

Gases de Rede com Exclusão de Vizinhos Rede *Honeycomb*

Filipe da Cunha Thewes
Orientador: Heitor C. M. Fernandes
Instituto de Física - UFRGS

Resumo: Por meio de simulações Monte Carlo, foram estudados gases de rede com exclusão de até segundos e até terceiros vizinhos na rede *honeycomb*. Apesar da simplicidade da rede, ambos os sistemas apresentam alto grau de complexidade na caracterização das possíveis transições de fase devido à simetria da rede, apresentando a formação de diferentes domínios, bem como fases colunares, diferentemente de outras redes que apresentam transições de fase do tipo líquido-sólido.

1. Introdução:

O interesse no estudo de gases de rede com exclusão de vizinhos se dá na existência de classes de universalidade nas transições de fase. Por serem simples, estes sistemas são ótimas ferramentas para a caracterização destas transições, permitindo um melhor entendimento de fenômenos críticos em fluidos complexos[1].

A exclusão de vizinhos se dá no bloqueio de sítios próximos a um sítio ocupado, gerando assim uma área de exclusão para cada partícula na rede, dando origem à interações do tipo caroço-duro[2].

Por meio da análise de escala de tamanho finito, trabalhos anteriores mostraram que os expoentes críticos para rede *honeycomb* com a exclusão de primeiros vizinhos são pertencentes à classe de universalidade do modelo de Ising 2D.

Neste trabalho serão exploradas as redes *honeycomb* com exclusão de até segundos (2-NN) e até terceiros (3-NN) vizinhos utilizando simulações de Monte Carlo, de forma a entender as simetrias e transições de fase. Foram utilizados os algoritmos descritos em [3], [4] e [5].

2. Rede Honeycomb:

A rede *honeycomb* apresenta dois tipos diferentes de sítio, sendo um dos objetivos do trabalho o entendimento da influência desta assimetria da rede nas transições de fase.

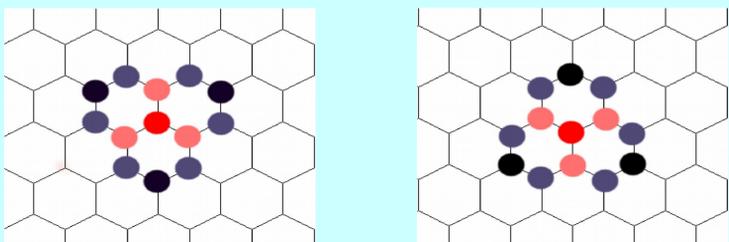


Figura 1: Partículas (vermelho) ocupam os vértices da rede *honeycomb*, excluindo os vizinhos de primeira (rosa), segunda (roxo) e terceira (preto) ordem. As duas figuras mostram os dois tipos de sítio existentes na rede *honeycomb*, o que não ocorre em outras redes, como a quadrada ou a triangular.

3. Exclusão 2-NN:

Pode-se dividir a rede hexagonal em quatro sub-redes, de modo que cada vértice pertença somente a uma sub-rede. Desta forma, pode-se observar a formação de diferentes domínios na fase sólida. A densidade máxima permitida pela rede é $\rho_{\max}=0.25$.

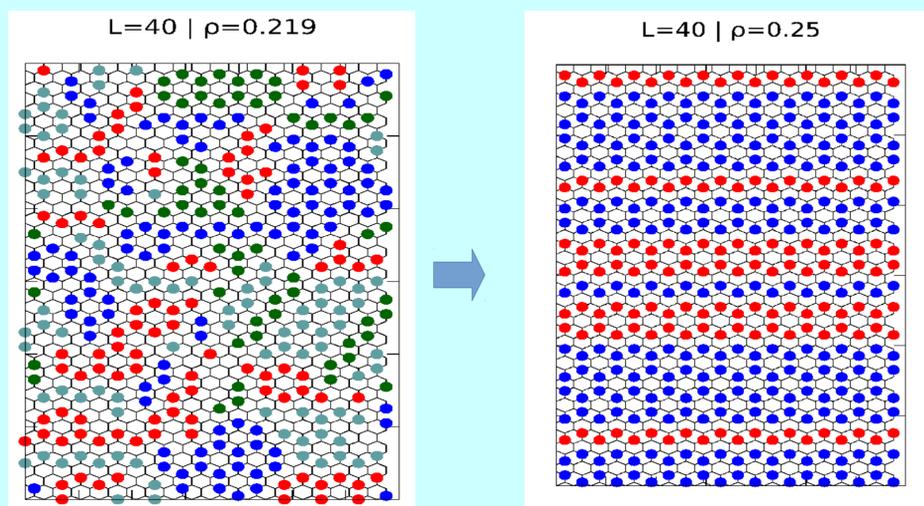


Figura 2: A medida que o potencial químico aumenta, os diferentes domínios, indicados pelas cores das sub-redes, vão se desmanchando, formando uma fase sólida não homogênea.

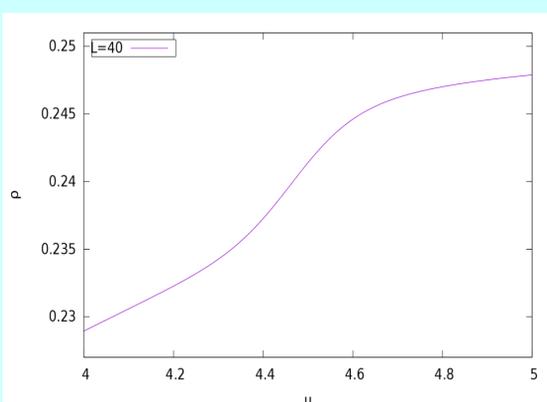


Figura 3: O ponto de inflexão na curva da densidade como função do potencial químico dá indícios de uma transição de fase próxima a $\mu=4.5$ no sistema com exclusão 2-NN. Entretanto, o aparecimento de uma fase colunar levanta a questão sobre existência de outra transição de fase.

4. Exclusão 3-NN:

Realizando uma simulação multicanônica[5], as curvas de densidade como função do potencial químico não dão indícios de uma transição de fase do tipo líquido-sólido. Entretanto, por análise de simetria, conclui-se que existem diversas configurações equivalentes para o estado de máxima densidade ($\rho_{\max}=1/6$). Como estas configurações aparentam ser instáveis, pela conjectura descrita em [4], pode haver uma fase do tipo colunar. Tal transição está sendo estudada pela implementação do algoritmo descrito na mesma referência.

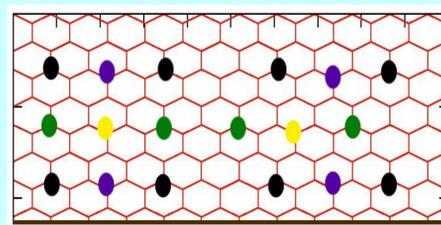


Figura 4: Exemplo de duas configurações equivalentes em densidade, diferindo apenas por um deslizamento da linha central para a esquerda. Estes deslizamentos colunares podem ocorrer nas três direções principais da rede.

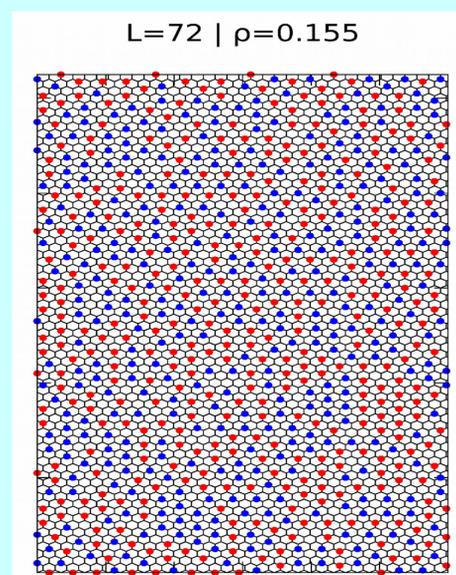


Figura 5: Mesmo após longas simulações (10^8 MCS), em altos potenciais químicos ($\mu=5.0$) e em redes grandes, o sistema parece não convergir para somente uma configuração fundamental, estando constantemente alterando de uma configuração para outra em pequenas escalas. Isso dificulta a definição de um parâmetro de ordem capaz de captar uma quebra de simetria na ocupação da rede e, por conseguinte, na caracterização da transição de fase.

5. Conclusões:

Diferentemente de outras redes mais simples já estudadas, como a quadrada ou a triangular, a rede *honeycomb* apresenta dois tipos de sítio, bem como diferentes tipos de simetria, fazendo com que existam diversas configurações de máxima densidade. Estas propriedades dificultam a caracterização das possíveis transições de fase, fazendo com que técnicas mais avançadas de simulações sejam necessárias.

O sistema com exclusão 2-NN apresenta a formação de diferentes domínios, indicando que o sistema possa não estar atingindo o equilíbrio termodinâmico. Um algoritmo capaz de contornar as fronteiras entre os domínios deverá ser mais eficiente que o empregado até então. Até o momento, os resultados apontam para a existência de duas transições de fase, sendo uma do tipo sub-rede e outra do tipo colunar.

O sistema com exclusão 3-NN não demonstra possuir transição do tipo líquido-sólido, ainda que tal fenômeno não possa ser descartado. Análises de simetria apontam para uma transição de fase do tipo colunar, fenômeno que pode ser observado por meio de deslizamentos colunares durante as simulações.

6. Referências:

- [1] - Baxter, Rodney J. Exactly solved models in statistical mechanics. Elsevier, 2016.
- [2] - Fernandes, Heitor C. Marques; Arenzon, Jeferson J.; Levin, Yan. Monte Carlo simulations of two-dimensional hard core lattice gases. The Journal of chemical physics, v. 126, n. 11, p. 114508, 2007.
- [3] - Newman, M. E. J.; Barkema, G. T. Monte Carlo Methods in Statistical Physics chapter 3. Oxford University Press: New York, USA, 1999.
- [4] - T. Nath and R. Rajesh, Multiple Phase Transitions in Extended Hard Core Lattice Gas Models in Two Dimensions, Physical Review E 90, 012120 (2014).
- [5] - Landau, D. P.; Tsai, Shan-Ho; Exler, M. A new approach to Monte Carlo simulations in statistical physics: Wang-Landau sampling. American Journal of Physics, v. 72, n. 10, p. 1294-1302, 2004.