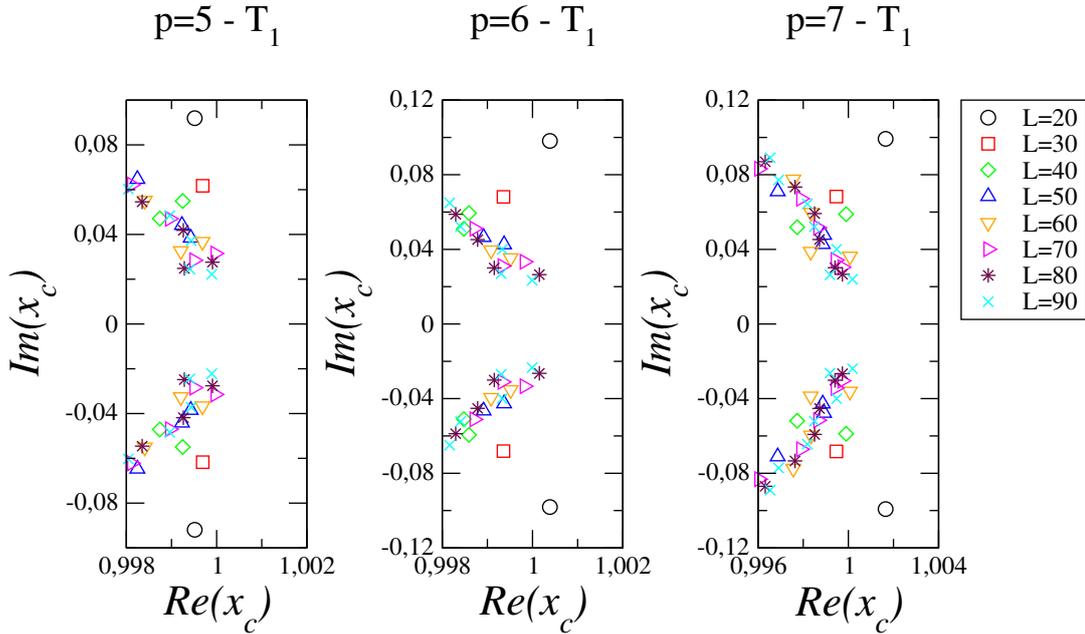
L	$p = 5$			$p = 6$			$p = 7$		
	$Re(x_c)$	$Im(x_c)$	T_c	$Re(x_c)$	$Im(x_c)$	T_c	$Re(x_c)$	$Im(x_c)$	T_c
20	0,9995	0,0919	1,0995	1,0004	0,0981	1,0952	1,0017	0,0992	1,1001
30	0,9997	0,0617	1,0809	0,9994	0,0681	1,0754	0,9995	0,0683	1,0794
40	0,9987	0,0471	1,0679	0,9985	0,0510	1,0745	0,9977	0,0519	1,0785
50	0,9994	0,0385	1,0647	0,9994	0,0426	1,0623	0,9989	0,0427	1,0778
60	0,9992	0,0326	1,0612	0,9995	0,0354	1,0625	1,0001	0,0362	1,0783
70	0,9995	0,0285	1,0610	0,9993	0,0310	1,0627	0,9997	0,0304	1,0777
80	0,9993	0,0248	1,0604	1,0002	0,0265	1,0622	0,9997	0,0267	1,0779
90	0,9999	0,0222	1,0594	0,9999	0,0234	1,0623	1,0002	0,0240	1,0785

Fonte: elaborado pelo autor.

e da temperatura pseudo-crítica, em relação ao tamanho de rede L , estão descritos na Tabela 4. A incerteza em cada valor obtido está na quarta casa decimal.

Os resultados apresentados nas Tabelas 2 a 4 mostram que de fato o eixo real do plano complexo é "pinçado" pelo zero dominante. Uma vez que, a parte imaginária de x_c apresenta um comportamento de redução em função do aumento do sistema. Além disso, percebeu-se que conforme que o sistema é ampliado, maior é o custo e esforço computacional para obter os zeros reduzidos da função de partição.

Figura 33 – Mapa de zeros para $p \geq 5$ em T_1 para $L \geq 20$



Fonte: elaborado pelo autor.

Tabela 4 – Zeros reduzidos e temperaturas pseudo-críticas para $p \geq 5$ em T_2

L	$p = 5$			$p = 6$			$p = 7$		
	$Re(x_c)$	$Im(x_c)$	T_c	$Re(x_c)$	$Im(x_c)$	T_c	$Re(x_c)$	$Im(x_c)$	T_c
20	0,9995	0,1230	0,8270	0,9948	0,1878	0,5924	0,9797	0,2611	0,4379
30	1,0012	0,0838	0,8294	1,0002	0,1289	0,5922	0,9927	0,1771	0,4362
40	0,9998	0,0627	0,8301	1,0026	0,0989	0,5930	0,9957	0,1352	0,4364
50	1,0014	0,0495	0,8305	0,9997	0,0770	0,5934	0,9997	0,1077	0,4365
60	0,9992	0,0426	0,8315	1,0016	0,0643	0,5938	0,9999	0,0919	0,4365
70	1,0002	0,0355	0,8316	1,0007	0,0557	0,5945	0,9994	0,0780	0,4367
80	1,0002	0,0308	0,8320	1,0002	0,0486	0,5949	0,9997	0,0688	0,4370
90	1,0004	0,0276	0,8324	1,0004	0,0431	0,5951	0,9997	0,0604	0,4371

Fonte: elaborado pelo autor.

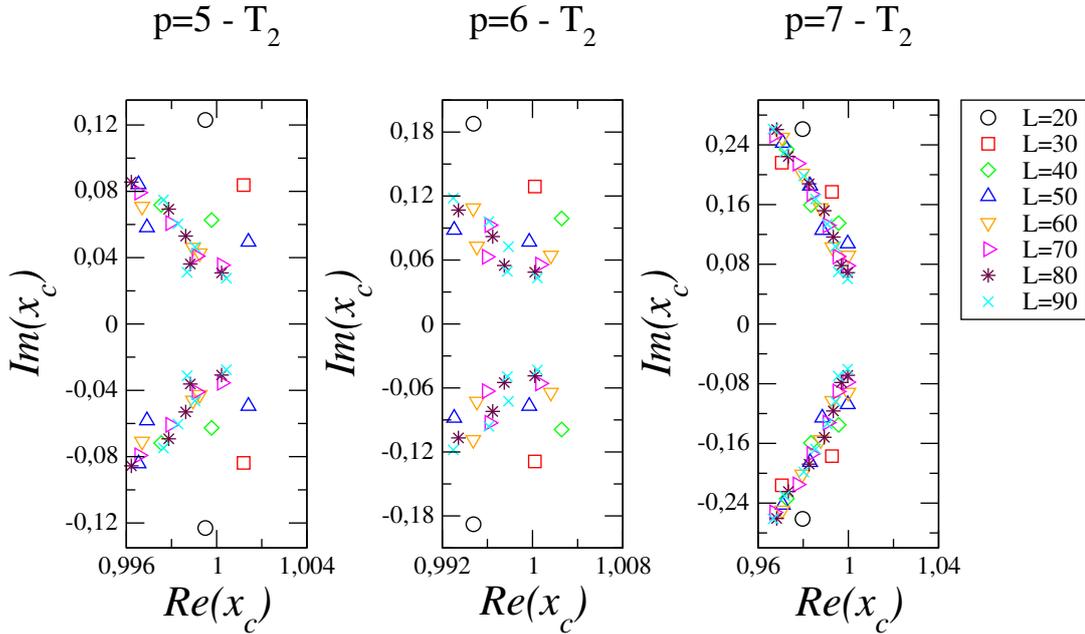
5.4 Expoentes críticos

Devido a relação com a temperatura, a parte imaginária do zero principal x_c segue a seguinte lei de escala próximo da temperatura de transição:

$$Im(x_c^L) \sim Im(x_c) + wL^{-1/\nu}. \quad (5.2)$$

A parte real da raiz principal tende a um valor igual a um, próximo da temperatura de transição. Em função disso, os valores de $Re(x_c)$ não podem escalar com a lei descrita na Equação 5.2. Por este motivo, utilizamos apenas os valores de $Im(x_c)$ para encontrar o expoente crítico ν da transição de fase. Logo, precisamos realizar um ajuste linear no

Figura 34 – Mapa de zeros para $p \geq 5$ em T_2 para $L \geq 20$



Fonte: elaborado pelo autor.

gráfico log-log dos valores de $Im(x_c)$ pelo tamanho da rede L . O resultado esperado para a classe de universalidade Ising é $\nu = 1,0$. Na Figura 35 podemos ver esse ajuste linear para os valores de $p \geq 2$. Os valores de ν obtidos pela inclinação do ajuste estão descritos na Tabela 5.

Tabela 5 – Valores de $1/\nu$ para $p \geq 2$

p -estado	$1/\nu$
$p = 2$	$1,073 \pm 0,003$
$p = 3$	$1,211 \pm 0,003$
$p = 4$	$1,086 \pm 0,005$
$p = 5 - T_1$	$0,934 \pm 0,005$
$p = 5 - T_2$	$0,985 \pm 0,002$
$p = 6 - T_1$	$0,93 \pm 0,01$
$p = 6 - T_2$	$0,975 \pm 0,006$
$p = 7 - T_1$	$0,935 \pm 0,009$
$p = 7 - T_2$	$0,971 \pm 0,005$

Fonte: elaborado pelo autor.

Para encontrar a temperatura crítica e os expoentes críticos das transições de fase, foi feita a coleta de cinco valores de $Im(x_c)$, calor específico, susceptibilidade magnética, magnetização e temperatura pseudo-crítica para cada tamanho de rede. Isto é, a rotina computacional foi executada cinco vezes, com as mesmas condições, para os diferentes tamanhos de rede L ($L = 20$ a $L = 90$). As barras de erro de cada ponto (ou seja, para cada L), apresentadas nos ajustes lineares são então o erro-padrão referente as amostras

dessas grandezas associadas a raiz principal.

Após encontrar os valores do expoente crítico ν para cada valor intermediário de p , podemos utiliza-los para encontrar as temperaturas críticas. Para obter o valor de T_c precisamos realizar um ajuste linear no gráfico das temperaturas pseudo-críticas em função de $L^{-1/\nu}$. Nas Figuras 36 e 37 temos tal ajuste para $p \geq 2$. Para $p = 2$ descartamos o ponto referente ao tamanho de rede $L = 20$, para realizar o ajuste na região de comportamento linear. Para encontrarmos a temperatura crítica T_1 para $p = 5$ e $p = 7$ descartamos os pontos referentes a $L = 20$ e $L = 30$. Já para $p = 6$, descartamos os pontos para $L = 20, 30$ e 40 para obter T_1 e os pontos $L = 20$ e $L = 30$ para encontrar a temperatura crítica T_2 . Na Tabela 6 temos as temperaturas críticas encontradas para cada valor intermediário de p .

Tabela 6 – Valores de T_c para $p \geq 2$

p -estado	T_c
$p = 2$	$2,2730 \pm 0,0005$
$p = 3$	$1,4931 \pm 0,0001$
$p = 4$	$1,1380 \pm 0,0002$
$p = 5 - T_1$	$1,0527 \pm 0,0009$
$p = 5 - T_2$	$0,8329 \pm 0,0002$
$p = 6 - T_1$	$1,0637 \pm 0,0001$
$p = 6 - T_2$	$0,59 \pm 0,03$
$p = 7 - T_1$	$1,0709 \pm 0,0006$
$p = 7 - T_2$	$0,43078 \pm 0,00003$

Fonte: elaborado pelo autor.

Na Figura 38 temos o diagrama de fases do modelo de *clock* 2D, a campo externo nulo, para $p \geq 2$. Percebe-se que a temperatura crítica da transição de fase desordem-BKT apresenta um comportamento de estabilidade para os valores de $p \geq 5$. À medida que o valor intermediário de p aumenta, a região da fase ordenada se reduz e tende a se dissipar. Logo, para valores maiores de p teremos apenas as fases BKT e paramagnética. Esse comportamento já era esperado, pois o sistema estudado é o modelo XY 2D discretizado. Graças à temperatura crítica obtida para $p = 2$ temos segurança para afirmar que os resultados apresentados neste trabalho estão corretos, uma vez que este valor é consideravelmente próximo do valor exato calculado por Onsager [17] (veja a Equação 2.7).

Nas Figuras 39 e 40 podemos ver o ajuste linear do gráfico log-log dos valores pseudo-críticos do calor específico, da magnetização e da susceptibilidade magnética em função do tamanho da rede L para $p = 2, 3$ e 4 . Esses ajustes lineares possibilitam obter os expoentes críticos α, β e γ , respectivamente. Na Tabela 7 podemos ver os resultados encontrados. O comportamento das barras de erro se deve ao efeito de divergência que estas grandezas apresentam na região crítica quando $L \rightarrow \infty$.

Tabela 7 – Resultados obtidos dos expoentes críticos α , β e γ para $p = 2, 3$ e 4

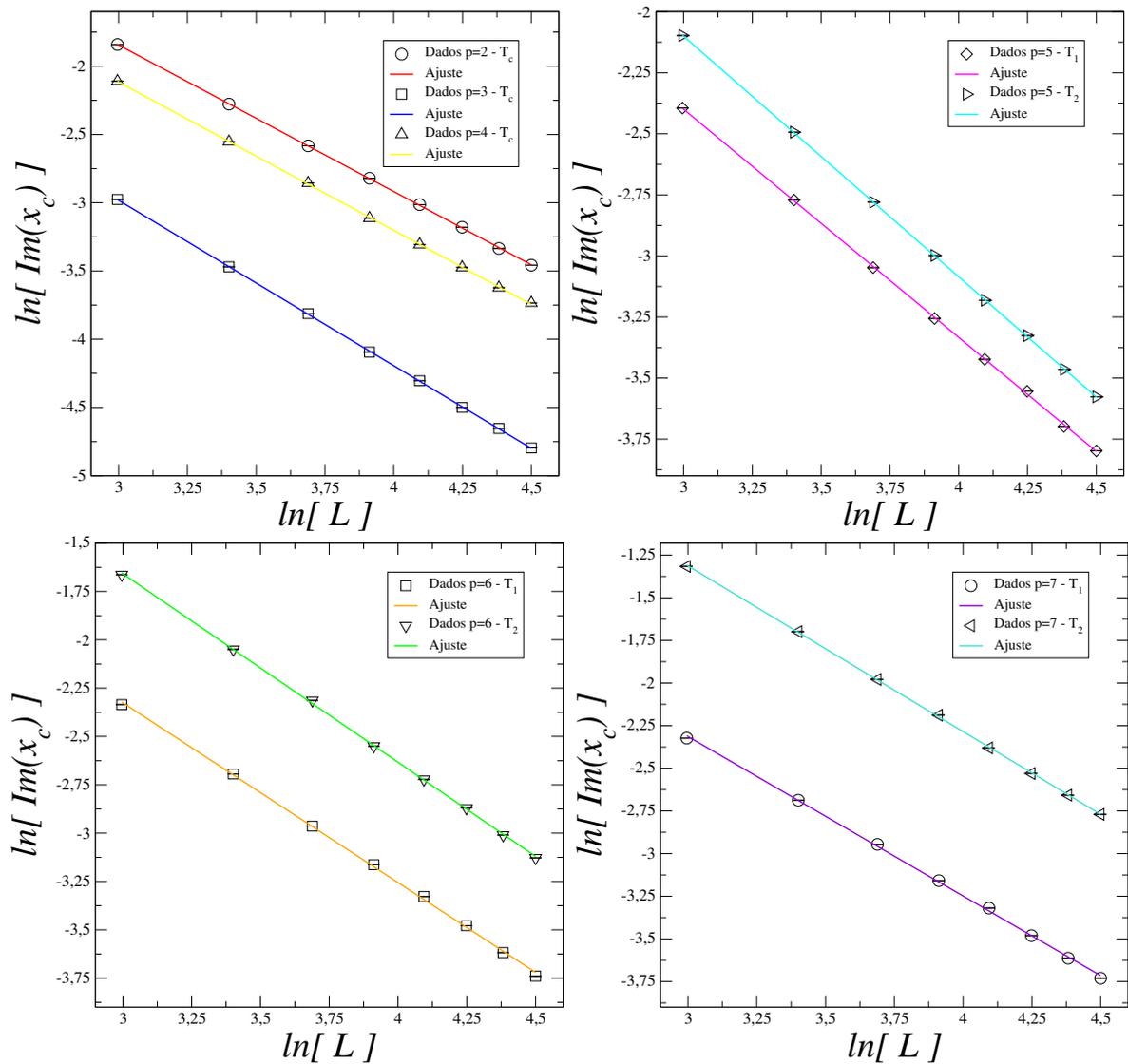
p -estado	α/ν	β/ν	γ/ν
$p = 2$	$0,251 \pm 0,005$	$0,153 \pm 0,003$	$1,80 \pm 0,01$
$p = 3$	$0,478 \pm 0,008$	$0,16 \pm 0,01$	$1,79 \pm 0,01$
$p = 4$	$0,24 \pm 0,01$	$0,172 \pm 0,007$	$1,85 \pm 0,03$

Fonte: elaborado pelo autor.

Os valores do calor específico, da magnetização e da susceptibilidade magnética para $p = 5, 6$ e 7 não demonstraram um comportamento de singularidade no ajuste linear do gráfico log-log em função de L . Ou seja, os dados destas grandezas não escalaram. Como esses valores intermediários de p estão relacionados com a região onde ocorre a transição do tipo BKT, para encontrar os expoentes críticos α , β e γ é necessário calcular o módulo de helicidade referente ao modelo estudado neste trabalho. Uma vez que, o módulo de helicidade é capaz de fornecer mais informações a respeito do desacoplamento dos pares de vórtices e anti-vórtices.

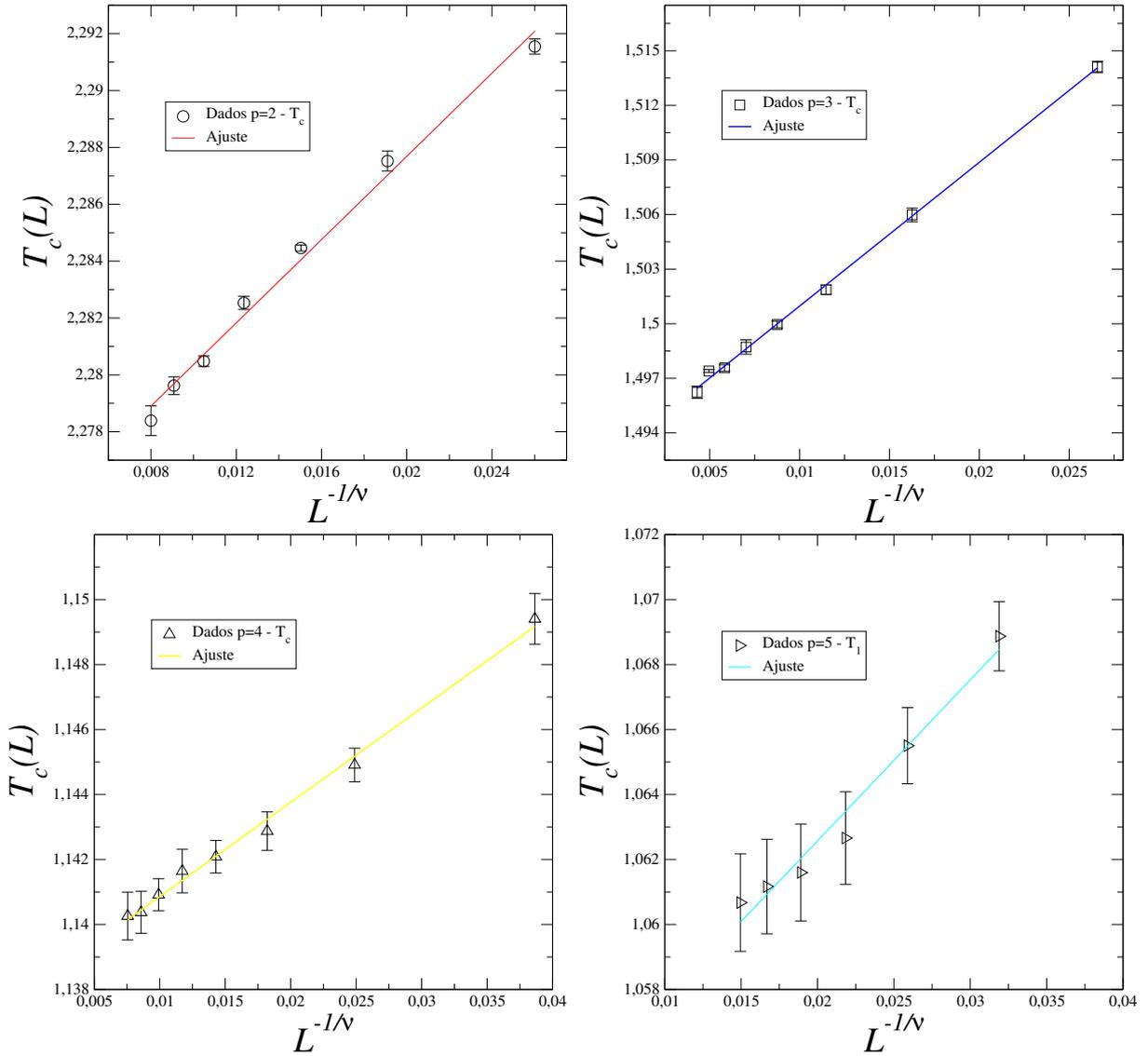
Como esse comportamento para $p \geq 5$ não era esperado, é necessário atualizar o algoritmo presente no Apêndice A para calcular a helicidade do sistema e reiniciar a simulação computacional a partir do menor tamanho de rede L . Não foi possível retomar todo o processo da simulação computacional que é exigido neste trabalho, até a defesa deste trabalho. Logo, este estudo dos zeros reduzidos continua em desenvolvimento.

Figura 35 – Ajuste linear do gráfico log-log de $Im(x_c)$ pelo tamanho de rede L para $p \geq 2$



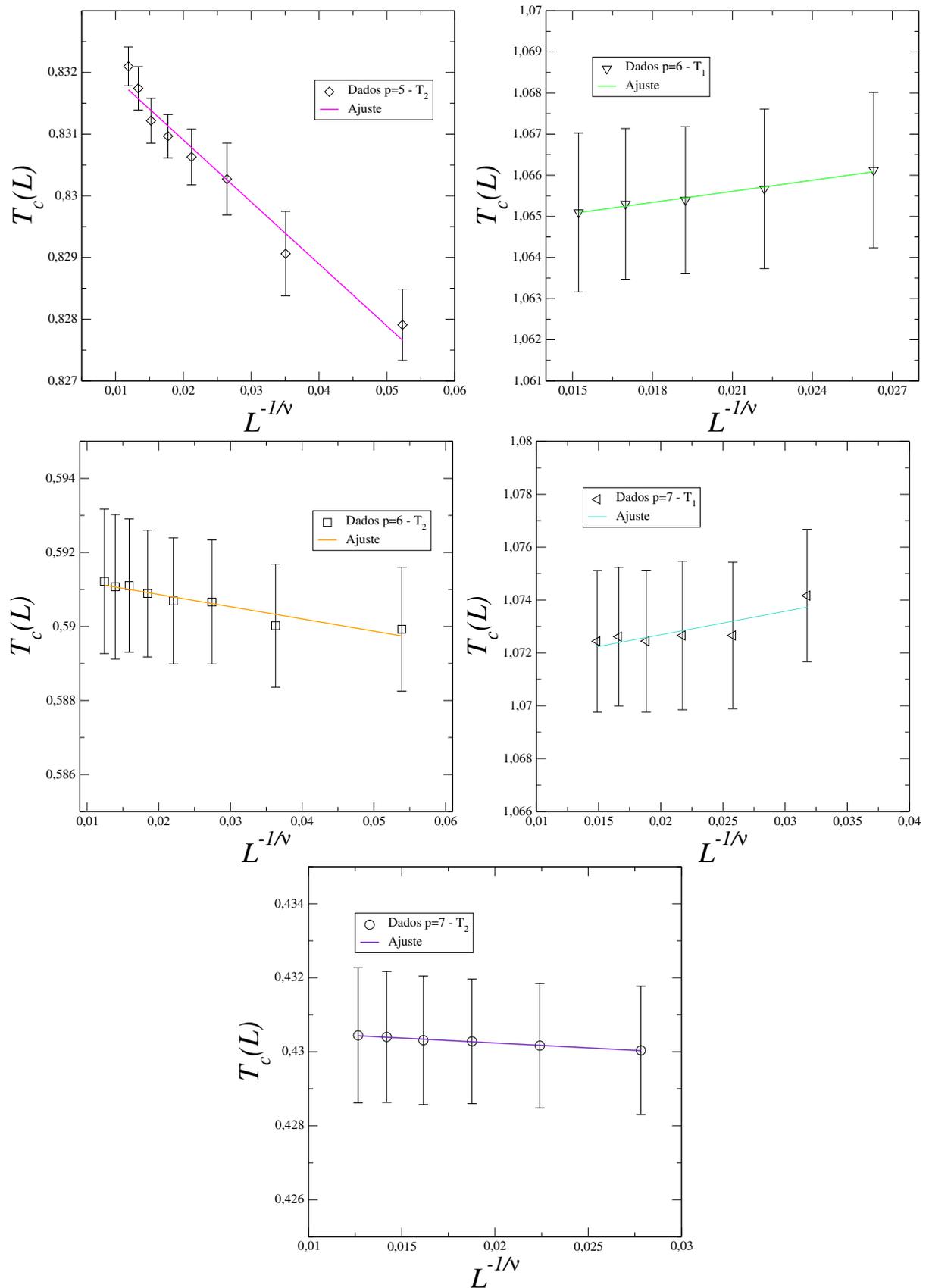
Fonte: elaborado pelo autor.

Figura 36 – Ajuste linear do gráfico da temperatura pseudo-crítica em função de $L^{-1/\nu}$ para $p \leq 5$



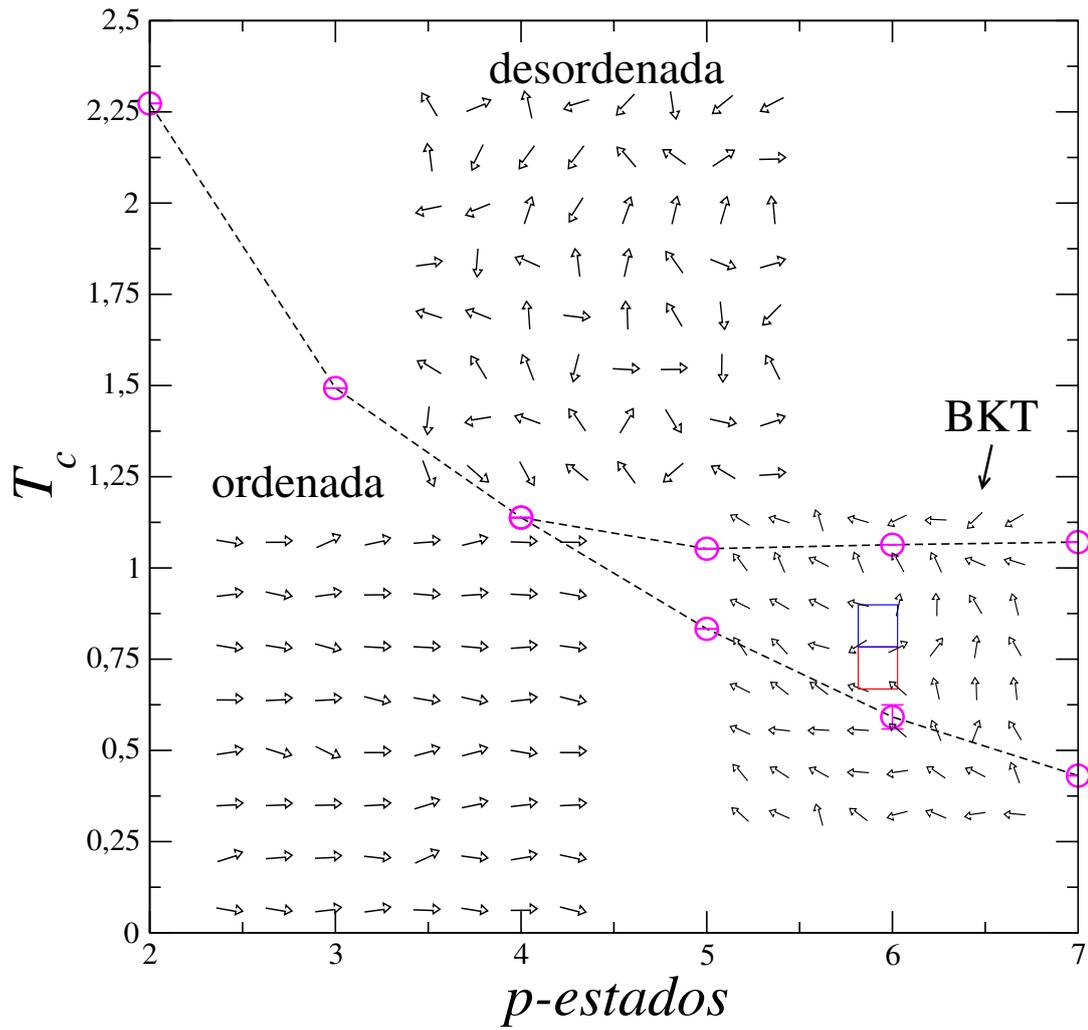
Fonte: elaborado pelo autor.

Figura 37 – Ajuste linear do gráfico da temperatura pseudo-crítica em função de $L^{-1/\nu}$ para $p \geq 5$



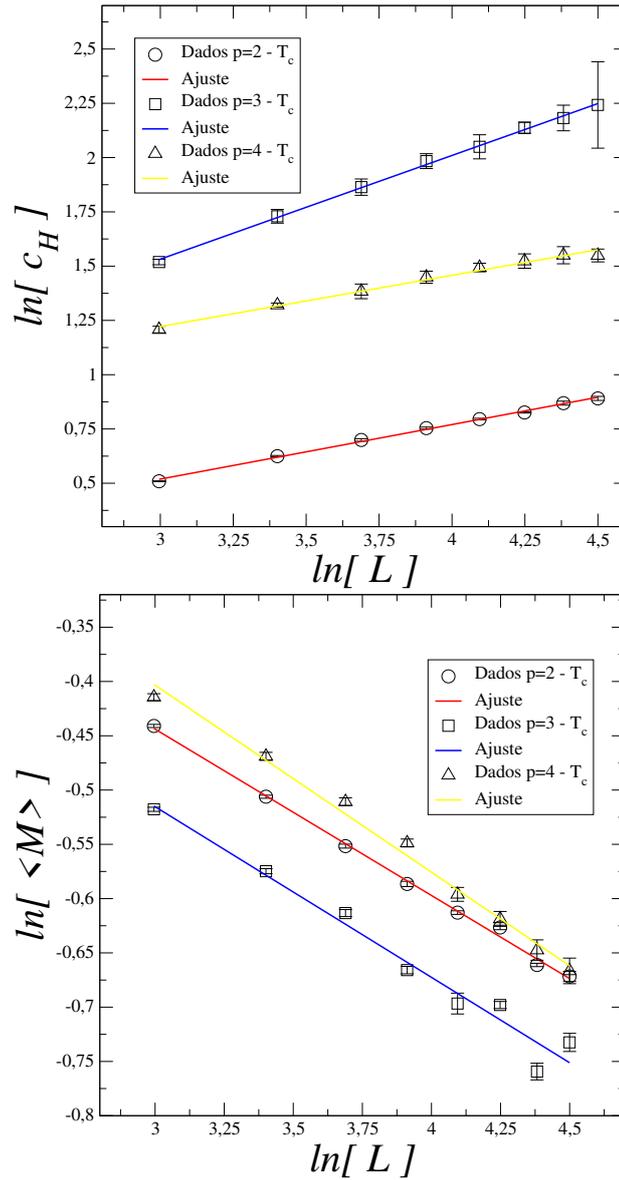
Fonte: elaborado pelo autor.

Figura 38 – Diagrama de fases



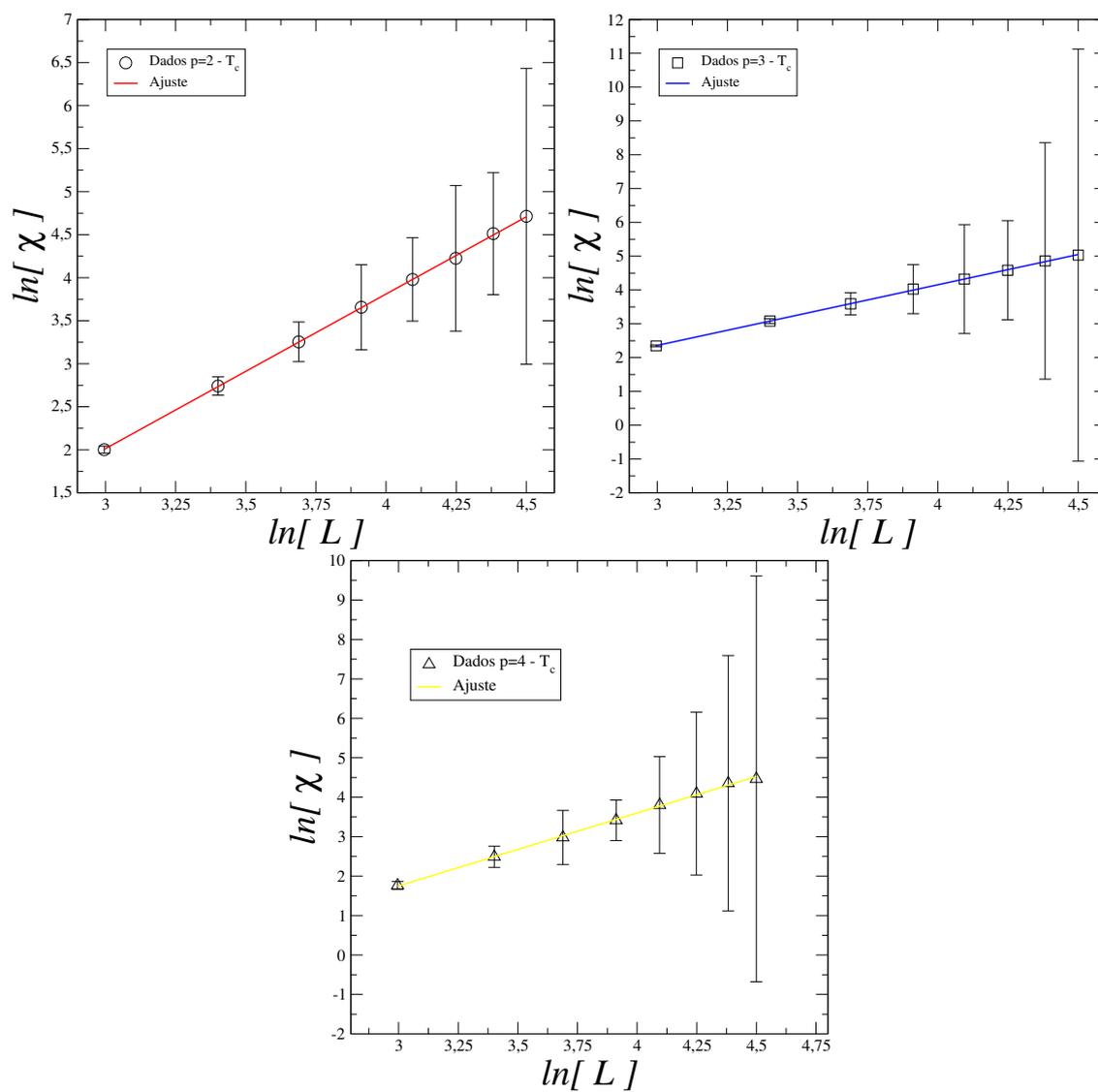
Fonte: elaborado pelo autor.

Figura 39 – Ajuste linear do gráfico log-log da magnetização e do calor específico pelo tamanho de rede L para $p = 2, 3$ e 4



Fonte: elaborado pelo autor.

Figura 40 – Ajuste linear do gráfico log-log da susceptibilidade magnética pelo tamanho de rede L para $p = 2, 3$ e 4



Fonte: elaborado pelo autor.

6 Considerações Finais

Entre as diversas aplicações dos materiais magnéticos, a utilização dos fenômenos magnéticos em meios de armazenamento de informações é considerada uma das mais importantes devido a necessidade de tais sistemas tecnológicos no cotidiano do ser humano. Alguns métodos computacionais específicos para o estudo do magnetismo têm contribuído de forma significativa para a compreensão do comportamento de novos magnetos, ligados ao aperfeiçoamento destes recursos de armazenamento de dados. Haja vista que podemos obter uma compreensão teórica de determinados fenômenos magnéticos em relação à temperatura, através de uma análise numérica de modelos físicos que não apresentam soluções analíticas.

Através do *clock* de p -estados bidimensional, por exemplo, conseguimos entender a transição de fase decorrente de defeitos topológicos do tipo vórtice que alguns magnetos planares apresentam. As flutuações térmicas nestes sistemas bidimensionais são mais significativas. Logo, em temperaturas baixas a correlação decai por uma lei de potência, indicando uma fase quase-ordenada. Já em altas temperaturas essa correlação decai exponencialmente, comportamento referente a uma fase desordenada. Essa divergência de comportamento da correlação caracteriza uma transição de fase a temperatura finita, chamada de transição BKT.

Com a densidade de estados discretizada, conseguimos escrever a função de partição na forma de um polinômio. Por meio da técnica dos zeros reduzidos da função de partição conseguimos reduzir o grau elevado deste polinômio e encontrar as raízes complexas de forma robusta e ao mesmo tempo dinâmica. Neste processo, os coeficientes do polinômio foram representados em histogramas de energias $h(E)$ normalizados em $[0, 1]$, para cada temperatura. Alguns estados de energia menos relevantes na transição de fase foram descartados após um corte de 10^{-1} em $h(E)$, com isso conseguimos reduzir o grau elevado do polinômio sem introduzir um desvio relevante na raiz principal (ou zero dominante) obtida para cada temperatura. Essas raízes complexas, que aparecem sempre como pares conjugados, tendem a "pinçar" o plano complexo no ponto onde temos o zero dominante no limite termodinâmico, ou seja, em $x_c = (1, 0)$. Isso ocorre de forma gradativa, conforme aumentamos o tamanho da rede quadrada L .

Neste trabalho encontramos a temperatura crítica e os expoentes críticos para os valores de $p \leq 7$, com os tamanhos de rede $L = 20, 30, 40, 50, 60, 70, 80$ e 90 . Os resultados obtidos mostram que a correlação apresenta a divergência no comportamento a partir de $p \geq 5$. Indicando que temos duas transições de fase finitas e distintas, uma transição ordem-BKT em $p \leq 4$ e outra BKT-desordem em $p \geq 5$. Além disso, percebemos

que a fase Berezinskii-Kosterlitz-Thouless existe entre duas temperaturas críticas distintas. A temperatura crítica T_1 é praticamente a mesma para os valores intermediários de $p \geq 5$: $T_c = 1,0527 \pm 0,0009J|\vec{\sigma}|^2/k_B$ para $p = 5$, $T_c = 1,0637 \pm 0,0001J|\vec{\sigma}|^2/k_B$ para $p = 6$ e $T_c = 1,0709 \pm 0,0006J|\vec{\sigma}|^2/k_B$ para $p = 7$. Já a temperatura crítica T_2 varia e reduz à medida que o valor intermediário de p aumenta: $T_c = 0,8329 \pm 0,0002J|\vec{\sigma}|^2/k_B$ para $p = 5$, $T_c = 0,59 \pm 0,03J|\vec{\sigma}|^2/k_B$ para $p = 6$ e $T_c = 0,43078 \pm 0,00003J|\vec{\sigma}|^2/k_B$ para $p = 7$.

Este comportamento em T_2 já era esperado porque para $p \rightarrow \infty$ o modelo de *clock* se reduz ao modelo XY, onde temos a presença de apenas duas fases: uma de quase-ordenamento, com a presença de pares de vórtice e anti-vórtice, e outra completamente desordenada. Além disso, o resultado obtido para $p = 2$ comprova que neste limite o modelo de *clock* bidimensional se comporta como o modelo de Ising 2D. O valor obtido foi $T_c = 2,2730 \pm 0,0005J|\vec{\sigma}|^2/k_B$, o que pode ser considerado um resultado consideravelmente próximo do valor exato encontrado por Onsager [17].

Conforme já informado, este trabalho ainda segue em desenvolvimento. Logo, pretendemos determinar o módulo de helicidade referente ao modelo de *clock* 2D, para obter os expoentes críticos relacionados a magnetização, ao calor específico e a susceptibilidade magnética para os valores de $p \geq 5$. Além de obter tais resultados, essa grandeza nos ajudará a obter respostas mais claras sobre o surgimento e desacoplamento de pares de vórtice e anti-vórtice na fase topológica do nosso sistema. Pretendemos então repetir a dinâmica da simulação para os mesmos tamanhos de rede L utilizados e implementá-la para tamanhos de rede maiores. Também é interesse deste trabalho estudar o comportamento deste sistema na presença de campo magnético externo, porém este é um objetivo mais a longo prazo.

Referências

- [1] MERMIN, N. D.; WAGNER, H. Absence of ferromagnetism or antiferromagnetism in one- or two-dimensional isotropic Heisenberg models. *Phys. Rev. Lett.*, v. 17, n. 22, p. 1133–1136, 1966. Citado 4 vezes nas páginas 15, 27, 30 e 53.
- [2] YOUNG, H. D.; FREEDMAN, R. A. *Física III: eletromagnetismo*. 12. ed. São Paulo: Pearson, 2009. Citado 4 vezes nas páginas 17, 19, 21 e 22.
- [3] SERWAY, R. A.; JR. JEWETT, J. W. *Princípios de Física: eletromagnetismo*. 1. ed. São Paulo: Cengage Learning, 2013. Citado 4 vezes nas páginas 17, 18, 22 e 23.
- [4] TIPLER, P. A. *Física para cientistas e engenheiros: eletricidade e magnetismo, ótica*. 4. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2000. Citado 3 vezes nas páginas 17, 22 e 23.
- [5] WOLSKI, B. *Fundamentos de eletromagnetismo*. 1. ed. Rio de Janeiro: Editora ao livro técnico, 2005. Citado na página 17.
- [6] JR. CALLISTER, W. D. *Ciência e engenharia de materiais: uma introdução*. 5. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2002. Citado 2 vezes nas páginas 18 e 20.
- [7] PADILHA, A. F. *Materiais de engenharia: microestrutura e propriedades*. 1. ed. São Paulo: Hemus, 2007. Citado 3 vezes nas páginas 17, 23 e 32.
- [8] JR. CALLISTER, W. D.; RETHWISCH, D. G. *Ciência e engenharia de materiais: uma abordagem integrada*. 4. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2017. Citado 6 vezes nas páginas 19, 20, 21, 22, 23 e 32.
- [9] SMITH, W. F.; HASHEMI, J. *Fundamentos de engenharia e ciência dos materiais*. 5. ed. Porto Alegre: AMGH, 2012. Citado 6 vezes nas páginas 19, 20, 21, 22, 32 e 33.
- [10] DIRAC, P. A. M. The quantum theory of the electron. *Proc. of the Royal Society A*, v. 117, n. 778, p. 610–624, 1928. Citado na página 21.
- [11] GRIFFITHS, D. J. *Mecânica Quântica*. 2. ed. São Paulo: Pearson, 2011. Citado 3 vezes nas páginas 21, 25 e 61.
- [12] EISBERG, R.; RESNICK, R. *Física Quântica: átomos, moléculas, sólidos, núcleos e partículas*. 1. ed. Rio de Janeiro: Editora Campus, 1979. Citado na página 21.
- [13] PAULING, L.; WILSON, E. B. *Introduction to Quantum Mechanics with Applications to Chemistry*. 1. ed. New York: Dover Publications, 1985. Citado na página 21.
- [14] GAVIRA, M. O. *Simulação computacional como uma ferramenta de aquisição de conhecimento*. 2003. Dissertação (Mestrado em Engenharia de Produção) — Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2003. Citado na página 23.
- [15] SANTOS, M. L. *Simulação de Monte Carlo no modelo de Ising na rede quadrada*. 2014. Dissertação (Mestrado em Física) — Departamento de Física, Universidade Federal de Minas Gerais, Belo Horizonte, 2014. Citado 12 vezes nas páginas 24, 32, 33, 40, 41, 42, 43, 45, 46, 49, 50 e 72.

- [16] ISING, E. Beitrag zur theorie des ferromagnetismus. *Z. Phys.*, v. 31, n. 2, p. 253–258, 1925. Citado na página 24.
- [17] ONSAGER, L. A two-dimensional model with an order-disorder transition. *Phys. Rev.*, v. 65, n. 3-4, p. 117–149, 1944. Citado 3 vezes nas páginas 24, 93 e 102.
- [18] SCHERER, C. *Métodos Computacionais da Física*. 1. ed. São Paulo: Editora Livraria da Física, 2005. Citado 3 vezes nas páginas 24, 66 e 72.
- [19] FAN, J. D.; MALOZOVSKY, Y. M. Pauli exclusion principle. *Journal of Modern Phys. B*, v. 27, n. 15, p. 1362024(1–8), 2013. Citado na página 25.
- [20] DOMB, C. Configurational studies of the Potts models. *Journal of Phys. A*, v. 7, n. 11, p. 1335–1348, 1974. Citado na página 25.
- [21] NOBRE, F. D.; SHERRINGTON, D. The infinite-range clock spin glass model: an investigation of the relevance of reflection symmetry. *Journal of Phys. C*, v. 19, n. 8, p. L(181–188), 1986. Citado na página 25.
- [22] HWANG, C. Six-state clock model on the square lattice: Fisher zero approach with Wang-Landau sampling. *Phys. Rev. E*, v. 80, n. 4, p. 042103(1–4), 2009. Citado 2 vezes nas páginas 25 e 30.
- [23] CHEN, J. et al. Phase transition of the q-state clock model: Duality and tensor renormalization. *Chin. Phys. Lett.*, v. 34, n. 5, p. 050503(1–4), 2017. Citado 4 vezes nas páginas 25, 26, 27 e 30.
- [24] KIM, D. Partition function zeros of the p-state clock model in the complex temperature plane. *Phys. Rev. E*, v. 96, n. 5, p. 052130(1–7), 2017. Citado 2 vezes nas páginas 25 e 30.
- [25] CHEN, Y.; XIE, Z.; YU, J. Phase transitions of the five-state clock model on the square lattice. *Chin. Phys. B*, v. 27, n. 8, p. 080503(1–5), 2018. Citado 3 vezes nas páginas 25, 29 e 30.
- [26] BAEK, S. K. et al. Phase transition of q-state clock models on heptagonal lattices. *Phys. Rev. E*, v. 80, n. 1, p. 011133(1–10), 2009. Citado 4 vezes nas páginas 25, 26, 27 e 29.
- [27] BAEK, S. K. et al. Residual discrete symmetry of the five-state clock model. *Phys. Rev. E*, v. 88, n. 1, p. 012125(1–6), 2013. Citado 4 vezes nas páginas 25, 26, 27 e 30.
- [28] BRITO, A. F.; REDINZ, J. A.; PLASCAK, J. A. Two-dimensional XY and clock models studied via the dynamics generated by rough surfaces. *Phys. Rev. E*, v. 81, n. 3, p. 031130(1–11), 2010. Citado 4 vezes nas páginas 25, 26, 27 e 30.
- [29] CZERNER, P.; RITSCHER, U. Universal short-time dynamics in the Kosterlitz-Thouless phase. *Phys. Rev. E*, v. 53, n. 4, p. 3333–3341, 1996. Citado 4 vezes nas páginas 25, 26, 27 e 30.
- [30] NEGRETE, O. A. et al. Entropy and mutability for the q-state clock model in small systems. *Entropy*, v. 20, n. 12, p. 933(1–16), 2018. Citado 3 vezes nas páginas 25, 27 e 30.

- [31] LAPILLI, C. M.; PFEIFER, P.; WEXLER, C. Universality away from critical points in two-dimensional phase transitions. *Phys. Rev. Lett.*, v. 96, n. 14, p. 140603(1–4), 2006. Citado 4 vezes nas páginas 26, 27, 29 e 30.
- [32] CORBERI, F.; LIPPIELLO, E.; ZANNETTI, M. Scaling and universality in the aging kinetics of the two-dimensional clock model. *Phys. Rev. E*, v. 74, n. 4, p. 041106(1–11), 2006. Citado 3 vezes nas páginas 26, 27 e 30.
- [33] LUPO, C.; RICCI-TERSENGHI, F. Approximating the XY model on a random graph with a q-state clock model. *Phys. Rev. B*, v. 95, n. 5, p. 054433(1–19), 2017. Citado 4 vezes nas páginas 26, 29, 30 e 51.
- [34] BRITO, A. F. *Crescimento de superfícies geradas por modelos magnéticos de spins na rede quadrada*. 2009. Tese (Doutorado em Física) — Departamento de Física, Universidade Federal de Minas Gerais, Belo Horizonte, 2009. Citado 2 vezes nas páginas 26 e 27.
- [35] POTTS, R. B. Some generalized order-disorder transformations. *Math. Proc. Camb. Phil. Soc.*, v. 48, n. 1, p. 106–109, 1952. Citado na página 26.
- [36] WU, F. Y. The Potts model. *Rev. Mod. Phys.*, v. 54, n. 1, p. 235–268, 1982. Citado na página 26.
- [37] SUZUKI, M. Solution of Potts model for phase transition. *Prog. Theor. Phys.*, v. 37, n. 4, p. 770–772, 1967. Citado na página 27.
- [38] ORTIZ, G.; COBANERA, E.; NUSSINOV, Z. Dualities and the phase diagram of the p-clock model. *Nuclear Phys. B*, v. 854, n. 3, p. 780–814, 2012. Citado 2 vezes nas páginas 27 e 28.
- [39] ANDRADE, P. H. A. *Modelo de Potts com interações aleatórias em redes fractais*. 2012. Dissertação (Mestrado em Física) — Departamento de Física, Universidade Federal de Pernambuco, Recife, 2012. Citado 2 vezes nas páginas 28 e 29.
- [40] TARONI, A.; BRAMWELL, S. T.; HOLDSWORTH, P. C. W. Universal window for two-dimensional critical exponents. *Journal of Phys.*, v. 20, n. 27, p. 275233(1–15), 2008. Citado na página 29.
- [41] RASTELLI, E.; REGINA, S.; TASSI, A. Monte Carlo simulation for square planar model with a small fourfold symmetry-breaking field. *Phys. Rev. B*, v. 70, n. 17, p. 174447(1–5), 2004. Citado 2 vezes nas páginas 29 e 30.
- [42] TOBOCHNIK, J. Properties of the q-state clock model for q=4, 5 and 6. *Phys. Rev. B*, v. 26, n. 11, p. 6201–6207, 1982. Citado 2 vezes nas páginas 30 e 74.
- [43] TOMITA, Y.; OKABE, Y. Probability-changing cluster algorithm for two-dimensional XY and clock models. *Phys. Rev. B*, v. 65, n. 18, p. 184405(1–5), 2002. Citado na página 30.
- [44] BORISENKO, O. et al. Numerical study of the phase transitions in the two-dimensional Z(5) vector model. *Phys. Rev. E*, v. 83, n. 4, p. 041120(1–11), 2011. Citado na página 30.
- [45] BORISENKO, O. et al. Phase transitions in two-dimensional Z(N) vector models for N>4. *Phys. Rev. E*, v. 85, n. 2, p. 021114(1–9), 2012. Citado na página 30.

- [46] KOSTERLITZ, J. M.; THOULESS, D. J. Ordering, metastability and phase transitions in two-dimensional systems. *Journal of Phys. C*, v. 6, n. 7, p. 1181–1203, 1973. Citado 2 vezes nas páginas 30 e 53.
- [47] KOSTERLITZ, J. M. The critical properties of the two-dimensional XY model. *Journal of Phys. C*, v. 7, n. 6, p. 1046–1060, 1974. Citado na página 30.
- [48] CHALLA, M. S. S.; LANDAU, D. P. Critical behavior of the six-state clock model in two dimensions. *Phys. Rev. B*, v. 33, n. 1, p. 437–443, 1986. Citado 2 vezes nas páginas 30 e 74.
- [49] ELITZUR, S.; PEARSON, R. B.; SHIGEMITSU, J. Phase structure of discrete Abelian spin and gauge systems. *Phys. Rev. D*, v. 19, n. 12, p. 3698–3714, 1979. Citado na página 30.
- [50] JOSE, J. V. et al. Renormalization, vortices, and symmetry-breaking perturbations in the two-dimensional planar model. *Phys. Rev. B*, v. 16, n. 3, p. 1217–1241, 1977. Citado na página 30.
- [51] CARDY, J. L. General discrete planar models in two dimensions: Duality properties and phase diagrams. *Journal of Phys. A*, v. 13, n. 4, p. 1507–1515, 1980. Citado na página 30.
- [52] STANLEY, H. E. *Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena*. 1. ed. Oxford: Oxford University Press, 1971. Citado 5 vezes nas páginas 33, 42, 43, 45 e 47.
- [53] SALINAS, S. R. A. *Introdução à Física Estatística*. 2. ed. São Paulo: EDUSP, 2005. Citado 12 vezes nas páginas 33, 34, 35, 36, 39, 41, 44, 46, 62, 63, 64 e 71.
- [54] PAPON, P.; LEBLOND, J.; MEIJER, P. H. E. *The Physics of Phase Transitions*. 2. ed. Heidelberg: Springer, 2006. Citado na página 33.
- [55] ALMEIDA, S. R. *Transições de fases quânticas em sistemas de spins em redes de baixa dimensionalidade*. 2015. Tese (Doutorado em Física) — Departamento de Física, Universidade Federal de Minas Gerais, Belo Horizonte, 2015. Citado 3 vezes nas páginas 33, 40 e 43.
- [56] CALLEN, H. B. *Thermodynamics and an Introduction to Thermostatistics*. 2. ed. New Jersey: Wiley, 1985. Citado na página 33.
- [57] ROCHA, J. C. S. *Diagrama de fase do modelo de Heisenberg antiferromagnético anisotrópico tri-dimensional*. 2007. Dissertação (Mestrado em Física) — Departamento de Física, Universidade Federal de Minas Gerais, Belo Horizonte, 2007. Citado 12 vezes nas páginas 33, 35, 36, 40, 41, 42, 43, 44, 45, 46, 47 e 50.
- [58] OLIVEIRA, M. J. *Termodinâmica*. 1. ed. São Paulo: Editora Livraria da Física, 2005. Citado 4 vezes nas páginas 34, 36, 37 e 38.
- [59] BRAGA, M. R. *Estudo de filmes magnéticos ultrafinos pelo método de Monte Carlo*. 2006. Dissertação (Mestrado em Física) — Departamento de Física, Universidade Federal de Minas Gerais, Belo Horizonte, 2006. Citado 5 vezes nas páginas 40, 42, 43, 44 e 45.

- [60] MÓL, L. A. S. *Transições de fase em modelos magnéticos bi-dimensionais com interações dipolares*. 2009. Tese (Doutorado em Física) — Departamento de Física, Universidade Federal de Minas Gerais, Belo Horizonte, 2009. Citado 9 vezes nas páginas 40, 41, 42, 43, 44, 45, 46, 47 e 50.
- [61] YOUNG, H. D.; FREEDMAN, R. A. *Física II: termodinâmica e ondas*. 12. ed. São Paulo: Pearson, 2008. Citado na página 40.
- [62] SIMOES, L. F. L. *Estudo do comportamento termodinâmico de sistemas físicos com interação de longo alcance na proximidade da região crítica*. 2017. Dissertação (Mestrado em Física) — Instituto de Física, Universidade de Brasília, Brasília, 2017. Citado 4 vezes nas páginas 40, 42, 43 e 45.
- [63] COMYN, J. *Polymer Permeability*. 1. ed. London: Elsevier Applied Science Publishers, 1985. Citado na página 40.
- [64] RODRIGUES, R. G. M. *Sobre o uso dos zeros da função de partição no estudo de transições de fase*. 2017. Dissertação (Mestrado em Física) — Departamento de Física, Universidade Federal de Minas Gerais, Belo Horizonte, 2017. Citado 6 vezes nas páginas 41, 51, 52, 53, 54 e 55.
- [65] EHRENFEST, P. Phase transitions in the usual and generalized sense, classified according to the singularities of the thermodynamic potential. *Prog. Amsterdam Acad.*, v. 36, n. 1, p. 153–157, 1933. Citado na página 41.
- [66] LANDAU, D. P.; BINDER, K. *A guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics*. 2. ed. Cambridge: Cambridge University Press, 2005. Citado 4 vezes nas páginas 41, 46, 70 e 71.
- [67] FISHER, M. E. The renormalization group in the theory of critical behavior. *Rev. Mod. Phys.*, v. 46, n. 4, p. 597–616, 1974. Citado na página 41.
- [68] TOMÉ, T.; OLIVEIRA, M. J. *Dinâmica Estocástica e Irreversibilidade*. 1. ed. São Paulo: Editora da Universidade de São Paulo, 2001. Citado 2 vezes nas páginas 42 e 74.
- [69] NEWMAN, M. E. J.; BARKEMA, G. T. *Monte Carlo Methods in Statistical Physics*. 1. ed. New York: Oxford University Press, 1999. Citado na página 42.
- [70] YEOMANS, J. M. *Statistical mechanics of phase transitions*. 1. ed. Oxford: Oxford University Press, 1992. Citado na página 42.
- [71] GOLDENFELD, N. *Lectures On Phase Transitions And The Renormalization Group*. 1. ed. Boca Raton: CRC Press, 1992. Citado na página 42.
- [72] GUIMARAES, M. O. S. *Estudo do modelo XY por Monte Carlo*. 2014. Tese (Doutorado em Física) — Departamento de Física, Universidade Federal de Minas Gerais, Belo Horizonte, 2014. Citado na página 45.
- [73] PRIVMAN, V. *Finite Size Scaling and Numerical Simulation of Statistical Systems*. 1. ed. Singapore: World Scientific, 1990. Citado 2 vezes nas páginas 46 e 47.
- [74] GOULD, H.; TOBOCHNICK, J. *An Introduction to Computer Simulation Methods: Applications to physical systems*. 1. ed. Boston: Addison Wesley, 1996. Citado na página 46.

- [75] BARROSO, L. C. et al. *Cálculo numérico: com aplicações*. 2. ed. São Paulo: Harbra, 1987. Citado na página 49.
- [76] RUGGIERO, M. A. G.; LOPES, V. L. R. *Cálculo numérico: aspectos teóricos e computacionais*. 2. ed. São Paulo: Pearson, 2004. Citado na página 49.
- [77] BINDER, K. Theory of first-order phase transitions. *Rep. Prog. Phys.*, v. 50, n. 7, p. 783–859, 1987. Citado na página 50.
- [78] SMITH, D. L. *Thin-Film Deposition: Principles and practice*. 1. ed. New York: McGraw-Hill, 1995. Citado na página 50.
- [79] ABEGUNDE, O. O. et al. Overview of thin film deposition techniques. *AIMS Materials Science*, v. 6, n. 2, p. 174–199, 2019. Nenhuma citação no texto.
- [80] MINNHAGEN, P. The two-dimensional Coulomb gas, vortex unbinding, and superfluid-superconducting films. *Rev. Mod. Phys.*, v. 59, n. 4, p. 1001–1066, 1987. Citado na página 50.
- [81] JOSÉ, J. V. *40 Years of Berezinskii-Kosterlitz-Thouless Theory*. 1. ed. Singapore: World Scientific, 2013. Citado na página 51.
- [82] VIEIRA, M. S. *Interação geométrica de defeitos topológicos em sistemas bidimensionais*. 2006. Dissertação (Mestrado em Física) — Centro de Ciências Exatas e da Natureza, Universidade Federal da Paraíba, João Pessoa, 2006. Citado na página 51.
- [83] PASCOLATI, M. C. V. *Dinâmica de vórtices em filmes finos supercondutores de superfície variável*. 2010. Dissertação (Mestrado em Ciências de Tecnologias de Materiais) — Faculdade de Ciências, Universidade Estadual Paulista "Júlio de Mesquita Filho", Bauru, 2010. Citado na página 51.
- [84] COSTA, B. V.; LIMA, A. B. Dynamical behavior of vortices in thin film magnetic systems. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, v. 324, n. 3, p. 1999–2005, 2012. Citado na página 52.
- [85] SANTOS FILHO, J. B. *Estudo do modelo XY vetorial de Blume-Emery-Griffiths: aplicações a sistemas magnéticos e a filmes de misturas de ^3He - ^4He* . 2011. Tese (Doutorado em Física) — Departamento de Física, Universidade Federal de Minas Gerais, Belo Horizonte, 2011. Citado na página 53.
- [86] BEREZINSKY, V. L. Destruction of long-range order in one-dimensional and two-dimensional systems possessing a continuous symmetry group. ii. Quantum Systems. *Sov. Phys. JETP*, v. 34, n. 3, p. 610–616, 1972. Citado na página 53.
- [87] THE ROYAL SWEDISH ACADEMY OF SCIENCES. *The Nobel Prize in Physics 2016*. 2016. Disponível em: <<https://www.nobelprize.org/prizes/physics/2016/press-release/>>. Acesso em: 07 jul. 2021. Citado na página 53.
- [88] GOULD, H.; TABOCHNIK, J.; COX, A. *STP XY Model Program*. [S.I]: Open Source Physics, 2013. Disponível em: <<https://www.compadre.org/STP/items/detail.cfm?ID=8642>>. Acesso em: 17 fev. 2021. Citado 2 vezes nas páginas 53 e 54.
- [89] MAGALHAES, M. N.; LIMA, A. C. P. *Noções de probabilidade e estatística*. 4. ed. São Paulo: EDUSP, 2002. Citado 2 vezes nas páginas 56 e 57.

- [90] DOWNING, D.; CLARK, J. *Estatística aplicada*. 2. ed. São Paulo: Saraiva, 2003. Citado 2 vezes nas páginas 56 e 60.
- [91] MONTGOMERY, D. C.; RUNGER, G. C. *Estatística aplicada e probabilidade para engenheiros*. 5. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2013. Citado 3 vezes nas páginas 56, 57 e 67.
- [92] SPIEGEL, M. R. *Probabilidade e estatística*. 1. ed. São Paulo: McGraw-Hill, 1978. Citado 3 vezes nas páginas 56, 57 e 58.
- [93] TRIOLA, M. F. *Introdução à estatística: atualização da tecnologia*. 11. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2014. Citado na página 56.
- [94] JONES, V. C. *Manhattan: the army and the atomic bomb*. 1. ed. Washington D.C.: U.S. Army Center of Military History, 1985. Citado na página 67.
- [95] ULAM, S. M. *Adventures of a mathematician*. 1. ed. Berkeley: University of California Press, 1991. Citado na página 67.
- [96] METROPOLIS, N.; ULAM, S. The Monte Carlo method. *Journal of the American Statistical Association*, v. 44, n. 247, p. 335–341, 1949. Citado na página 67.
- [97] METROPOLIS, N. The beginning of the Monte Carlo method. *Los Alamos Science*, v. 11-15, n. 15, p. 125–130, 1987. Citado na página 67.
- [98] MAZHRAKOV, M.; BENOVA, D.; VALKANOV, N. *The Monte Carlo method: engineering applications*. 1. ed. Sófia: ACMO Academic Press, 2018. Citado na página 67.
- [99] JEDRZEJEWSKI, F. *Modèles aléatoires et physique probabiliste*. 1. ed. Paris: Springer, 2009. Citado na página 68.
- [100] MARSAGLIA, G.; ZAMAN, A.; TSANG, W. W. Toward a universal random number generator. *Statistics & Probability Letters*, v. 9, n. 1, p. 35–39, 1990. Citado 2 vezes nas páginas 68 e 74.
- [101] GNU COMPILER COLLECTION. *DATE_AND_TIME*: Date and time subroutine. Free Software Foundation, 1990. Disponível em: <https://gcc.gnu.org/onlinedocs/gfortran/DATE_005fAND_005fTIME.html>. Acesso em: 10 abr. 2021. Citado na página 68.
- [102] DOOB, J. L. *Stochastic Processes*. 1. ed. New York: John Wiley and Sons, 1953. Citado na página 69.
- [103] GAGNIUC, P. A. *Markov Chains: From theory to implementation and experimentation*. 1. ed. New Jersey: John Wiley & Sons, 2017. Citado na página 69.
- [104] NORRIS, J. R. *Markov chains*. 1. ed. New York: Cambridge University Press, 1998. Citado na página 69.
- [105] PARZEN, E. *Stochastic Processes: Holden-day series in probability and statistics*. 1. ed. San Francisco: LLC, 1962. Citado na página 69.
- [106] DODGE, Y. *The Oxford Dictionary of Statistical Terms*. 1. ed. Oxford: Oxford University Press, 2003. Citado na página 69.

- [107]METROPOLIS, N. et al. Equation of state calculations by fast computing machines. *The Journal of Chem. Phys.*, v. 21, n. 6, p. 1087–1092, 1953. Citado 2 vezes nas páginas 72 e 73.
- [108]ROCHA, J. C. S. et al. Identifying transitions in finite systems by means of partition function zeros and microcanonical inflection-point analysis: A comparison for elastic flexible polymers. *Phys. Rev. E*, v. 90, n. 2, p. 022601(1–10), 2014. Citado na página 76.
- [109]TAYLOR, M. P.; AUNG, P. P.; PAUL, W. Partition function zeros and phase transitions for a square-well polymer chain. *Phys. Rev. E*, v. 88, n. 1, p. 012604(1–12), 2013. Citado na página 77.
- [110]ANTON, H.; RORRES, C. *Álgebra linear com aplicações*. 8. ed. Porto Alegre: Bookman, 2001. Citado na página 77.
- [111]POOLE, D. *Álgebra linear*. 1. ed. São Paulo: Pioneira Thomson Learning, 2004. Citado 2 vezes nas páginas 77 e 78.
- [112]COSTA, B. V.; MÓL, L. A. S.; ROCHA, J. C. S. Energy probability distribution zeros: A route to study phase transitions. *Comp. Phys. Communications*, v. 216, n. 7, p. 77–83, 2017. Citado na página 80.
- [113]FINE, B.; ROSENBERGER, G. *The Fundamental Theorem of Algebra*. 1. ed. New York: Springer, 1997. Citado na página 80.
- [114]CURTISS, D. R. Recent extensions of descartes' rule of signs. *Annals of Mathematics*, v. 19, n. 4, p. 251–278, 1918. Citado na página 80.
- [115]ROSEN, M. J. Niels Hendrik Abel and equations of the fifth degree. *The American Math. Monthly*, v. 102, n. 6, p. 495–505, 1995. Citado na página 82.
- [116]BINI, D. A.; FIORENTINO, G. Design, analysis, and implementation of a multiprecision polynomial rootfinder. *Numerical Algorithms*, v. 23, n. 2-3, p. 127–173, 2000. Citado na página 83.
- [117]BINI, D. A.; ROBOL, L. Solving secular and polynomial equations: A multiprecision algorithm. *Journal of Comp. and Applied Math*, v. 272, n. 1, p. 276–292, 2014. Citado na página 83.
- [118]BINI, D. A.; FIORENTINO, G.; ROBOL, L. *MPSolve*. Versão 3.2.1. Pisa: Numerical Analysis Group, 2020. Disponível em: <https://numpi.dm.unipi.it/software/mpsolve/what_is_mpsolve>. Acesso em: 17 fev. 2021. Citado na página 83.
- [119]ABERTH, O. Iteration methods for finding all zeros of a polynomial simultaneously. *Math. Comp. Mathematics of Computation*, v. 122, n. 27, p. 339–344, 1973. Citado na página 83.
- [120]EHRlich, L. W. A modified Newton method for polynomials. *Comm. ACM*, v. 10, n. 2, p. 107–108, 1967. Citado na página 83.
- [121]BINI, D. A. Numerical computation of polynomial zeros by means of Aberth's method. *Numerical Algorithms*, v. 13, n. 2, p. 179–200, 1996. Citado na página 83.

Apêndices

APÊNDICE A – Algoritmo desenvolvido para obter os zeros da função de partição

```

#####
!UNIVERSIDADE FEDERAL DE OURO PRETO (UFOP)
!INSTITUTO DE CIENCIAS EXATAS E BIOLOGICAS (ICEB)
!DEPARTAMENTO DE FISICA (DEFIS)
!PROGRAMA DE POS-GRADUACAO EM CIENCIAS – FISICA DE MATERIAIS (FIMAT)
!
!Linha de pesquisa: Simulacao Computacional e Modelagem Matematica
!
!Ouro Preto, Minas Gerais – Brasil
!
!*****
!DETERMINA OS ZEROS DA FUNCAO DE PARTICAO DO MODELO DE CLOCK DE P-ESTADOS
!EM UMA REDE QUADRADA DE SPINS COM CONDICOES DE CONTORNO PERIODICAS E
!COM CAMPO EXTERNO NULO
!*****
!
!Aluno: Maycon Junior da Cruz Silva
!
!Orientador: Professor Dr. Julio Cesar Siqueira Rocha (DEFIS/ICEB – UFOP)
!
!Coorientador: Professor Dr. Bismarck Vaz da Costa (DF/ICEx – UFMG)
!
!Linguagem de programacao: Fortran 90
#####

!+++++
!VARIAVEIS – INTEGER KIND
!+++++
MODULE integer_kind
INTEGER, PARAMETER :: K15=selected_int_kind(15)
INTEGER, PARAMETER :: K4B=selected_int_kind(9)
END MODULE integer_kind
!+++++
!VARIAVEIS USADAS NO GERADOR DE NUMEROS PSEUDO-ALEATORIOS
!+++++
MODULE raset1
USE integer_kind
IMPLICIT NONE
REAL(8), SAVE :: u(97), cc, cd, cm
INTEGER(K15), SAVE :: i97, j97

```

```

END MODULE raset1
!+++++
!DEMAIS VARIÁVEIS USADAS NA SIMULACAO
!+++++
MODULE variaveis
USE integer_kind
IMPLICIT NONE

INTEGER(K15) :: p, L, L2, tmc, tmc_average, tmc_temper, iseed, iseed1, &
& iseed2, en_min, en_max, rangeEn_min, rangeEn_max, epslon, N

INTEGER(K15),ALLOCATABLE,DIMENSION(:) :: vXdir, vXesq, vYdir, vYesq

DOUBLE PRECISION, ALLOCATABLE :: teta(:), spin(:), he(:), x_real(:), &
& x_imagi(:)

DOUBLE PRECISION : pi, E, E2, Mx, My, mag, mag2, e_med, e2_med, m_med, &
& m2_med, m3_med, m4_med, deltaE, temp, beta, temp_min, temp_max, &
& L2_inv, V1, V2, V3, V4, V5, V6, U4, susc, cv, tmc_inv, me_med, &
& m2e_med, m3e_med, m4e_med, m1, m2, m3, m4, delta_temp, deltaMx, &
& deltaMy, epslon_inv, maior, maior_inv, norma, menor, real_selec, &
& imagi_selec, erro, temp_anterior, corte

CHARACTER(100) : saida_he, saida_zeros, saida_medias, command, &
& polinomio, tabela
END MODULE variaveis

PROGRAM clock2D_metropolis
USE integer_kind
USE variaveis
IMPLICIT NONE
INTEGER(k4B),DIMENSION(12) :: iseed_aux
REAL :: t_inic, t_fim, seed_aux
DOUBLE PRECISION :: rand
INTEGER(K15) :: num
INTEGER(K15) :: ii, jj
CALL CPU_TIME(t_inic) !inicializa a contagem do tempo de computacao
erro = 0.001D0
corte = 0.1D0
OPEN(UNIT=10, FILE="input_temp_MPSolve.dat")
READ(10,*) temp
beta = 1.0D0/temp
DO
temp_anterior = temp
CALL busca_xreal()

```

```

beta = beta - (DLOG(real_selec)*epsilon_inv)
temp = 1.0D0/beta
DEALLOCATE(vXdir , vXesq , vYdir , vYesq , spin , teta , he , x_real , x_imagi)
IF (DABS(temp - temp_anterior) .LT. erro) THEN
CALL busca_xreal()
EXIT
END IF
END DO
!-----!
OPEN(UNIT=10, FILE="input_temp_MPSolve.dat")
WRITE(10,*) temp
CLOSE(10)
!-----!
OPEN(UNIT=10, FILE='input_clock2Dhe_MPSolve.dat')
WRITE(10,*) L+10, p
WRITE(10,*) (L+10)*(L+10)*100, tmc_average
WRITE(10,*) epsilon
CLOSE(10)
!-----!
CALL CPU_TIME(t_fim) !finaliza o tempo de computacao
WRITE(*,*) 'CPU□Time:', t_fim-t_inic !tempo de execucao
!-----!
STOP
CONTAINS
!+++++
!BUSCA A RAIZ COMPLEXA MAIS PROXIMA DO PONTO (1,0)
!+++++
SUBROUTINE busca_xreal()
USE integer_kind
USE variaveis
IMPLICIT NONE
CALL temp_step()
menor = 1.0D0
DO ii=1,N
IF ((x_real(ii) .GT. 0.0D0) .AND. (x_imagi(ii) .GT. 0.0D0)) THEN
norma = DSQRT((1.0D0-x_real(ii))*(1.0D0-x_real(ii)) + &
& (0.0D0-x_imagi(ii))*(0.0D0-x_imagi(ii)))
IF (norma .LT. menor) THEN
menor = norma
real_selec = x_real(ii)
imagi_selec = x_imagi(ii)
END IF
END IF
END DO
!-----!
OPEN(UNIT=10, FILE=tabela, POSITION='APPEND')
WRITE(10,*) temp, beta, real_selec, imagi_selec

```

```

CLOSE(10)
!-----!
RETURN
END SUBROUTINE busca_xreal
!+++++
!DIRECIONA O ALGORITMO PARA A TERMALIZACAO E EM SEGUIDA PARA OS CALCULOS
!+++++
SUBROUTINE temp_step()
USE integer_kind
USE variaveis
IMPLICIT NONE
CALL inicio() !inicia o sistema
tmc = tmc_temper !passos de Monte Carlo para a termalizacao
CALL metropolis() !implementa o algoritmo de Metropolis
tmc = tmc_average !passos de Monte Carlo para efetuar os calculos
CALL metropolis() !implementa o algoritmo de Metropolis
CALL zeros() !registra os zeros complexos e o histograma
CALL medias() !registra as medias termodinamicas
PRINT*, '#####T=□',temp, '#####'
RETURN
END SUBROUTINE temp_step
!+++++
!INICIA A SIMULACAO REGISTRANDO INFORMACOES IMPORTANTES,
!COMO A POSICAO DOS SPINS
!+++++
SUBROUTINE inicio()
USE integer_kind
USE variaveis
IMPLICIT NONE
INTEGER(K15) :: ii, jj, cont
CHARACTER(8) :: date
CHARACTER(10) :: time
CHARACTER(5) :: zone
INTEGER, DIMENSION(8) :: ivalues
912 FORMAT('med_clock2D_L=' I1 '_p=' I1 '_T=' F9.7 '.dat ')
913 FORMAT('med_clock2D_L=' I2 '_p=' I2 '_T=' F9.7 '.dat ')
914 FORMAT('med_clock2D_L=' I3 '_p=' I3 '_T=' F9.7 '.dat ')
915 FORMAT('histo_clock2D_L=' I1 '_p=' I1 '_T=' F9.7 '.dat ')
916 FORMAT('histo_clock2D_L=' I2 '_p=' I2 '_T=' F9.7 '.dat ')
917 FORMAT('histo_clock2D_L=' I3 '_p=' I3 '_T=' F9.7 '.dat ')
918 FORMAT('zeros_clock2D_L=' I1 '_p=' I1 '_T=' F9.7 '.dat ')
919 FORMAT('zeros_clock2D_L=' I2 '_p=' I2 '_T=' F9.7 '.dat ')
920 FORMAT('zeros_clock2D_L=' I3 '_p=' I3 '_T=' F9.7 '.dat ')
921 FORMAT('registro_L=' I3 '_p=' I3)
922 FORMAT('registro_L=' I3 '_p=' I3)
923 FORMAT('registro_L=' I3 '_p=' I3)
924 FORMAT('polinomio.pol ')

```

```

925 FORMAT('polinomio.pol')
926 FORMAT('polinomio.pol')
!-----!
OPEN(UNIT=10, FILE='input_clock2Dhe_MPSolve.dat')
READ(10,*) L, p
READ(10,*) tmc_temper, tmc_average
READ(10,*) epslon
CLOSE(10)
!-----!
!definindo nomes dos arquivos
IF (L .LT. 10) THEN
WRITE(saida_medias, 912) L, p, temp
WRITE(saida_he,915) L, p, temp
WRITE(saida_zeros,918) L, p, temp
WRITE(tabela,921) L, p
WRITE(polinomio,924)
ELSE
IF (L .LT. 100) THEN
WRITE(saida_medias, 913) L, p, temp
WRITE(saida_he,916) L, p, temp
WRITE(saida_zeros,919) L, p, temp
WRITE(tabela,922) L, p
WRITE(polinomio,925)
ELSE
WRITE(saida_medias, 914) L, p, temp
WRITE(saida_he,917) L, p, temp
WRITE(saida_zeros,920) L, p, temp
WRITE(tabela,923) L, p
WRITE(polinomio,926)
END IF
END IF
!-----!
!inicializa o gerador de numeros aleatorios
CALL DATE_AND_TIME(date,time,zone,ivalues)
CALL DATE_AND_TIME(VALUE=ivalues)
iseed_aux = ivalues(1)-2000 + 100*(ivalues(2) - 1 + 12*(ivalues(3)-1 + &
& 31*(ivalues(5) + 24*(ivalues(6) + 60*(ivalues(7) + 100*ivalues(8))))))
iseed_aux = ABS(iseed_aux)
iseed_aux = iseed_aux + iseed_aux
DO ii=1,12
iseed_aux(ii) = iseed_aux(ii)*ii + iseed_aux(ii)*ii
END DO
CALL RANDOM_NUMBER(seed_aux)
iseed1 = NINT(31328.0D0*seed_aux)
CALL RANDOM_NUMBER(seed_aux)
iseed2 = NINT(30081.0D0*seed_aux)
PRINT*, 'Seeds:', iseed1, iseed2

```

```

CALL rmarin(iseed1,iseed2)
PRINT*, 'Gerador de numeros aleatorios inicializado!'
!-----!
!alocando variaveis e tabelando parametros
L2 = L*L                !Calcula a area do plano
L2_inv = 1.0D0/DBLE(L2)
en_min = -3*L2
en_max = 3*L2
epsilon_inv = 1.0D0/DBLE(epsilon)
rangeEn_min = INT(en_min*epsilon_inv)
rangeEn_max = INT(en_max*epsilon_inv)
ALLOCATE (vXdir(1:L2),vXesq(1:L2),vYdir(1:L2),vYesq(1:L2),spin(1:L2), &
& teta(0:p-1),he(rangeEn_min:rangeEn_max))
!-----!
!calcula os angulos possiveis para cada p-estado
pi = 4.0D0*ATAN(1.0D0)
DO ii=0,p-1
teta(ii) = (2.0D0*pi*DBLE(ii))/DBLE(p)
END DO
!-----!
!registra os primeiros vizinhos
cont = 1
DO ii=1,L
DO jj=1,L
!Define a posicao dos vizinhos na direcao x
vXdir(cont) = cont + 1
vXesq(cont) = cont - 1
IF (jj .EQ. 1) vXesq(cont) = cont - 1 + L
IF (jj .EQ. L) vXdir(cont) = cont + 1 - L
!Define a posicao dos vizinhos na direcao y
vYdir(cont) = cont + L
vYesq(cont) = cont - L
IF (ii .EQ. 1) vYesq(cont) = cont - L + L2
IF (ii .EQ. L) vYdir(cont) = cont + L - L2
!CALL ranint()
!spin(cont) = teta(num)
cont = cont + 1
END DO
END DO
spin = teta(0)
PRINT*, 'Sistema inicializado com sucesso!!!!'
!-----!
RETURN
END SUBROUTINE inicio
!+++++
!IMPLEMENTA O METODO DE MONTE CARLO ATRAVES DO ALGORITMO DE METROPOLIS
!+++++

```

```

SUBROUTINE metropolis()
USE integer_kind
USE variaveis
IMPLICIT NONE
INTEGER(K15) :: ii, jj, ll
DOUBLE PRECISION :: old, new
he = 0.0D0
e_med = 0.0D0
e2_med = 0.0D0
m_med = 0.0D0
m2_med = 0.0D0
m3_med = 0.0D0
m4_med = 0.0D0
me_med = 0.0D0
m2e_med = 0.0D0
m3e_med = 0.0D0
m4e_med = 0.0D0
DO ii=1,tmc
CALL parametros()
DO jj=1,L2
old = spin(jj)
!muda o angulo do estado no sentido anti-horario
DO
CALL ranint()
spin(jj) = teta(num)
new = spin(jj)
IF (new .NE. old) EXIT
END DO
!----- !
CALL dif_parametros(jj,old,new)
IF (deltaE .LT. 0.0D0) THEN
E = E + deltaE
Mx = Mx + deltaMx
My = My + deltaMy
mag = DSQRT(Mx*Mx + My*My)
ELSE
rand = ranmar()
IF (rand .LT. DEXP(-beta*deltaE)) THEN
E = E + deltaE
Mx = Mx + deltaMx
My = My + deltaMy
mag = DSQRT(Mx*Mx + My*My)
ELSE
spin(jj) = old
END IF
END IF
END DO

```

```

l1 = INT(E*epsilon_inv)
he(l1) = he(l1) + 1.0D0
!-----!
E2 = E*E
e_med = e_med + E
e2_med = e2_med + E2
!-----!
mag2 = mag*mag
m_med = m_med + mag
m2_med = m2_med + mag2
m3_med = m3_med + (mag*mag2)
m4_med = m4_med + (mag2*mag2)
!-----!
me_med = me_med + (E*mag)
m2e_med = m2e_med + (E*mag2)
m3e_med = m3e_med + (E*mag*mag2)
m4e_med = m4e_med + (E*mag2*mag2)
END DO
tmc_inv = 1.0D0/DBLE(tmc)
he = he*tmc_inv
RETURN
END SUBROUTINE metropolis
!+++++
!REGISTRA OS ZEROS COMPLEXOS E O HISTOGRAMA NORMALIZADO
!+++++
SUBROUTINE zeros()
USE integer_kind
USE variaveis
IMPLICIT NONE
INTEGER(K15) :: degree
!-----!
!normaliza o histograma de energia
maior = he(en_min)
DO ii=en_min+1,en_max
IF (he(ii) > maior) THEN
maior = he(ii)
ELSE
maior = maior
END IF
END DO
maior_inv = 1.0D0/maior
he = he*maior_inv
!-----!
!realiza o corte e registra o histograma de densidade
!e descobre o grau do polinomio
OPEN(UNIT=10, FILE=saida_he, POSITION='APPEND')
ii = en_min

```

```

jj = 0
DO
IF (he(ii) .LT. corte) he(ii) = 0.0D0
IF (he(ii) .GT. corte) jj = jj + 1
WRITE(10,*) REAL(ii*epsilon), he(ii)
ii = ii + epsilon
IF (ii > en_max) EXIT
END DO
CLOSE(10)
degree = jj - 1
!-----!
!preenche o polinomio
OPEN(UNIT=10, FILE=polinomio, POSITION='APPEND')
WRITE(10,*) "Monomial;"
WRITE(10,*) "Real;"
WRITE(10,*) "FloatingPoint;"
WRITE(10,*) "Precision=53;"
WRITE(10,*) "Degree=",degree,";"
CLOSE(10)
OPEN(UNIT=10, FILE=polinomio, POSITION='APPEND')
ii = en_min
DO
IF (he(ii) .GT. corte) WRITE(10,*) he(ii)
ii = ii + epsilon
IF (ii > en_max) EXIT
END DO
CLOSE(10)
!-----!
!determina os zeros complexos atraves do MPSolve
command = "mpsolve_au_Ga_tf_Og_polinomio.pol_>zeros_clock2D.dat"
CALL SYSTEM(command)
!-----!
!registra a quantidade total de raizes complexas
!registra a parte real e imaginaria em vetores
N = 0
OPEN(1, FILE="zeros_clock2D.dat")
DO
READ(1,*,END=10)
N = N + 1
END DO
10 CLOSE(1)
ALLOCATE (x_real(1:N),x_imagi(1:N))
OPEN(UNIT=10, FILE="zeros_clock2D.dat")
DO ii=1,N
READ(10,*) x_real(ii),x_imagi(ii)
END DO
CLOSE(10)

```

```

!----- !
!armazena em um arquivo as raizes complexas para cada temperatura
OPEN(UNIT=10, FILE=saida_zeros, POSITION='APPEND')
DO ii=1,N
WRITE(10,*) x_real(ii), x_imagi(ii)
END DO
CLOSE(10)
!apaga os arquivos desnecessarios
command = "rm_polinomio.pol_zeros_clock2D.dat"
CALL SYSTEM(command)
!----- !
RETURN
END SUBROUTINE zeros
!+++++
!CALCULA AS MEDIAS TERMODINAMICAS
!+++++
SUBROUTINE medias()
USE integer_kind
USE variaveis
IMPLICIT NONE
!----- !
e_med = e_med*tmc_inv
e2_med = e2_med*tmc_inv
cv = e2_med - e_med*e_med
cv = beta*beta*cv*L2_inv
!----- !
m_med = m_med*tmc_inv
m2_med = m2_med*tmc_inv
m3_med = m3_med*tmc_inv
m4_med = m4_med*tmc_inv
me_med = me_med*tmc_inv
m2e_med = m2e_med*tmc_inv
m3e_med = m3e_med*tmc_inv
m4e_med = m4e_med*tmc_inv
!----- !
m1 = me_med - e_med*m_med
m2 = m2e_med - e_med*m2_med
m3 = m3e_med - e_med*m3_med
m4 = m4e_med - e_med*m4_med
!----- !
m1 = -m1*beta*beta
m2 = -m2*beta*beta
m3 = -m3*beta*beta
m4 = -m4*beta*beta
!----- !
m1 = DLOG(m1)
m2 = DLOG(m2)

```

```

m3 = DLOG(m3)
m4 = DLOG(m4)
!-----!
V1 = 4.0D0*m3 - 3.0D0*m4
V2 = 2.0D0*m2 - m4
V3 = 3.0D0*m2 - 2.0D0*m3
V4 = 4.0D0*m1 - m4
V4 = V4/3.0D0
V5 = 3.0D0*m1 - m3
V5 = V5*0.5D0
V6 = 2.0D0*m1 - m2
!-----!
susc = m2_med - m_med*m_med
susc = beta*susc*L2_inv
!-----!
U4 = 3.0D0*m2_med*m2_med
U4 = 1.0D0 - m4_med/U4
!-----!
e_med = e_med*L2_inv
m_med = m_med*L2_inv
!-----!
!armazena os valores calculados
OPEN(UNIT=10, FILE=saida_medias, POSITION='APPEND')
WRITE(10,*) e_med, cv, m_med, susc, U4, V1, V2, V3, V4, V5, V6
CLOSE(10)
RETURN
END SUBROUTINE medias
!+++++
!CALCULA A VARIACAO DA ENERGIA E ATUALIZA A MAGNETIZACAO APOS
!A MUDANCA DO ANGULO
!+++++
SUBROUTINE dif_parametros(ispin, old, new)
USE integer_kind
USE variaveis
IMPLICIT NONE
INTEGER(K15), INTENT(IN) :: ispin
DOUBLE PRECISION, INTENT(IN) :: old, new
!atualiza a magnetizacao apos a mudanca
deltaMx = COS(new) - COS(old)
deltaMy = SIN(new) - sin(old)
!-----!
!variacao da energia apos a mudanca
deltaE = -(COS(new - spin(vXdir(ispin))) - COS(old - spin(vXdir(ispin)))) &
& - (COS(new - spin(vYdir(ispin))) - COS(old - spin(vYdir(ispin)))) &
& - (COS(new - spin(vXesq(ispin))) - COS(old - spin(vXesq(ispin)))) &
& - (COS(new - spin(vYesq(ispin))) - COS(old - spin(vYesq(ispin))))
RETURN

```

```

END SUBROUTINE dif_parametros
!+++++
!CALCULA A ENERGIA E A MAGNETIZACAO DO SISTEMA
!+++++
SUBROUTINE parametros()
USE integer_kind
USE variaveis
IMPLICIT NONE
INTEGER(K15) :: ii
E = 0.0D0
Mx = 0.0D0
My = 0.0D0
DO ii=1,L2
!calcula a energia
E = E - COS(spin(ii) - spin(vXdir(ii))) - COS(spin(ii) - spin(vYdir(ii)))
!-----!
!calcula a magnetizacao
Mx = Mx + COS(spin(ii))
My = My + SIN(spin(ii))
END DO
mag = DSQRT(Mx*Mx + My*My)
RETURN
END SUBROUTINE parametros
!+++++
!GERADOR DE NUMEROS PSEUDO-ALEATORIOS
!
!Proposto inicialmente por:
!
!"Toward a Universal Random Number Gerator"
!G. Marsaglia and A. Zaman and W. W. Tsang
!Statistics & Probability Letters
!vol. 9, n. 1, p. 35-39, 1990
!+++++
SUBROUTINE rmarin(ij, kl)
USE integer_kind
USE raset1
IMPLICIT NONE
INTEGER(K15), INTENT(IN) :: ij, kl
INTEGER(K15) :: i, j, k, l, m, ii, jj
DOUBLE PRECISION :: s, t
IF (ij.LT.0 .OR. ij.GT.31328 .OR. kl.LT.0 .OR. kl.GT.30081) THEN
WRITE(*, '(A)') 'The first random number seed must have a value by 0-31328'
WRITE(*, '(A)') 'The second seed must have a value by 0-30081'
STOP
END IF
!-----!
i = MOD(ij/177, 177) + 2

```

```

j = MOD( ij , 177) + 2
k = MOD( kl/169, 178) + 1
l = MOD( kl , 169)
!----- !
DO ii=1,97
s = 0.0D0
t = 0.5D0
DO jj=1, 24
m = MOD(MOD( i*j , 179)*k , 179)
i = j
j = k
k = m
l = MOD(53*l + 1, 169)
IF (MOD(l*m, 64) .GE. 32) THEN
s = s + t
END IF
t = 0.5D0*t
END DO
u( ii ) = s
END DO
!----- !
cc = 362436.0D0/16777216.0D0
cd = 7654321.0D0/16777216.0D0
cm = 16777213.0D0/16777216.0D0
i97 = 97
j97 = 33
RETURN
END SUBROUTINE rmarin
!----- !
FUNCTION ranmar() RESULT(uni)
USE raset1
IMPLICIT NONE
DOUBLE PRECISION :: uni
uni = u(i97) - u(j97)
IF (uni .LT. 0.0D0) uni = uni + 1.0D0
u(i97) = uni
i97 = i97 - 1
IF (i97 .EQ. 0) i97 = 97
j97 = j97 - 1
IF (j97 .EQ. 0) j97 = 97
cc = cc - cd
IF (cc .LT. 0.0D0) cc = cc + cm
uni = uni - cc
IF (uni .LT. 0.0D0) uni = uni + 1.0D0
RETURN
END FUNCTION ranmar
!+++++

```

```
!SORTEIA ALEATORIAMENTE UM NUMERO INTEIRO ENTRE 1 E P PARA A DISTRIBUICAO
!ALEATORIA DAS POSICOES DOS SPINS
!+++++
SUBROUTINE ranint()
USE variaveis
IMPLICIT NONE
rand = ranmar()
num = FLOOR(p*rand)
RETURN
END SUBROUTINE ranint
END PROGRAM clock2D_metropolis
```

