

Universidade Federal do Rio Grande do Sul  
Instituto de Física

# **Gases de Rede com Exclusão de Vizinhos**

Filipe da Cunha Thewes

*Trabalho de conclusão de curso realizado sob a orientação do Prof. Dr. Heitor Carpes Marques Fernandes, apresentada ao Instituto de Física da UFRGS em preenchimento parcial dos requisitos para obtenção do título de Bacharel em Física com ênfase em Física Computacional.*

*Porto Alegre, Janeiro de 2018.*



# Resumo

O estudo das transições de fase presentes em sistemas de gases de rede com exclusão de vizinhos possibilita o entendimento dos fenômenos básicos responsáveis por estas transições, facilitando, assim, a caracterização de fenômenos críticos que ocorrem em sistemas complexos e de difícil acesso devido a custos financeiros ou periculosidade. Por meio da obtenção dos expoentes críticos de uma transição, pode-se situá-la em uma classe de universalidade, de forma a estabelecer relação com transições de fase em outros sistemas.

Neste trabalho foram estudados os gases de rede com regiões de exclusão até primeiros (1NN), segundos (2NN) e terceiros (3NN) vizinhos na rede triangular na qual, como continuação dos estudos anteriores do grupo de Fluidos Complexos do IF-UFRGS, resultados conhecidos foram verificados para os casos 1NN e 2NN e novos foram obtidos para o caso 3NN. Alguns dos sistemas estudados apresentaram transições de primeira ordem, enquanto outros apresentaram transições de segunda ordem, sendo possível obter destes os expoentes críticos e, por conseguinte, sua classe de universalidade.

Foram realizadas simulações para os casos 1NN, 2NN, 3NN, 4NN e 5NN na rede *honeycomb*. Os resultados obtidos, e a dificuldade em obtê-los, levaram a proposta de uma conjectura referente à quebra de simetria na ocupação das sub-redes, em altas densidades, e em relação à simetria horizontal da célula de Wigner-Seitz. Esta conjectura foi verificada nas simulações e permitiu identificar os casos nos quais as transições de fase para ordenamento de sub-redes são evidentes.

# Abstract

The study of phase transitions in lattice gases with neighbors exclusion allows better understanding of basic phenomena behind these phase transitions, furthering the characterization of critical phenomena in complex systems of difficult access due to financial costs or dangerous experimental situations. Once critical exponents are obtained, it is possible to associate a given system to a universality class, relating phase transitions in different systems.

Following previous works in the Complex Fluids group at IF-UFRGS, we studied lattice gases with exclusion shell up to third nearest neighbors (3NN) on triangular lattice. Our simulations validated previous known results for 1NN and 2NN cases and obtained new ones for 3NN case. This latter case undergoes a first order phase transition, while the others undergo a second order phase transition. Critical exponents were obtained through simulations and universality classes determined.

For honeycomb lattice, 1NN, 2NN, 3NN, 4NN and 5NN were studied. Our results, as well as difficulties to obtain them, were summarized in a conjecture relating symmetry breaking in the occupancy of its sublattices, at high densities, to horizontal symmetry of the system's Wigner-Seitz cell. This conjecture was verified through simulations and allowed us to identify which cases clearly undergo phase transition to sublattice ordering.

# Sumário

<b>1</b>	<b>Introdução</b>	<b>3</b>
<b>2</b>	<b>Metodologia</b>	<b>6</b>
2.1	Mecânica Estatística e o método de Monte Carlo no <i>Ensemble</i> Grande Canônico . . . . .	6
2.2	Transição de Fase e Observáveis de Interesse . . . . .	10
2.3	Repesagem de Histogramas . . . . .	11
2.4	Análise de Erros . . . . .	12
2.5	Escala de Tamanho Finito . . . . .	13
<b>3</b>	<b>Resultados</b>	<b>15</b>
3.1	Rede Triangular . . . . .	15
3.1.1	1NN . . . . .	15
3.1.2	2NN . . . . .	19
3.1.3	3NN . . . . .	22
3.2	<i>Honeycomb</i> . . . . .	26
3.2.1	1NN . . . . .	26
3.2.2	Outros Resultados para a Rede <i>Honeycomb</i> . . . . .	29
<b>4</b>	<b>Conclusão</b>	<b>34</b>
	<b>Referências</b>	<b>36</b>



# Capítulo 1

## Introdução

Um gás de rede é um sistema termodinâmico idealizado onde partículas ocupam sítios em uma rede cristalina. Motivado pela existência de uma região de forte repulsão em sistemas contínuos, a exclusão de vizinhos na rede acontece quando os sítios vizinhos mais próximos de um dado sítio ocupado são proibidos de serem ocupados. Assim, pode-se dizer que a partícula adquire uma área, no caso bidimensional, ou um volume, em três dimensões, gerando uma interação do tipo caroço-duro (*hardcore*) [1].

A principal característica deste tipo de interação é a independência do sistema em relação à temperatura, uma vez que a energia é nula para qualquer configuração permitida pela exclusão. Portanto, a caracterização do sistema se dá pelo número de partículas na rede ou, equivalentemente, pela sua densidade. Estando associada ao potencial químico, a densidade aumenta a medida que este aumenta, até que alcance o valor máximo permitido pela exclusão dos vizinhos.

Diretamente relacionada com a densidade do sistema, a forma com que as partículas se organizam na rede é o principal fator na determinação da fase em que este se encontra. Quando a densidade do sistema é baixa, isto é, em potenciais químicos baixos, a ocupação da rede tende a ser desordenada, caracterizando uma fase fluida. A medida que o potencial químico aumenta, a densidade e a organização das partículas aumenta, fazendo com que o sistema transicione para uma fase sólida.

Ainda que a interação seja a mesma, a topologia da rede é fator crucial na caracterização deste tipo de transição de fase, uma vez que diferentes simetrias levam a diferentes formas de organização das partículas. O estudo de gases de rede com exclusão de até primeiros (1NN), até segundos (2NN) e até terceiros vizinhos (3NN) na rede triangular, bem como o estudo das possíveis transições de fase na rede *honeycomb* é o objetivo deste trabalho. Para tanto, simulações de Monte Carlo, juntamente com análises estatísticas, serão utilizadas no estudo das transições de fase por meio da obtenção dos expoentes críticos, caracterizando a sua classe de universalidade [2]. Quando duas transições de fase possuem os mesmos expoentes críticos, dizemos que estas pertencem à mesma classe de universalidade.

A existência destas classes de universalidade faz com que estes sistemas idealizados

tenham relação direta com experimentos reais [3]. Um exemplo é a transição para-ferromagnética em metais condutores, correspondendo à classe de universalidade do modelo de Ising [4]. Assim, os fenômenos críticos de sistemas complexos que apresentam transições de fase do tipo ordem-desordem, como fenômenos de adsorção [5], podem ser estudados por meio de simulações de sistemas simples que apresentem os mesmos expoentes críticos.

Um dos fenômenos que serve de motivação para o estudo de gases de rede com exclusão de vizinhos é a transição de cristalização em sistemas de esferas duras [6](ver Capítulo 8). Isto é, a medida em que a densidade deste sistema aumenta, as esferas organizam-se de forma a minimizar o volume excluído, passando a apresentar uma estrutura cristalina(Figura 1.1).

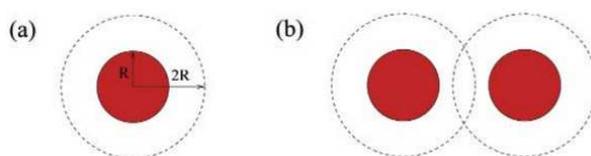


Figura 1.1: Superposição das regiões de exclusão de duas esferas rígidas aumentando o volume acessível do sistema e, por conseguinte, a entropia deste. Fonte: [7]

Este tipo de transição de fase, tanto em sistemas de esferas duras quanto em um gás de rede com exclusão de vizinhos, é guiada pela entropia. Ao ocorrer a superposição das regiões de exclusão pela aproximação de duas esferas, um novo volume se torna acessível ao sistema, fazendo com o que a entropia deste aumente. Assim, de maneira pouco intuitiva, em um sistema onde a única interação é a exclusão de uma certa região, a fase ordenada possui entropia maior que a fase desordenada.

Anteriormente aos estudos realizados de forma detalhada para gases de rede com exclusão de vizinhos na rede quadrada, esperava-se que, a medida em que a região de exclusão de um gás de rede aumentasse, este se aproximaria cada vez mais do modelo de um disco (esfera) duro(a). Entretanto, os resultados obtidos até a exclusão 5NN [1] e até 11NN [8] não aparentaram convergir para tal limite.

Ainda assim, embora exista uma associação direta com a realidade, o estudo deste tipo de sistema idealizado tem se mostrado interessante em si mesmo como método de caracterização de diferentes classes de transições de fase. Por serem simples, estes permitem o entendimento dos fenômenos básicos que ocorrem durante estas transições, auxiliando no entendimento das transições em sistemas mais complicados.

Em contrapartida, as limitações práticas do método de Monte Carlo estão nas limitações impostas pela tecnologia no tamanho dos sistemas acessíveis. Enquanto que o

ideal seria uma simulação próxima ao limite termodinâmico, na ordem de  $10^{23}$  partículas, apenas simulações com um número reduzido de partículas ( $\sim 10^6$ ) se mostra computacionalmente viável.

Ainda assim, a possibilidade do entendimento acerca dos mecanismos básicos por trás dos fenômenos críticos mantém o método de Monte Carlo como a principal ferramenta na física estatística moderna. Os casos aqui apresentados para a rede triangular foram estudados anteriormente em [6, 9, 10], sendo o presente trabalho uma revisão destes resultados. Para a rede *honeycomb*, não foram encontrados resultados durante a revisão bibliográfica.

O trabalho está organizado da seguinte forma: será feita, no Capítulo 2, uma breve introdução ao método de Monte Carlo e às ferramentas utilizadas na interpretação e análise estatística dos dados. No capítulo 3, serão apresentados primeiramente os resultados obtidos para os sistemas na rede triangular, comparando os expoentes críticos obtidos com os encontrados na literatura. Posteriormente, para a rede *honeycomb*, serão apresentados os resultados para a exclusão 1NN, seguidos de uma análise da simetria da rede e as consequências desta para as possíveis transições de fase em outras exclusões. Por meio de simulações nos casos 4NN e 5NN nesta rede, são confirmadas as previsões feitas na análise apresentada. Nas conclusões, indica-se uma possível solução para as dificuldades encontradas nas exclusões 2NN e 3NN da rede *honeycomb*.

# Capítulo 2

## Metodologia

### 2.1 Mecânica Estatística e o método de Monte Carlo no *Ensemble* Grande Canônico

Tendo a mecânica estatística como alicerce, o método de Monte Carlo é de suma importância no estudo de sistemas cuja solução analítica é impossível de ser obtida. Capaz de descrever propriedades macroscópicas partindo de características microscópicas, o método vem sendo diretamente beneficiado pelos avanços tecnológicos dos últimos tempos, que possibilitam o estudo de sistemas cada vez maiores por meio de simulações mais longas. Atrelado à isto, a possibilidade do desenvolvimento de algoritmos mais eficientes, e por vezes específicos para cada tipo de problema, faz com que o método de Monte Carlo seja a principal ferramenta no estudo de transições de fase. Entretanto, a simulação de sistemas de tamanho próximo ao real, na ordem de  $10^{23}$  partículas, ainda não se faz possível, sendo acessível sistemas com um número de partículas da ordem de  $10^6$ .

O método de Monte Carlo parte da definição da entropia como sendo proporcional ao logaritmo natural do número de microestados acessíveis ao sistema [11]

$$S(E) = k_B \ln(\Omega(E)), \quad (2.1)$$

de forma que a distribuição de probabilidades de Boltzmann, dada por

$$p_\nu = \frac{e^{-\beta E_\nu + \beta \mu N_\nu}}{\sum_\nu e^{-\beta E_\nu + \beta \mu N_\nu}}, \quad (2.2)$$

aparece como a probabilidade de ocorrência de um estado microscópico  $\nu$  com energia  $E_\nu$  e número de partículas  $N_\nu$  em contato com um reservatório com potencial químico  $\mu$  e temperatura  $T$ , onde  $\beta = 1/k_B T$ , sendo  $k_B$  a constante de Boltzmann.

Definindo a função de partição como

$$Z = \sum_\nu e^{-\beta E_\nu + \beta \mu N_\nu}, \quad (2.3)$$

pode-se calcular o valor esperado  $\langle Q \rangle$  de qualquer observável  $Q$  como a média ponderada

$$\langle Q \rangle = \sum_{\nu} Q_{\nu} p_{\nu} = \frac{1}{Z} \sum_{\nu} Q_{\nu} e^{-\beta E_{\nu} + \beta \mu N_{\nu}}. \quad (2.4)$$

A grande motivação do método de Monte Carlo está na inviabilidade de se realizar uma amostragem completa deste conjunto de microestados ( $2^N$  para o modelo de Ising, por exemplo). Assim, é comum definir um subconjunto composto por  $M$  estados obtidos a partir uma distribuição de probabilidades  $p_{\nu}$ . Assim, define-se o estimador  $Q_M$  como

$$Q_M = \frac{\sum_{i=1}^M Q_{\nu_i} p_{\nu_i}^{-1} e^{-\beta E_{\nu_i} + \beta \mu N_{\nu_i}}}{\sum_{j=1}^M p_{\nu_j}^{-1} e^{-\beta E_{\nu_j} + \beta \mu N_{\nu_j}}}, \quad (2.5)$$

sendo que  $\lim_{M \rightarrow \infty} Q_M = \langle Q \rangle$ .

É necessário, então, a escolha de uma distribuição de probabilidades  $p_{\nu}$  para que a amostra, do ponto de vista da distribuição de Boltzmann, seja representativa do sistema em estudo. Uma escolha possível é a própria distribuição de Boltzmann, fazendo com que a Equação ( 2.5) fique

$$Q_M = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M Q_{\nu_i}, \quad (2.6)$$

de forma que o conhecimento da função de partição  $Z$  deixa de ser necessário para a obtenção dos observáveis de interesse. Tal forma de amostragem é conhecida como *amostragem por importância*. Esta forma de amostragem garante que os estados mais relevantes do sistema sejam visitados mais frequentemente, tornando esta amostragem mais eficiente. Entretanto, escolher um estado por meio de uma distribuição uniforme e então considerá-lo de acordo com a probabilidade de Boltzmann não resolve o problema de que a maior parte dos estados gerados será pouco significativa. É necessário que os próprios estados gerados satisfaçam a distribuição de Boltzmann. Este problema é resolvido com o uso dos chamados *processos de Markov* [12].

Em um processo de Markov, um estado  $\eta$  é gerado a partir de um estado  $\nu$  segundo uma taxa de transição  $P(\nu \rightarrow \eta)$ . Isso faz com que um estado dependa somente do estado imediatamente anterior. A sucessão de estados gerados por um processo de Markov é chamada de *cadeia de Markov*. Para que a cadeia de Markov gerada satisfaça uma determinada distribuição (de Boltzmann, neste caso), é necessário que a taxa de transição  $P(\nu \rightarrow \eta)$  satisfaça as condições de balanço e ergodicidade.

A equação mestra, responsável por descrever a variação temporal da probabilidade  $p_{\nu}$  de o sistema estar no estado  $\nu$  pode ser escrita como

$$\frac{dp_{\nu}}{dt} = \sum_{\eta} p_{\eta} P(\eta \rightarrow \nu) - \sum_{\eta} p_{\nu} P(\nu \rightarrow \eta). \quad (2.7)$$

Portanto, a variação temporal da probabilidade de se estar no estado  $\nu$  se dá pela soma de todos os estados que levam até  $\nu$ , subtraídos de todos os estados alcançáveis por  $\nu$ , de forma análoga à equação da continuidade, indicando a conservação de probabilidade no sistema.

A condição de ergodicidade requer que, estando o sistema em um estado arbitrário  $\nu$ , qualquer outro estado  $\eta$  possa ser gerado por meio de uma cadeia finita de Markov. Esta condição assegura que nenhum estado tenha probabilidade nula de acontecer, deixando de satisfazer a distribuição de Boltzmann.

Em conjunto com a condição de ergodicidade, a condição de balanço assegura que exista um estado estacionário para o sistema. Igualando a variação temporal a zero na Equação ( 2.7) temos que

$$\sum_{\eta} p_{\eta} P(\eta \rightarrow \nu) = \sum_{\eta} p_{\nu} P(\nu \rightarrow \eta). \quad (2.8)$$

Mais restrita que a condição de balanço, a condição do balanço detalhado impõe que a probabilidade de o sistema ir para o estado  $\nu$  partindo do estado  $\eta$  é a mesma de o sistema sair do estado  $\nu$  e ir para  $\eta$ . Assim

$$p_{\nu} P(\nu \rightarrow \eta) = p_{\eta} P(\eta \rightarrow \nu). \quad (2.9)$$

Para que a distribuição de Boltzmann seja obtida, basta que escolhamos a probabilidade de transição de  $\nu$  para  $\eta$  de acordo com o peso de Boltzmann, ou seja,

$$\frac{P(\nu \rightarrow \eta)}{P(\eta \rightarrow \nu)} = \frac{p_{\eta}}{p_{\nu}} = e^{-\beta(E_{\eta} - E_{\nu})}. \quad (2.10)$$

Pode-se ainda escrever a probabilidade de transição  $P(\nu \rightarrow \eta)$  como o produto de duas quantidades

$$P(\nu \rightarrow \eta) = g(\nu \rightarrow \eta) A(\nu \rightarrow \eta), \quad (2.11)$$

sendo o fator  $g(\nu \rightarrow \eta)$  a probabilidade de que o estado  $\eta$  seja selecionado, partindo do estado  $\nu$ , e o fator  $A(\nu \rightarrow \eta)$  a probabilidade de aceitação deste novo estado  $\eta$ .

Como as alterações no sistema (*trial movements*) consideradas neste trabalho são a inserção e a remoção de uma partícula, uma transição do tipo ( $\eta \rightarrow \nu$ ) pode ser escrita como ( $N \rightarrow N \pm 1$ ), onde  $N$  é o número de partículas no sistema. Portanto, o *ensemble* adequado é o *ensemble* grande canônico, caracterizado pelo número variável de partículas que estão sujeitas a um potencial químico fixo.

Fazendo o uso da função de partição grande canônica na forma [11]

$$Z(\mu, V, T) = \sum_{N=0}^{\infty} \frac{e^{\beta\mu N} V^N}{N!} \sum_i e^{-\beta E_i}, \quad (2.12)$$

onde  $V$  é o volume do sistema e  $E_i$  é a energia da partícula  $i$ , pode-se obter o peso de Boltzmann

$$p_{\mu, V, T} \propto \frac{e^{\beta\mu N} V^N}{N!} e^{-\beta E_i}. \quad (2.13)$$

Assim, para satisfazer a condição de balanço detalhado escolhe-se

$$g(N \rightarrow N + 1) = g(N + 1 \rightarrow N), \quad (2.14)$$

o que faz com que a razão entre as probabilidades de aceitação seja dada por

$$\frac{A(N \rightarrow N + 1)}{A(N + 1 \rightarrow N)} = \frac{e^{\beta\mu V}}{N + 1} e^{-\beta(E_{N+1} - E_N)}. \quad (2.15)$$

Um cálculo análogo pode ser feito para a remoção de uma partícula. Assim, o algoritmo de Metropolis [13], utilizado neste trabalho, consiste em propor um estado  $\eta$  partindo de um estado  $\nu$  e aceitar este estado de acordo com a taxa de aceitação, seguindo as regras

$$A(N \rightarrow N + 1) = \min \left[ 1, \frac{V e^{\beta\mu}}{N + 1} e^{-\beta(E_{N+1} - E_N)} \right], \quad (2.16)$$

e

$$A(N \rightarrow N - 1) = \min \left[ 1, \frac{N e^{-\beta\mu}}{V} e^{-\beta(E_{N-1} - E_N)} \right]. \quad (2.17)$$

O potencial entre duas partículas  $(i, j)$  considerado neste trabalho é da interação tipo caroço-duro

$$E_{ij} = \begin{cases} \infty, & \text{se } j \text{ é vizinho de } i \\ 0, & \text{caso contrário,} \end{cases} \quad (2.18)$$

sendo que a energia total em uma configuração com  $N$  partículas é

$$E_N = \sum_{i < j}^N E_{ij}. \quad (2.19)$$

Assim, para qualquer configuração permitida pelas exclusões, as equações ( 2.16) e ( 2.17) assumem uma forma relativamente simples

$$A(N \rightarrow N + 1) = \min \left[ 1, \frac{V e^{\beta\mu}}{N + 1} \right], \quad (2.20)$$

e

$$A(N \rightarrow N - 1) = \min \left[ 1, \frac{N e^{-\beta\mu}}{V} \right]. \quad (2.21)$$

É importante notar a diferença desta abordagem para a utilizada no algoritmo de Metropolis para o modelo de Ising. Enquanto que no modelo de Ising escolhe-se um sítio aleatoriamente e, então, altera-se o estado deste, na abordagem utilizada neste trabalho escolhe-se uma modificação (inserir/remover) para então escolher a partícula em um dado sítio a ser modificado.

## 2.2 Transição de Fase e Observáveis de Interesse

Para analisar uma transição de fase é necessário definir um observável responsável por caracterizar a fase em que o sistema se encontra. Como a única variável que não se mantém constante durante a simulação é o número de partículas no sistema, utiliza-se a densidade como uma forma de mensurar a fase atual do sistema, sendo a fase líquida menos densa que a fase sólida. Entretanto, por variar muito pouco com o potencial químico nos sistemas estudados, a densidade muitas vezes não permite definir com precisão o ponto onde a transição ocorre, ou seja, o potencial químico crítico  $\mu_c$ . Este problema aparece principalmente em transições de fase contínuas, sendo que em transições de primeira ordem, no limite termodinâmico, a curva da densidade em função do potencial químico apresenta uma descontinuidade em  $\mu_c$ .

Assim, em cada um dos sistemas deverá ser definido um parâmetro de ordem ( $q$ ) que adquire, no limite termodinâmico, valor nulo na fase desordenada e valor finito na fase ordenada. Este parâmetro de ordem deve levar em consideração a simetria e a exclusão dos vizinhos da rede sendo estudada. A importância da definição deste parâmetro está na utilização deste na obtenção dos expoentes críticos, uma vez que os valores adquiridos por este escalam com o tamanho do sistema considerado (ver seção 2.5).

A forma como o parâmetro de ordem é normalmente definido em redes cristalinas é pela construção de sub-redes de forma que, quando na configuração de máxima densidade permitida pela exclusão, apenas um conjunto bem definido destas sub-redes esteja ocupado. Portanto, espera-se que na fase líquida (pouco densa) todas as sub-redes sejam igualmente ocupadas, passando por uma quebra de simetria nas suas ocupações a medida que o sistema ordena e aumenta sua densidade.

A Figura 2.1 mostra o contraste entre as fases líquida e sólida, com condições de contorno periódicas, explicitando o ordenamento na fase sólida e dando indícios de um parâmetro de ordem capaz de captar a quebra de simetria.

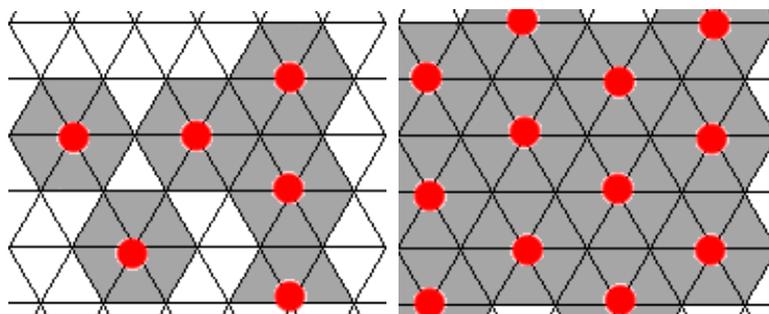


Figura 2.1: Contraste entre as fases (esq) líquida e (dir) sólida. Os pontos vermelhos representam partículas enquanto que a área em cinza representa a região excluída para o caso 1NN da rede triangular.

Definido um parâmetro de ordem, pode-se obter a flutuação deste ao longo de uma simulação. Um observável importante é a susceptibilidade do parâmetro de ordem, definida como

$$\chi = \beta L^2 (\langle q^2 \rangle - \langle q \rangle^2) \quad (2.22)$$

para o caso bidimensional.

Assim como o parâmetro de ordem, a susceptibilidade é utilizada na obtenção dos expoentes críticos.

## 2.3 Repesagem de Histogramas

Dado o algoritmo de Metropolis, a obtenção dos observáveis de interesse e caracterização da transição de fase se dá pela simulação do sistema em diferentes valores do potencial químico  $\mu$  em diferentes tamanhos de rede. Entretanto, tal abordagem seria pouco eficiente, uma vez que o tempo computacional necessário para realizar uma simulação Monte Carlo deste tipo cresce com o volume do sistema simulado.

Desenvolvido por Ferrenberg e Swendsen [14], o método da repesagem de histogramas permite a extrapolação dos dados de uma única simulação com parâmetros  $\{X_0^i\}$  para outros parâmetros  $\{X^i\}$ , outros valores do potencial químico  $\mu$ , por exemplo. Assim, é necessária apenas uma simulação longa, geralmente no potencial químico próximo ao da transição de fase, para que os dados sejam extrapolados para potenciais químicos próximos. Por isso, o método da repesagem de histogramas permite a obtenção dos pontos de máximo na susceptibilidade, fator crucial na obtenção dos expoentes críticos, o que não seria possível de outra forma, uma vez que seria necessário um número muito grande de simulações. Seja

$$p_{\nu_i} = \frac{1}{Z_0} e^{-\beta_0 E_{\nu_i} - \beta_0 \mu_0 N_{\nu_i}}$$

a probabilidade de Boltzmann do estado  $\nu_i$  para a temperatura  $\beta_0 = 1/k_B T_0$  e potencial químico  $\mu_0$ .

Inserindo este resultado na equação para o estimador  $Q_N$  (Eq. 2.5), obtém-se

$$Q_N = \frac{\sum_{i=1}^N Q_{\nu_i} \exp[-(\beta - \beta_0) E_{\nu_i} + (\beta \mu - \beta_0 \mu_0) N_{\nu_i}]}{\sum_{j=1}^N \exp[-(\beta - \beta_0) E_{\mu_j} + (\beta \mu - \beta_0 \mu_0) N_{\nu_j}]}, \quad (2.23)$$

que é a equação fundamental do método da repesagem de histogramas. Assim, tendo os dados simulados para os parâmetros  $\beta_0$  e  $\mu_0$ , pode-se extrapolar para a temperatura  $\beta$  e potencial químico  $\mu$  por meio da Equação (2.23).

Entretanto, é necessário levar em conta as limitações do método. Como, pelo teorema do limite central, as medidas obtidas durante uma simulação obedecem uma distribuição

gaussiana, os dados repesados devem satisfazer esta mesma distribuição em torno da nova média. Caso, ao repesar o histograma das medidas em uma simulação, este não corresponder, aproximadamente, à uma distribuição gaussiana, conclui-se que os dados repesados não mais representam adequadamente uma simulação neste novo parâmetro. Assim, apenas uma região próxima a do parâmetro originalmente simulado pode ser repesada usando esta técnica.

## 2.4 Análise de Erros

Como as medidas feitas durante uma simulação de Monte Carlo e geradas por uma cadeia de Markov apresentam correlação temporal, o uso da variância normalmente utilizada não é adequado, pois pode levar a uma subestimação dos erros estatísticos [15].

Uma medida para a função de correlação em uma cadeia de Markov pode ser obtida por [4]

$$\xi(t) = \sum_{t'} [q(t')q(t'+t) - \langle q \rangle^2]. \quad (2.24)$$

Assim, assumindo que a função de autocorrelação caia com a forma

$$\xi(t) \sim e^{-t/\tau}, \quad (2.25)$$

pode-se obter o tempo de autocorrelação  $\tau$ .

A Figura 2.2 mostra uma medida feita para o tempo de autocorrelação para a rede triangular com exclusão 2NN.

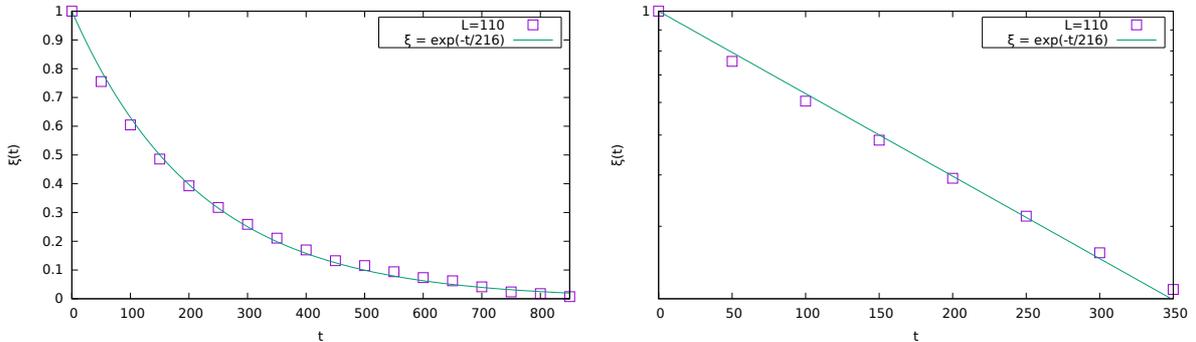


Figura 2.2: Comprimento de autocorrelação para a rede triangular com exclusão de até segundos vizinhos. O eixo  $y$  da figura da direita está em escala logarítmica, explicitando o comportamento exponencial. O valor de  $\tau$  encontrado foi  $\tau = 216$ .

Uma vez determinado o tempo de autocorrelação, as médias dos observáveis de interesse são obtidas considerando-se apenas as medidas feitas com aproximadamente um tempo

de correlação  $\tau$  entre elas, de forma que, se foram realizadas  $N$  medidas, somente  $N/\tau$  são utilizadas na obtenção das médias.

Para analisar o erro referente à média de um observável que depende de um conjunto de medidas, como  $C_V$  ou  $\chi$ , utiliza-se a técnica de *binning*, onde divide-se a série temporal em  $N_B$  blocos de tamanho  $k$  muito maior que o tempo de correlação ( $k \gg \tau$ ), fazendo com que estes sejam decorrelacionados entre si. Pode-se obter o erro associado ao observável  $Q$  por meio da equação [15].

$$\varepsilon_Q^2 = \frac{1}{N_B(N_B - 1)} \sum_{n=1}^{N_B} (Q_{B,n} - \bar{Q})^2, \quad (2.26)$$

onde  $Q_{B,n}$  é a média do observável  $Q$  referente ao bloco  $n$ , de forma que

$$Q_{B,n} = \frac{1}{k} \sum_{i=1}^k Q_{(n-1)k+i}, \quad (2.27)$$

com  $n = 1, 2, \dots, N_B$ .

Estas análises estatísticas foram realizadas em todos os sistemas aqui apresentados, de forma a obter observáveis estatisticamente relevantes.

## 2.5 Escala de Tamanho Finito

Como já mencionado, o estudo de fenômenos críticos, como transições de fase, frequentemente passa pela obtenção dos chamados expoentes críticos. A importância da obtenção destes expoentes para um determinado sistema está na existência de classes de universalidade. Um conjunto de expoentes críticos determina uma classe de universalidade, sendo sistemas com o mesmo conjunto de expoentes críticos pertencentes a uma mesma classe. Assim, pode-se estudar sistemas relativamente simples com o objetivo de obter informações sobre as transições de fase de um sistema mais complexo que pertence à mesma classe de universalidade do sistema estudado [9].

A obtenção dos expoentes críticos é feita por meio da técnica de escala de tamanho finito. A Figura 2.3 mostra os resultados obtidos para a susceptibilidade ( $\chi$ ) em função do potencial químico para três tamanhos diferentes de rede. Em geral, a susceptibilidade escala com o tamanho da rede com os expoentes críticos  $\gamma$  e  $\nu$ , o comprimento de correlação escala com a razão  $1/\nu$  e o parâmetro de ordem escala com a razão  $\beta/\nu$ .

$$\xi \sim L^{1/\nu}, \quad (2.28a)$$

$$\chi \sim L^{\gamma/\nu}, \quad (2.28b)$$

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

Quando os resultados são ajustados de acordo com os expoentes críticos, as curvas para diferentes tamanhos de rede devem colapsar.

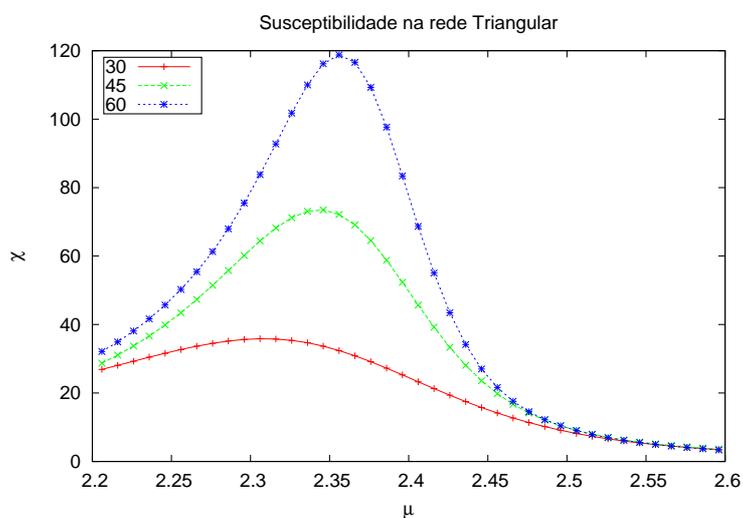


Figura 2.3: A susceptibilidade escala com o tamanho da rede de acordo com os expoentes críticos.

Assim, analisando as três quantidades definidas em ( 2.28) para diferentes tamanhos de redes pode-se obter os expoentes críticos e, por consequência, a classe de universalidade do sistema estudado.

# Capítulo 3

## Resultados

Estabelecidas as técnicas a serem usadas, foram realizadas simulações Monte Carlo no *ensemble* Grande Canônico nas redes triangular e *honeycomb*. Após a análise estatística dos dados e a aplicação da técnica de repesagem de histogramas, foi determinada a natureza da transição de fase, contínua ou descontínua, obtendo os expoentes críticos sempre que esta se mostrou contínua. Os resultados obtidos estão apresentados a seguir.

### 3.1 Rede Triangular

#### 3.1.1 1NN

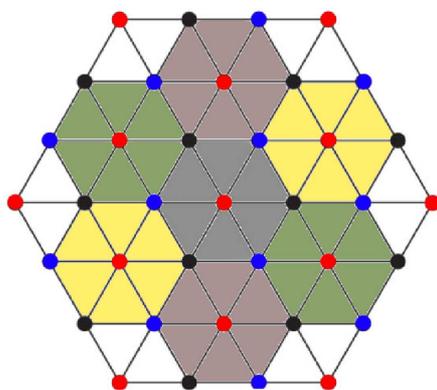


Figura 3.1: Rede triangular com exclusão de primeiros vizinhos (1NN) - Configuração de máxima densidade.

Ao excluir os vizinhos mais próximos, uma partícula na rede triangular adquire uma área equivalente a de um hexágono, fazendo com que a densidade máxima deste sistema

seja  $\rho_{max} = 1/3$ . A Figura 3.2 mostra a curva da densidade em função do potencial químico.

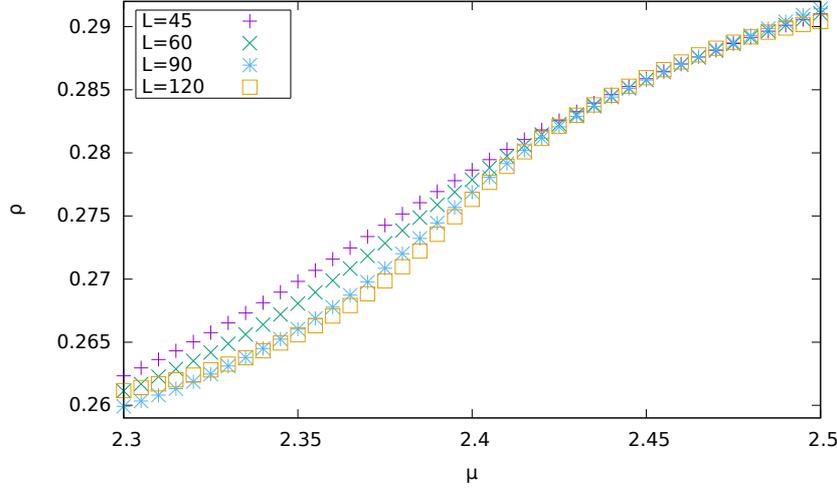


Figura 3.2: Densidade em função do potencial químico para a rede triangular com exclusão 1NN. Por ser uma transição de fase contínua, a curva da densidade não permite, em geral, a obtenção dos expoentes críticos com precisão.

Observando a configuração de empacotamento máximo, divide-se a rede em três sub-redes, como indicado pelas cores dos vértices na Figura 3.1, de forma que, na configuração de máxima densidade, somente uma destas sub-redes seja ocupada. Portanto, o sistema passa por uma quebra de simetria na ocupação das sub-redes a medida que sua densidade aumenta, caracterizando a transição da fase líquida para a fase sólida.

Assim, pode-se definir um parâmetro de ordem ( $q_1$ ) baseado na ocupação destas sub-redes

$$q_1 = \frac{1}{2\rho_{max}} (|\rho_1 - \rho_2| + |\rho_1 - \rho_3| + |\rho_2 - \rho_3|), \quad (3.1)$$

onde  $\rho_i$  é a densidade da sub-rede  $i$ . Este parâmetro deve possuir valor finito na fase ordenada e valor nulo quando na fase desordenada, ou seja, quando as sub-redes são igualmente ocupadas.

Uma solução analítica para o modelo de hexágonos rígidos foi obtida por Baxter [16] em 1980. A solução prevê uma transição de fase contínua em  $\mu_c = 2.406$  pertencente à classe de universalidade do modelo de Potts de três estados, com expoentes críticos  $\gamma = 13/9 \simeq 1.44$ ,  $\nu = 5/6 \simeq 0.83$  e  $\beta = 1/9 \simeq 0.11$ .

Inicialmente, foram realizadas simulações longas no potencial químico crítico encontrado por Baxter para diferentes tamanhos de rede. De forma a confirmar a correta amostragem em cada uma das simulações, repetiu-se este procedimento de seis a quinze

vezes, dependendo do tamanho da rede, sendo as curvas apresentadas a seguir uma média aritmética das curvas obtidas de forma independente em cada uma das simulações. Assim, pelo teorema do limite central, aumenta-se a precisão dos resultados obtidos e assegura-se a sua relevância estatística.

Em seguida, utilizou-se a técnica de repesagem de histogramas com a finalidade de extrapolar os dados obtidos no potencial químico crítico para outros valores do potencial químico. Os resultados obtidos estão na Figura 3.3.

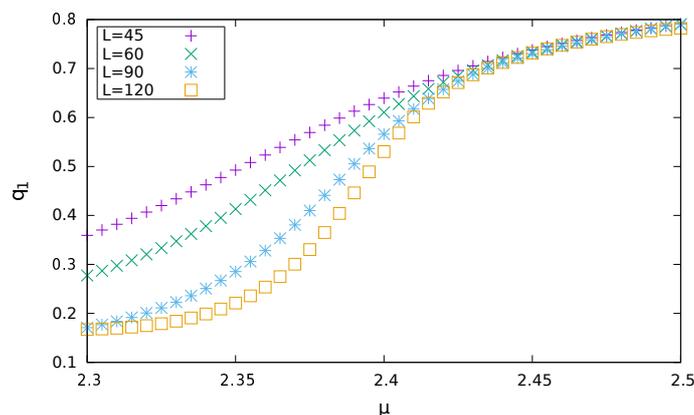


Figura 3.3: Parâmetro de ordem  $q_1$  obtido para cada tamanho de rede. As curvas apresentadas são as médias aritméticas das repetidas simulações.

Por fim, utilizando a análise de escala de tamanho finito, foram obtidos os expoentes críticos por meio do ajuste por lei de potências das quantidades definidas nas Equações (2.28).

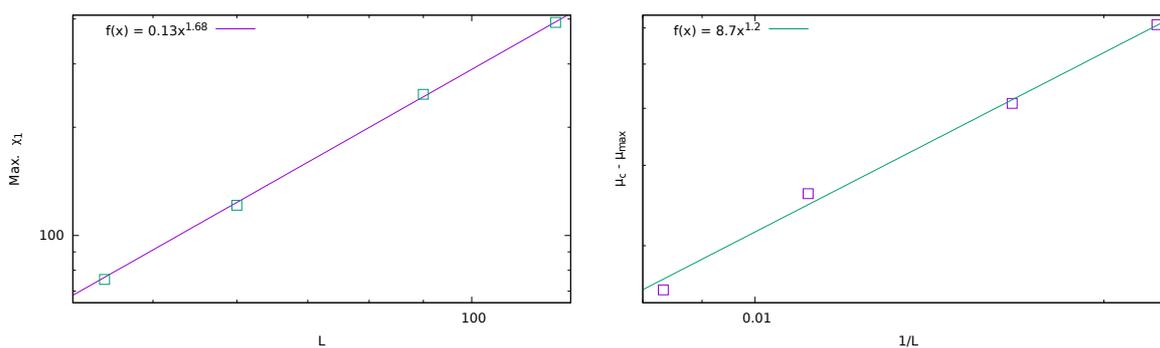


Figura 3.4: Estimativa para os expoentes  $\nu$  e  $\gamma$  utilizando a técnica de escala de tamanho finito. Os pontos foram obtidos por meio de simulações enquanto que a linha foi obtida realizando um ajuste de lei de potências. Foi encontrado  $1/\nu = 1.2$  e  $\gamma/\nu = 1.68$ .

Os resultados apontam para uma transição de fase em  $\mu_c = 2.406$  com expoentes críticos  $\nu = 0.83$ ,  $\gamma = 1.39$  e  $\beta = 0.11$ , estando de acordo com os da classe de universalidade do modelo de Potts de três estados ( $\gamma = 13/9$ ,  $\nu = 5/6$  e  $\beta = 1/9$ ). Estes resultados confirmam o resultado analítico obtido por Baxter.

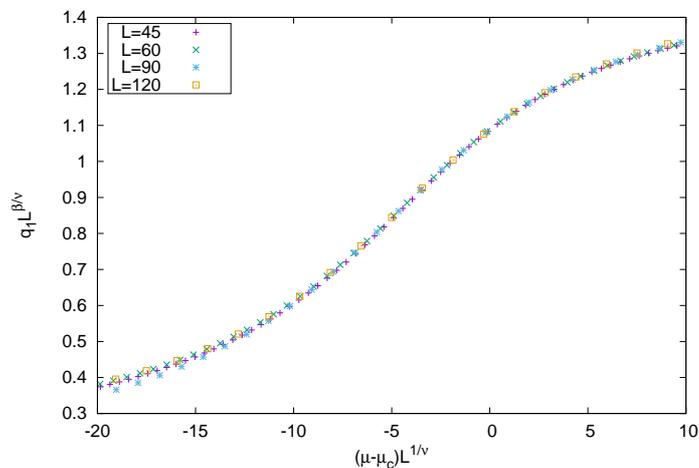


Figura 3.5: Colapso das curvas para o parâmetro de ordem da rede triangular 1NN. Os expoentes usados foram  $\beta = 0.11$  e  $\nu = 0.83$ .

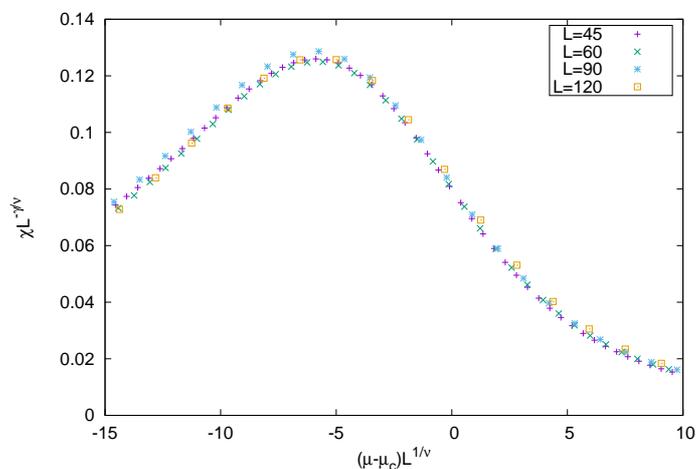


Figura 3.6: Colapso das curvas para as flutuações do parâmetro de ordem da rede triangular 1NN. Os expoentes usados foram  $\gamma = 1.4$  e  $\nu = 0.83$ .

### 3.1.2 2NN

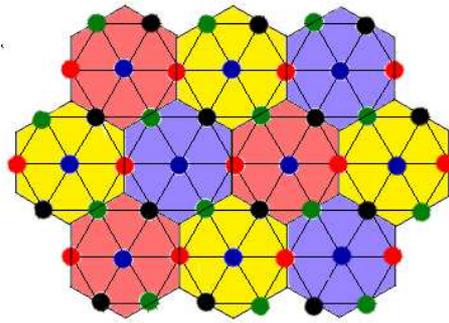


Figura 3.7: Rede triangular com exclusão de até segundos vizinhos (2NN) - Configuração de máxima densidade.

Na exclusão de até segundos vizinhos, a densidade máxima permitida é  $\rho_{max} = 1/4$ . A curva da densidade como função do potencial químico está na Figura 3.8.

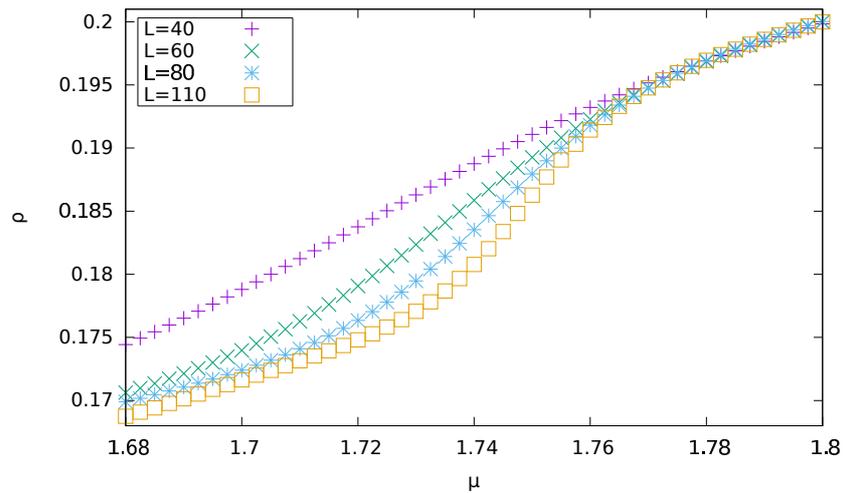


Figura 3.8: Densidade em função do potencial químico para a rede triangular com exclusão 2NN.

É possível dividir a rede em quatro sub-redes, de acordo com os vértices da Figura 3.7, de forma a construir o parâmetro de ordem ( $q_2$ ).

$$q_2 = \frac{1}{\rho_{max}} (|\rho_1 - \rho_2| + |\rho_3 - \rho_4|). \quad (3.2)$$

Para que este parâmetro de ordem possua comensurabilidade é necessário que o tamanho da rede  $L$  seja um número par, de forma que, pelas condições de contorno periódicas, a divisão das sub-redes seja consistente.

Os resultados encontrados por Zhang e Deng [10] por meio de simulações Monte Carlo apontam para uma transição de fase de segunda ordem em  $\mu_c = 1.757$ , com expoentes críticos correspondentes à classe de universalidade do modelo de Potts de quatro estados.

Pela análise da simetria do sistema, pode-se fazer uma analogia com o modelo de Potts de quatro estados, sendo o estado de uma partícula representado pela sub-rede a que esta pertence. Como o sistema passa por uma quebra de simetria na ocupação destas sub-redes, isto é, deixa de ocupar todas igualmente para dar preferência a um subconjunto destas, conclui-se que o sistema estudado passa por uma transição de fase semelhante aquela que ocorre no modelo de Potts de quatro estados. Portanto, espera-se que este sistema pertença à esta classe de universalidade, com expoentes  $\gamma = 1.16$ ,  $\beta = 0.083$  e  $\nu = 0.66$ .

Uma simulação inicial neste potencial químico não apresentou dois picos no histograma da densidade, confirmando a natureza de segunda ordem da transição de fase. Assim, foram realizadas simulações longas neste potencial químico de forma a utilizar a técnica de repesagem de histogramas e a análise de escala de tamanho finito na obtenção dos expoentes críticos desta transição.

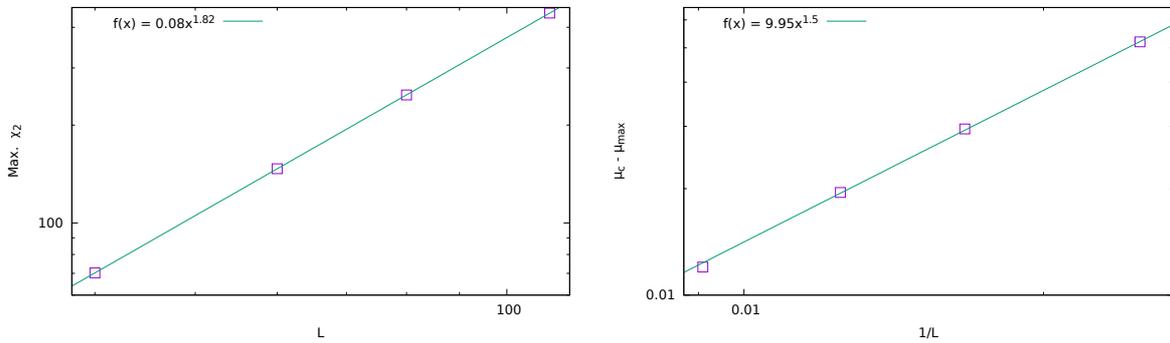


Figura 3.9: Estimativa para os expoentes  $\nu$  e  $\gamma$  utilizando a técnica de escala de tamanho finito. Os pontos foram obtidos por meio de simulações enquanto que a linha foi obtida realizando um ajuste de lei de potências. Foi encontrado  $1/\nu = 1.5$  e  $\gamma/\nu = 1.82$ .

Os expoentes encontrados são próximos aos da classe de universalidade do modelo de Potts de quatro estados. Assim, pode-se obter o colapso das curvas para o parâmetro de ordem e para a susceptibilidade, confirmando a classe de universalidade da transição de fase.

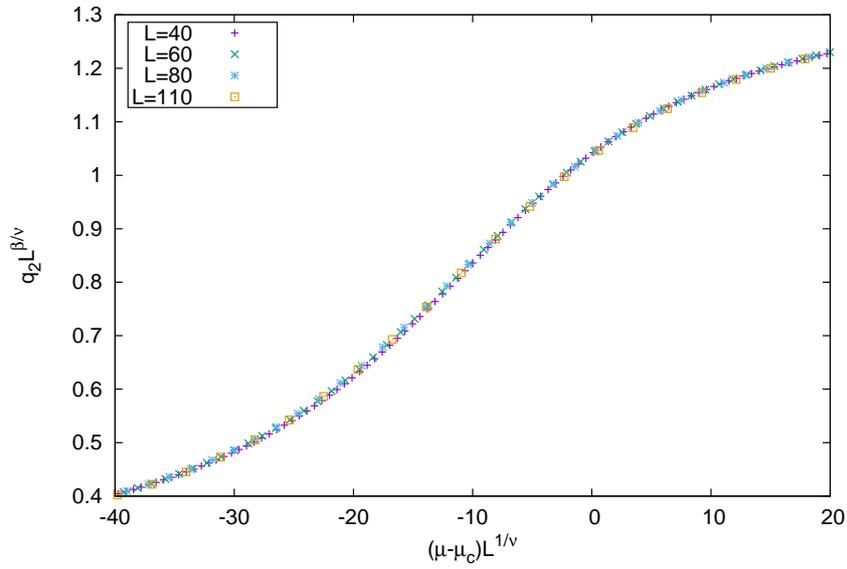


Figura 3.10: Colapso das curvas para o parâmetro de ordem da rede triangular 2NN. Os expoentes usados foram  $\beta = 0.083$  e  $\nu = 0.66$ .

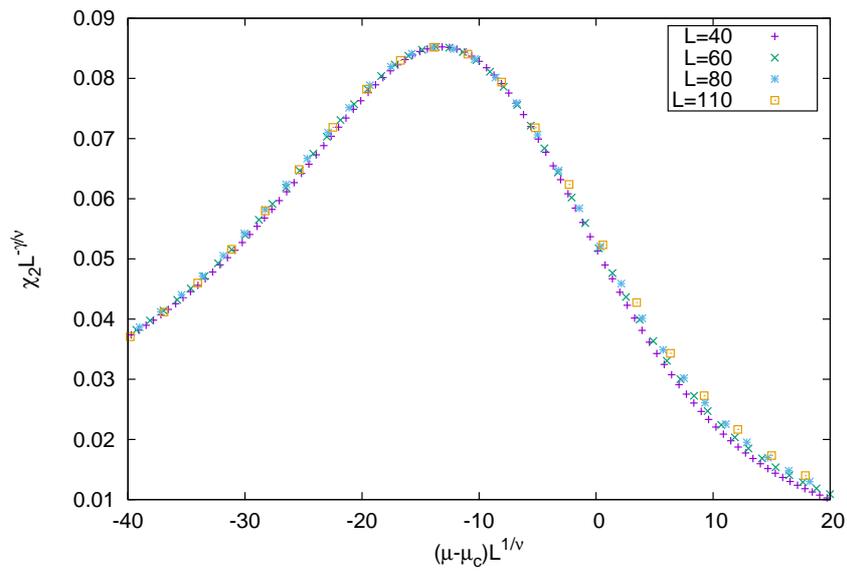


Figura 3.11: Colapso das curvas para as flutuações do parâmetro de ordem da rede triangular 2NN. Os expoentes usados foram  $\gamma = 1.2$  e  $\nu = 0.66$

### 3.1.3 3NN

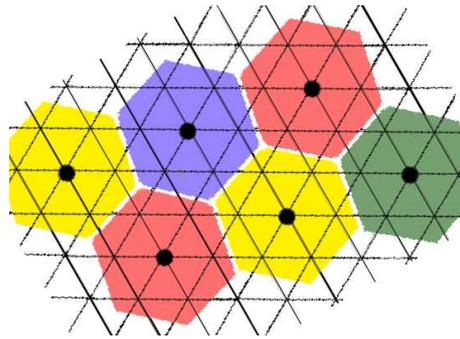


Figura 3.12: Rede triangular com exclusão de até terceiros vizinhos (3NN) - Configuração de máxima densidade

A densidade máxima permitida pela exclusão de até terceiros vizinhos é  $\rho_{max} = 1/7$ . Este sistema foi estudado por Runnels em [17] via método matricial, sendo encontrada uma transição de fase de primeira ordem em  $\mu_c = 4.7$ .

Diferentemente dos casos anteriores, a exclusão de até terceiros vizinhos apresenta coexistência das fases durante uma simulação. Este fato é evidenciado pela presença de dois picos no histograma da densidade como função do potencial químico, como visto na Figura 3.13.

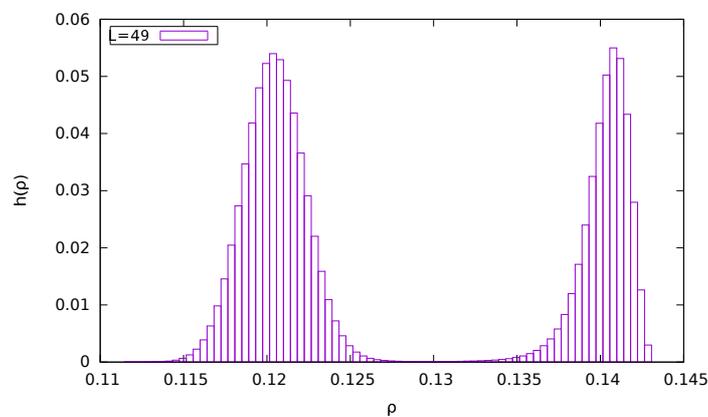


Figura 3.13: Histograma da densidade em uma simulação próxima ao potencial químico crítico ( $\mu_c = 4.473$ ) na exclusão 3NN. A coexistência das duas fases evidencia a transição de primeira ordem.

Devido à natureza de primeira ordem da transição de fase, é difícil a amostragem das duas fases coexistentes por meio do algoritmo de Metropolis. Este problema aparece pois,

de acordo com a Figura 3.13, seria necessária uma cadeia de Markov muito específica e pouco provável de forma a levar o sistema da fase de baixa densidade para a fase de alta densidade.

Portanto, neste sistema, foi utilizada uma amostragem multicanônica por meio do algoritmo de Wang-Landau [18]. Este algoritmo visa a obtenção de uma estimativa para a densidade de estados do sistema realizando um *random walk* nos diferentes estados configuracionais. O algoritmo consiste em propor um novo estado ( $\nu \rightarrow \eta$ ) e aceitar este estado de forma que o sistema tenda aos estados menos visitados anteriormente. Desta forma, pode-se estimar razão entre a densidade de estados  $\nu$  e  $\eta$ .

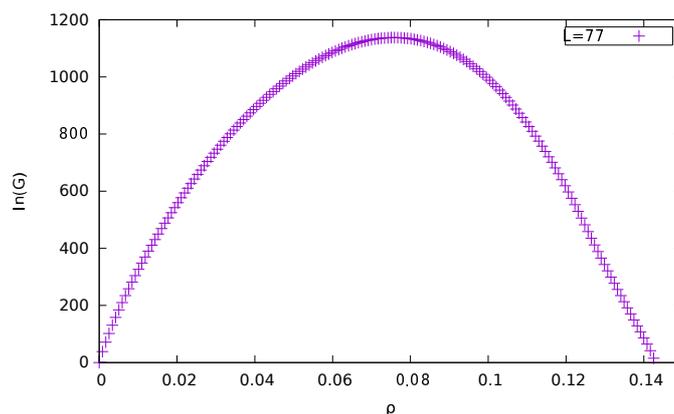


Figura 3.14: Estimativa para a densidade de estados ( $G$ ) por meio do algoritmo de Wang-Landau para a exclusão 3NN da rede triangular.

Analisando a curva da densidade como função do potencial químico ( 3.15), pode-se obter o ponto crítico ( $\mu_c$ ) observando o valor de  $\mu$  onde as curvas se cruzam. O valor encontrado para o potencial químico crítico foi  $\mu_c = 4.473$ , diferindo daquele encontrado por Runnels ( $\mu_c = 4.7$ ).

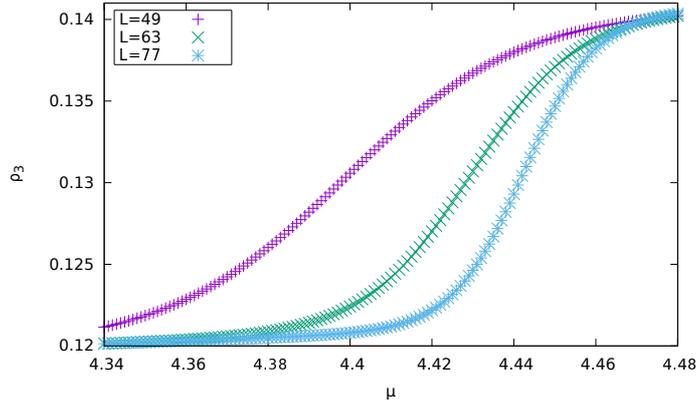


Figura 3.15: Densidade como função do potencial químico para a exclusão 3NN. O ponto crítico é obtido analisando o valor de  $\mu$  em que as curvas se interceptam. O valor obtido foi  $\mu_c = 4.47$ .

Pode-se, ainda, definir um parâmetro de ordem  $q_3$  baseado em duas diferentes numerações para as sub-redes, sendo uma numeração de 1 a 7 e a outra de 8 a 14.

$$q_3 = \left\langle \sum_{i=0}^7 \sum_{j=i}^7 |\rho_i - \rho_j| - \sum_{i=8}^{14} \sum_{j=i}^{14} |\rho_i - \rho_j| \right\rangle \quad (3.3)$$

As duas diferentes numerações correspondem às duas orientações possíveis para a configuração de empacotamento máximo. Portanto, existe uma quebra de simetria na orientação das partículas, bem como na ocupação das sub-redes. A curva do parâmetro de ordem como função do potencial químico pode ser vista na Figura 3.16.

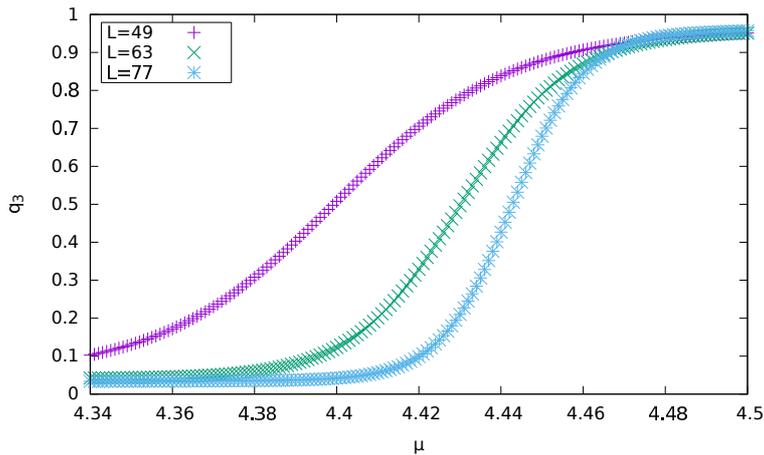


Figura 3.16: Parâmetro de ordem como função do potencial químico para a exclusão 3NN na rede triangular.

Como a transição de fase é de primeira ordem, a análise de escala de tamanho finito torna-se direta, sendo que as quantidades anteriormente definidas escalam com  $L^2$  ou  $L^{-2}$  [19].

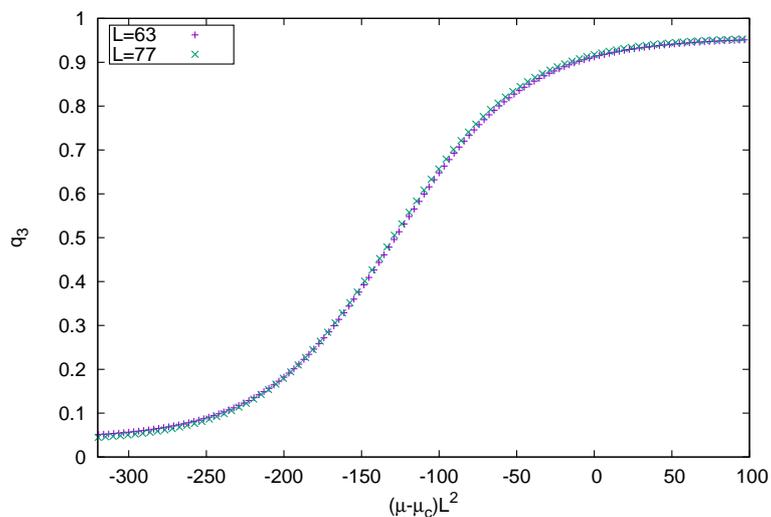


Figura 3.17: A curva do parâmetro de ordem para o caso 3NN escala com  $L^2$  pois a transição é de primeira ordem. São mostrados os resultados para  $L \geq 63$ .

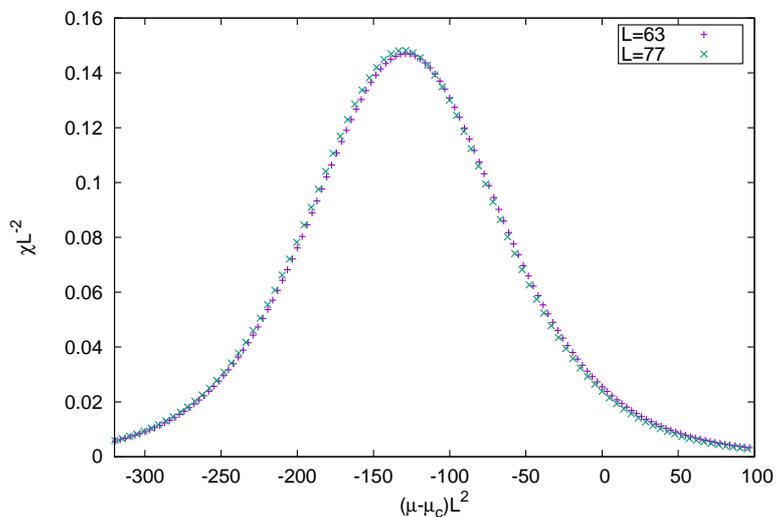


Figura 3.18: Colapso da curva da susceptibilidade para o caso 3NN na rede triangular. São mostrados os resultados apenas para  $L \geq 63$ .

## 3.2 *Honeycomb*

### 3.2.1 1NN

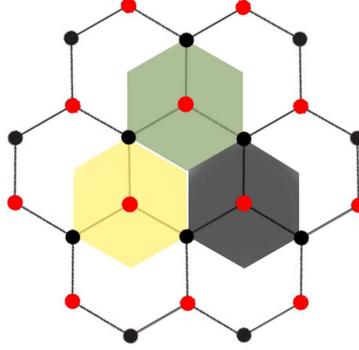


Figura 3.19: Rede *Honeycomb* com exclusão de primeiros vizinhos (1NN)

De maneira análoga às exclusões da rede triangular, pode-se dividir a rede *honeycomb* em duas sub-redes, de forma que os sítios são divididos em um padrão tipo tabuleiro de xadrez, como mostra a Figura 3.19. Assim, sendo somente uma sub-rede ocupada na configuração de máxima densidade, o número máximo de partículas nesta fase deverá ser  $N_{max} = L^2/2$ , ou seja,  $\rho_{max} = 1/2$ .

Um parâmetro de ordem capaz de captar esta quebra de simetria se dá por

$$q_{1hc} = \frac{1}{\rho_{max}} \langle |\rho_1 - \rho_2| \rangle. \quad (3.4)$$

Esta divisão em sub-redes é idêntica aquela da rede quadrada com exclusão de primeiros vizinhos. Portanto, espera-se que a transição seja de segunda ordem com os expoentes correspondentes à classe de universalidade do modelo de Ising 2D, assim como a rede quadrada 1NN.

Foram realizadas simulações rápidas de forma a determinar a região aproximada da transição de fase e se encontrou  $\mu_c \sim 2.0$ . Após realizar uma simulação longa neste valor do potencial químico, utilizou-se a técnica de repesagem de histogramas de forma a obter o parâmetro de ordem e a susceptibilidade deste como função do potencial químico para diferentes tamanhos de rede. Os resultados podem ser vistos nas Figuras 3.20 e 3.21.

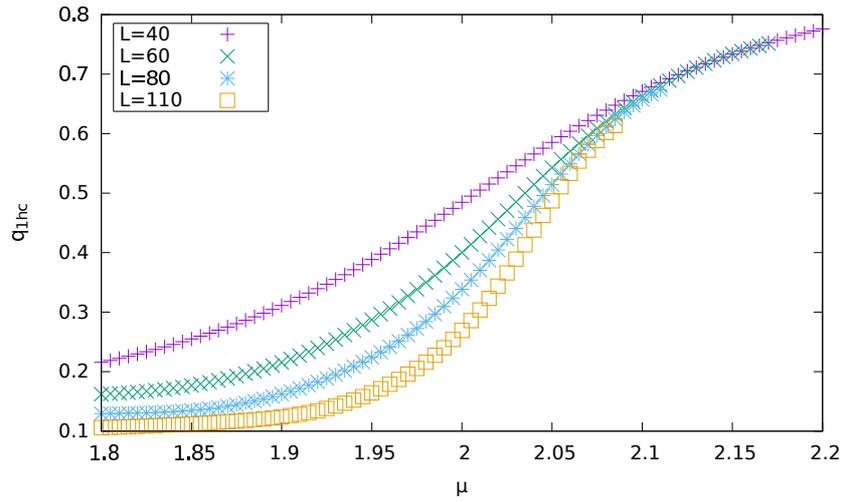


Figura 3.20: Parâmetro de ordem como função do potencial químico para a rede *honeycomb* com exclusão 1NN.

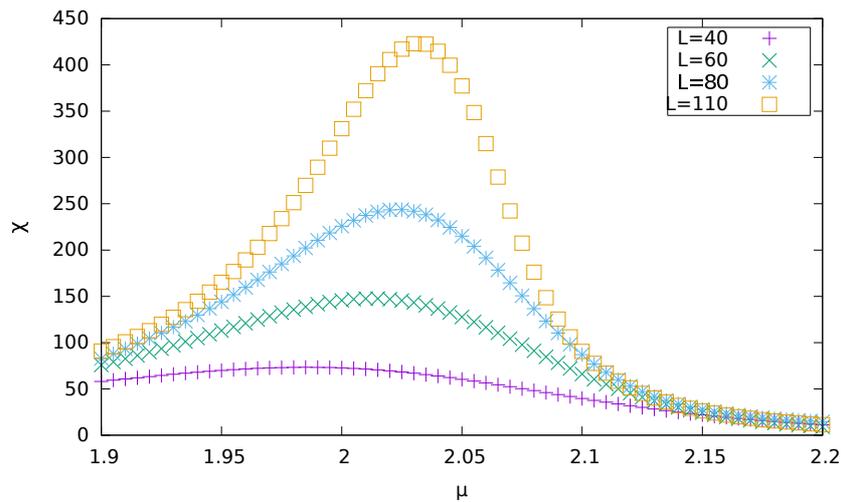


Figura 3.21: Susceptibilidade como função do potencial químico para a rede *honeycomb* com exclusão 1NN.

Utilizando a técnica de escala de tamanho finito com os expoentes referentes à classe de universalidade do modelo de Ising 2D foi possível obter um bom colapso das curvas para o parâmetro de ordem e da susceptibilidade. O potencial químico crítico utilizado neste colapso foi  $\mu_c = 2.06$ .

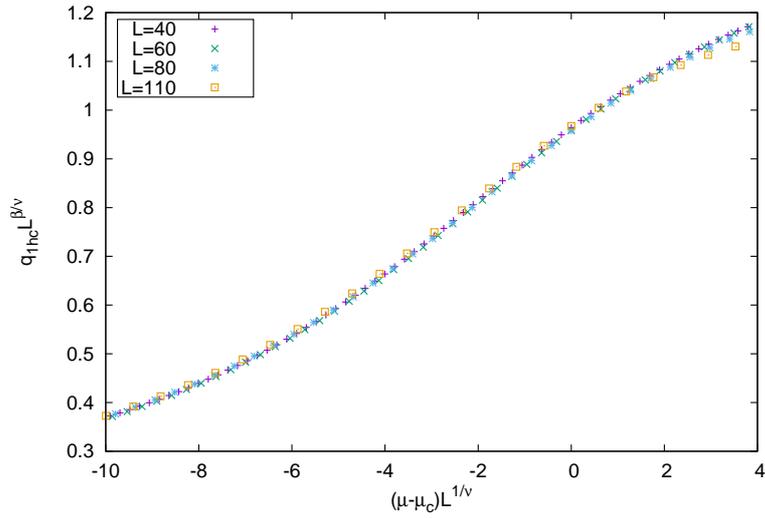


Figura 3.22: Colapso das curvas do parâmetro de ordem para a rede *honeycomb*-1NN. Foram utilizados os expoentes  $\beta = 0.125$ ,  $\nu = 0.986$ , correspondentes ao modelo de Ising 2D, e o potencial químico crítico  $\mu_c = 2.06$ .

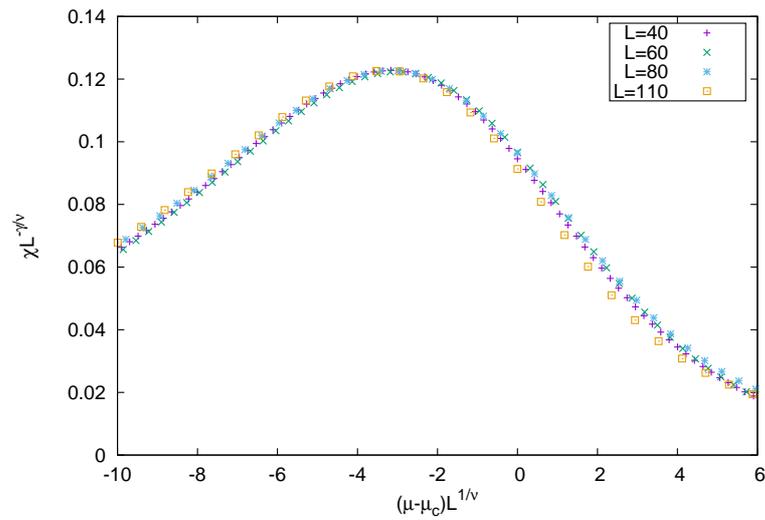


Figura 3.23: Colapso das curvas da susceptibilidade como função do potencial químico para a rede *honeycomb* com exclusão de primeiros vizinhos. Os expoentes utilizados foram  $\gamma = 1.71$  e  $\nu = 0.986$ .

### 3.2.2 Outros Resultados para a Rede *Honeycomb*

A rede *honeycomb* não é uma rede de Bravais, porquanto esta não apresenta simetria translacional ponto a ponto. Entretanto, é possível dividir a rede em duas sub-redes primárias, onde cada sub-rede é uma rede de Bravais. A divisão acontece de acordo com o tipo do sítio, como indicado na Figura 3.24.

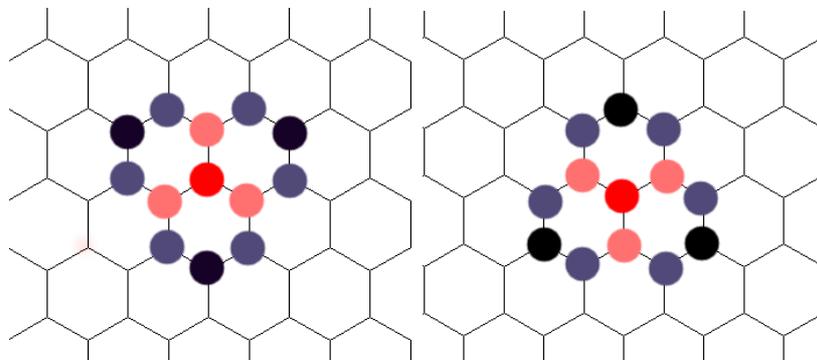


Figura 3.24: Assimetria nos sítios da rede *honeycomb*. A rede pode ser dividida em duas sub-redes primárias, sendo cada sub-rede uma rede de Bravais. O sítio da esquerda pertence à sub-rede primária *A*, enquanto que o sítio da direita pertence à sub-rede *B*. O ponto central representa uma partícula excluindo os sítios mais próximos, até ordem 3 (3NN).

Uma forma de analisar a configuração de máximo empacotamento é por meio da chamada célula de Wigner-Seitz. Sendo um tipo de célula primitiva de uma rede, a célula de Wigner-Seitz pode ser construída tomando-se um ponto da rede e traçando-se um plano perpendicular na bisseção entre este ponto e os vizinhos deste.

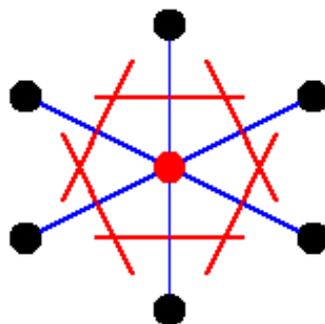


Figura 3.25: Exemplo da construção de uma célula de Wigner-Seitz.

Considerando os vizinhos de um sítio como sendo o sítio mais próximo permitido pela

exclusão, pode-se construir a célula de Wigner-Seitz para as diferentes exclusões na rede *honeycomb*.

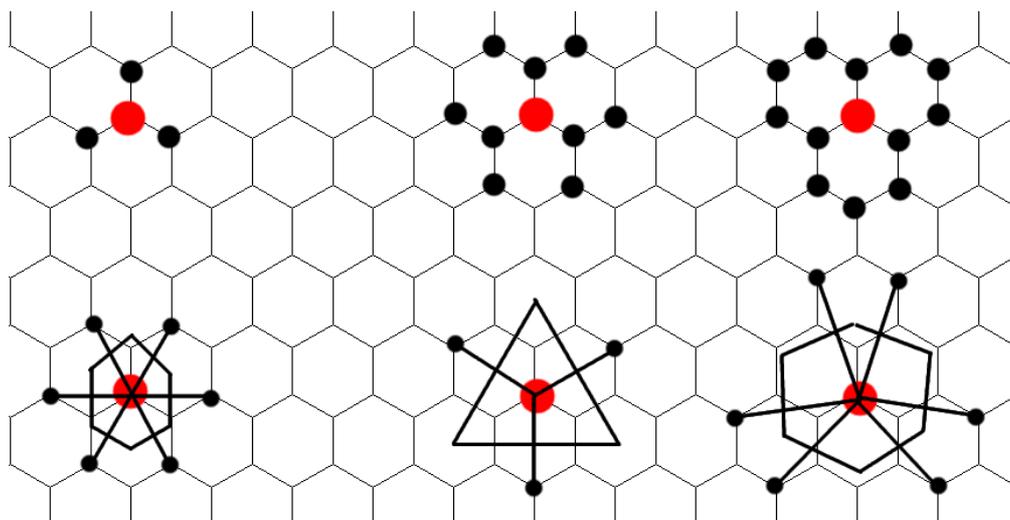


Figura 3.26: Célula de Wigner-Seitz para a rede *honeycomb* nas exclusões 1NN, 2NN e 3NN, respectivamente.

Analisando a Figura 3.26 nota-se que, quando os sítios mais próximos permitidos pela exclusão pertencem à mesma sub-rede primária que o sítio ocupado, como acontece na exclusão 1NN, a célula de Wigner-Seitz se torna simétrica em relação a um eixo horizontal passando pelo centro desta. Quando esta simetria ocorre, a configuração de máximo empacotamento consiste em todas as partículas ocupando somente uma destas duas sub-redes, caracterizando uma quebra de simetria e, assim, uma transição de fase.

Portanto, espera-se que, quando a célula de Wigner-Seitz de um sistema na rede *honeycomb* possuir simetria horizontal, como no caso 1NN na Figura 3.26, este sistema deverá passar por uma transição de fase por meio da quebra de simetria na ocupação das duas sub-redes primárias.

Foram realizadas simulações para as exclusões 2NN e 3NN da rede *honeycomb* de forma a analisar as possíveis transições de fase nestes sistemas. Em ambos os casos, o sistema apresentou dificuldade em atingir o equilíbrio termodinâmico. Os resultados obtidos não demonstram uma transição de fase do tipo sub-rede, como acontece nos outros sistemas estudados neste trabalho. Entretanto, transições de fase do tipo colunar, como encontradas em [1, 8] não podem ser descartadas. A implementação de um algoritmo capaz de atingir o equilíbrio termodinâmico, explorando melhor o espaço de fase dos sistemas, deverá ser de vital importância na caracterização das possíveis transições de fase que estes possam apresentar, especialmente as que ocorrem em altas densidades.

L=80 |  $\rho=0.243$

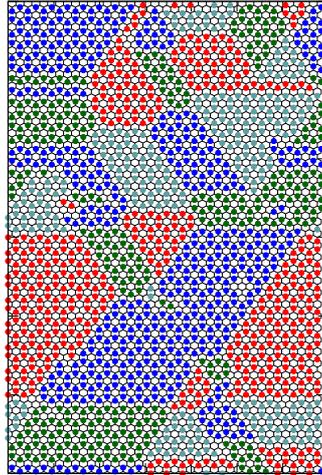


Figura 3.27: *Snapshot* de uma simulação do sistema com exclusão 2NN em um potencial químico alto ( $\mu = 4.5$ ). O sistema aparenta não atingir o equilíbrio termodinâmico, sendo a remoção dos contornos de domínio de extrema dificuldade. As cores representam a divisão da rede em quatro sub-redes. A exclusão 3NN apresenta comportamento semelhante.

De forma a suportar a conjectura da quebra de simetria e, por consequência, uma transição de fase do tipo sub-rede em sistemas onde a célula de Wigner-Seitz apresenta simetria horizontal, foram realizadas simulações nos casos 4NN e 5NN da rede *honeycomb*.

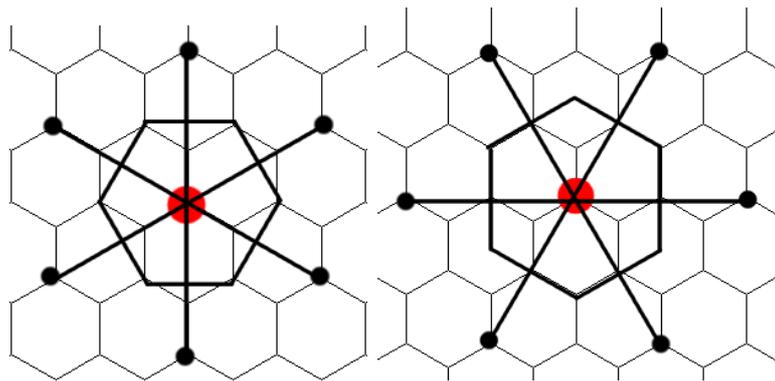


Figura 3.28: Célula de Wigner-Seitz para as exclusões 4NN e 5NN. Ambas apresentam simetria horizontal.

Nos dois casos, a configuração de máximo empacotamento é unicamente definida, sendo

possível a subdivisão da rede em sub-redes e, por conseguinte, a definição de um parâmetro de ordem. Em ambos os casos, somente uma sub-rede é ocupada na configuração de máxima densidade.

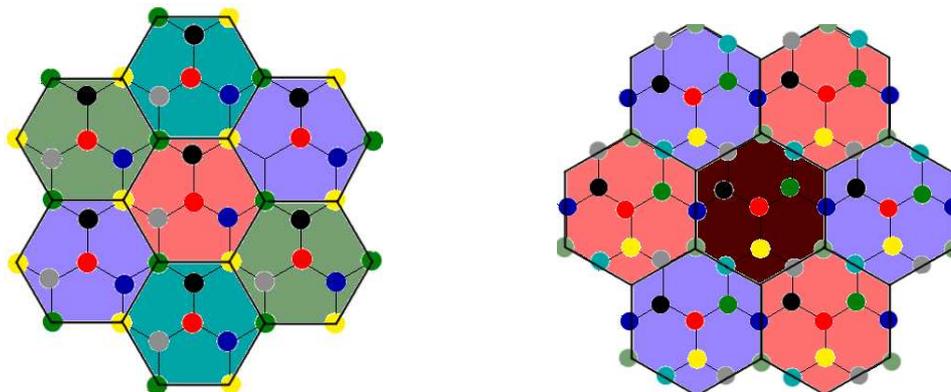


Figura 3.29: Configuração de máximo empacotamento para os casos 4NN e 5NN, respectivamente, na rede *honeycomb*. Os vértices indicam as sub-redes definidas.

Para o caso 4NN, define-se

$$q_4 = \sum_{i=0}^6 \sum_{j=i}^6 \langle |\rho_i - \rho_j| \rangle. \quad (3.5)$$

Os resultados estão na Figura 3.30. Como esperado, o sistema passa por uma transição de fase do tipo sub-rede, havendo uma quebra de simetria na ocupação das sub-redes definidas.

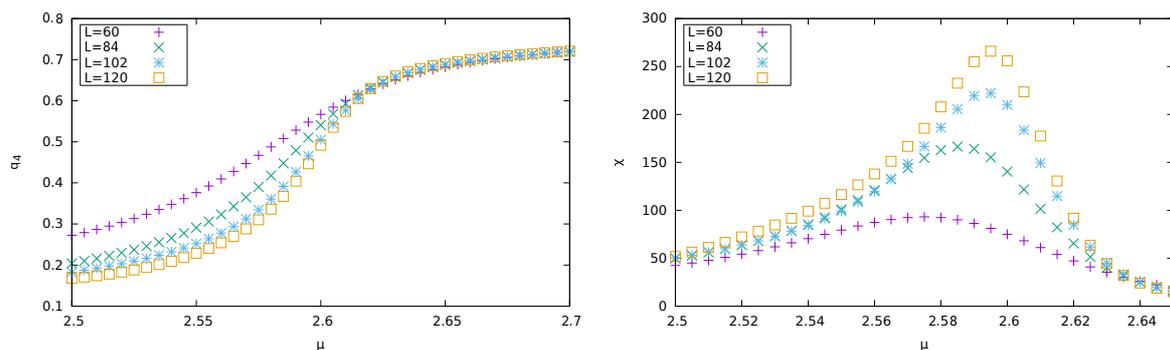


Figura 3.30: Parâmetro de ordem (esq) e susceptibilidade (dir) como função do potencial químico para a exclusão 4NN da rede *honeycomb*.

O parâmetro de ordem para a exclusão 5NN pode ser definido como

$$q_5 = \sum_{i=0}^8 \sum_{j=i}^8 \langle |\rho_i - \rho_j| \rangle. \quad (3.6)$$

Assim como no caso 4NN, este sistema apresenta uma transição de fase por meio da quebra de simetria na ocupação das sub-redes.

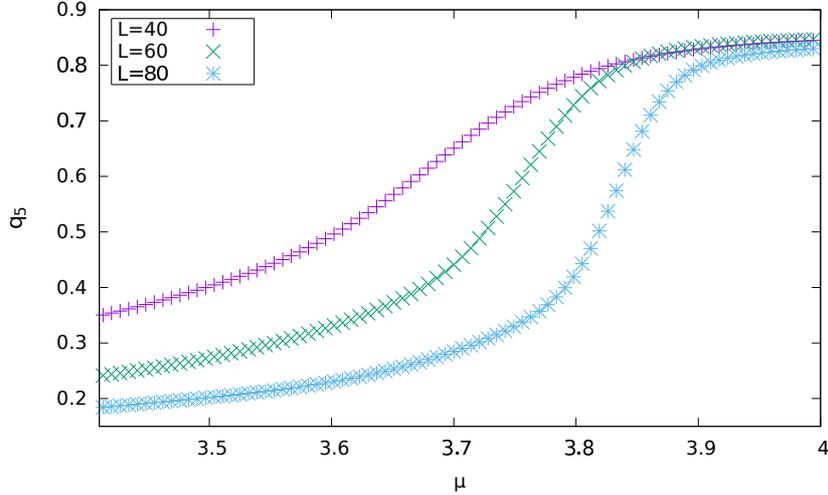


Figura 3.31: Parâmetro de ordem como função do potencial químico para a exclusão 5NN da rede *honeycomb*.

Portanto, ambos os casos 4NN e 5NN estão de acordo com conjectura proposta. Como a célula de Wigner-Seitz apresenta a mesma geometria para os casos 8NN e 9NN, espera-se comportamento semelhante para estas exclusões. enquanto que os casos 6NN e 7NN deverão assemelhar-se aos das exclusões 2NN e 3NN.

# Capítulo 4

## Conclusão

Foram realizadas simulações Monte Carlo nas redes triangular e *honeycomb* de forma a caracterizar as transições de fase que ocorrem nestas para um gás de rede com exclusão de vizinhos. As exclusões exploradas foram 1NN, 2NN e 3NN na rede triangular e 1NN a 5NN na rede *honeycomb*.

A presença de diferentes simetrias nos sistemas estudados, levando a diferentes classes de universalidade, bem como apresentando diferentes fenômenos críticos interessantes, justifica o estudo desta classe de sistemas, possibilitando o entendimento dos princípios básicos por trás das transições de fase presentes em sistemas complexos.

Os avanços tecnológicos, aliados à flexibilidade do método de Monte Carlo no desenvolvimento de algoritmos eficientes, possibilita o estudo de sistemas cada vez mais próximos da realidade, tornando este método de essencial importância para a física estatística moderna. Assim, além de auxiliar no entendimento de fenômenos críticos, estes sistemas simples estimulam o desenvolvimento de algoritmos cada vez mais eficientes, impulsionando as possibilidades do método de Monte Carlo.

Resultados haviam sido obtidos anteriormente para os casos 1NN 2NN na rede triangular, sendo este trabalho uma revisão destes resultados. Para a exclusão 3NN foi obtido um potencial químico crítico diferente do encontrado por Runnels por métodos matriciais. Para estes sistemas, foram obtidos os expoentes críticos, permitindo associá-los a uma classe de universalidade. Os resultados estão sumarizados na Tabela 4.1.

Tabela 4.1: Rede Triangular: Resultados

Exclusão	$\mu_c$	$\gamma$	$\beta$	$\nu$	Classe de Universalidade
1NN	2.406	1.4	0.11	0.83	Potts q=3
2NN	1.75	1.2	0.083	0.66	Potts q=4
3NN	4.473	-	-	-	Primeira Ordem

Todos os resultados obtidos estão de acordo com os encontrados na literatura [6, 9, 10].

Ao revisar a bibliografia, não foram encontrados resultados para a rede *honeycomb*. Foi possível a construção de uma conjectura quanto à quebra de simetria na ocupação das sub-redes de acordo com a simetria horizontal da célula de Wigner-Seitz para as exclusões na rede *honeycomb*. De forma a suportar esta hipótese, foram realizadas simulações rápidas para as exclusões 2NN, 3NN, 4NN e 5NN, estando os resultados de acordo com aqueles previstos.

Os resultados encontrados estão resumidos na Tabela 4.2, sendo os resultados para os casos 4NN e 5NN apenas estimativas. De forma a obter os expoentes críticos e, por conseguinte, a classe de universalidade, seria necessário a realização de mais simulações, de forma a se obter resultados estatisticamente relevantes. As simulações realizadas tinham o intuito apenas de suportar a conjectura referente à quebra de simetria na ocupação das sub-redes.

Tabela 4.2: Rede *Honeycomb*: Resultados

Exclusão	$\mu_c$	$\gamma$	$\beta$	$\nu$	Classe de Universalidade
1NN	2.06	1.71	0.125	0.986	Ising 2D
2NN	-	-	-	-	-
3NN	-	-	-	-	-
4NN	$\sim 2.6$	-	-	-	-
5NN	$\sim 3.9$	-	-	-	$\sim$ Primeira Ordem

Os casos 2NN e 3NN apresentaram dificuldade em atingir o equilíbrio termodinâmico. O desenvolvimento e a implementação de algoritmos mais eficientes, capazes de explorar o espaço de fases se mostra crucial na caracterização das possíveis transições de fase destes sistemas. Foram implementadas diferentes técnicas, como a amostragem multicanônica e a construção de listas de sítios livres, na tentativa de aumentar a eficiência da amostragem nestes sistemas. Entretanto, nenhuma destas abordagens se mostrou suficiente para a caracterização das possíveis transições de fase.

Um algoritmo que se mostra promissor, descrito em [8], realiza alterações do tipo *cluster* no sistema, removendo linhas inteiras e repovoando estas de acordo com resultados analíticos em uma dimensão. Por realizar este tipo de movimento, o algoritmo é capaz de remover os contornos de domínio que os casos 2 e 3NN apresentam, aumentando a eficiência da amostragem nestes sistemas. Além disso, o algoritmo possibilita a caracterização de transições de fase do tipo colunares, como descritas na mesma referência para a rede quadrada, sendo este tipo de transição uma possibilidade em aberto para os casos citados acima.

# Referências Bibliográficas

- [1] FERNANDES, H. C. M.; ARENZON, J. J.; LEVIN, Y. Monte carlo simulations of two-dimensional hard core lattice gases. *The Journal of chemical physics*, v. 126, n. 11, p. 114508, 2007.
- [2] CARDY, J. *Scaling and renormalization in statistical physics*. Cambridge university press, 1996. v. 5.
- [3] STANLEY, H. E. *Phase transitions and critical phenomena*. Clarendon Press, Oxford, 1971.
- [4] NEWMAN, M.; BARKEMA, G. *Monte carlo methods in statistical physics*. Oxford University Press: New York, USA, 1999.
- [5] HILL, T. L. *Statistical mechanics: principles and selected applications*. Courier Corporation, 2013.
- [6] RUNNELS, L. *Phase transitions and critical phenomena*. Academic Press, 1972. v. 2.
- [7] A. CUESTA, J. La entropía como creadora de orden. 12 2006.
- [8] NATH, T.; RAJESH, R. Multiple phase transitions in extended hard-core lattice gas models in two dimensions. *Physical Review E*, v. 90, n. 1, p. 012120, 2014.
- [9] BAXTER, R. J. *Exactly solved models in statistical mechanics*. Elsevier, 2016.
- [10] ZHANG, W.; DENG, Y. Monte carlo study of the triangular lattice gas with first-and second-neighbor exclusions. *Physical Review E*, v. 78, n. 3, p. 031103, 2008.
- [11] SALINAS, S. R. *Introdução a física estatística*. Edusp, 1997.
- [12] GILKS, W. R.; RICHARDSON, S.; SPIEGELHALTER, D. *Markov chain monte carlo in practice*. CRC press, 1995.
- [13] METROPOLIS, N.; ROSENBLUTH, A. W.; ROSENBLUTH, M. N.; TELLER, A. H.; TELLER, E. Equation of state calculations by fast computing machines. *The journal of chemical physics*, v. 21, n. 6, p. 1087–1092, 1953.

- [14] FERRENBURG, A. M.; SWENDSEN, R. H. New monte carlo technique for studying phase transitions. *Physical review letters*, v. 61, n. 23, p. 2635, 1988.
- [15] JANKE, W. Statistical analysis of simulations: Data correlations and error estimation. *Quantum Simulations of Complex Many-Body Systems: From Theory to Algorithms*, v. 10, p. 423–445, 2002.
- [16] BAXTER, R. J. Hard hexagons: exact solution. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, v. 13, n. 3, p. L61, 1980.
- [17] RUNNELS, L.; CRAIG, J.; STREIFFER, H. Exact finite method of lattice statistics. v. the thermodynamic phases of a triangular lattice gas. *The Journal of Chemical Physics*, v. 54, n. 5, p. 2004–2013, 1971.
- [18] WANG, F.; LANDAU, D. Efficient, multiple-range random walk algorithm to calculate the density of states. *Physical review letters*, v. 86, n. 10, p. 2050, 2001.
- [19] FISHER, M. E.; BERKER, A. N. Scaling for first-order phase transitions in thermodynamic and finite systems. *Physical Review B*, v. 26, n. 5, p. 2507, 1982.