

Universidade Federal de Sergipe
Centro de Ciências Exatas e Tecnologia
Núcleo de Pós-Graduação em Física

Estudo do Comportamento Crítico do Modelo Blume-Capel Spin-1 nas Redes Aleatórias de Voronoi-Delaunay

por

Francivaldo Pinheiro Fernandes

São Cristóvão, Agosto de 2015

Francivaldo Pinheiro Fernandes

**Estudo do Comportamento Crítico do Modelo
Blume-Capel Spin-1 nas Redes Aleatórias de
Voronoi-Delaunay**

Tese de doutorado apresentada ao Núcleo de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal de Sergipe, como parte dos requisitos para obtenção do título de Doutor em física

Universidade Federal de Sergipe
Centro de Ciências Exatas e Tecnologia
Núcleo de Pós-Graduação em Física

Orientador: Prof. Dr. Douglas Ferreira de Albuquerque

São Cristóvão
Agosto de 2015

Agradecimentos

- Em primeiro lugar, ao meu Deus por tudo que tens me concedido;
- Ao professor Douglas pela sua orientação;
- Aos professores Welington e Plascak pela sua atenção, colaboração e sugestões essenciais na elaboração deste trabalho;
- Aos meus pais, Manoel e Luiza, pelo incentivo e apoio que sempre me deram;
- Aos meus irmãos, pela saudável companhia, amizade e apoio;
- À minha querida Edna pelo amor e carinho;
- A todos alunos da pós-graduação em especial, Afrânio, Rogério, Waldson, Heverson, Tiago, Adelino, Augusto, Leonardo.
- Ao Álvaro secretário da pós-graduação pelo bom trabalho;
- A todas pessoas que me ajudaram de forma direta e indiretamente, não apenas para este trabalho, mas para a minha vida;
- A todos os professores do Departamento de Física, que contribuíram para minha formação acadêmica, moral e ética.

Resumo

Neste trabalho estudamos as propriedades críticas do modelo Blume-Capel spin-1 em redes aleatórias de Voronoi-Delaunay em duas dimensões com desordem temperada nas conectividades. O sistema é tratado pela aplicação de simulações de Monte Carlo usando o algoritmo de banho térmico de atualização em conjunto com a técnica de repesagem do histograma simples. Nós calculamos a temperatura crítica bem como os expoentes críticos como função do campo cristalino Δ . Verificou-se que este sistema desordenado exhibe transições de fases do tipo primeira e segunda ordem que dependem do valor do campo cristalino. Para valores de $\Delta \leq 3$, onde a interação de troca de primeiros vizinhos J foi definida como unidade, o sistema desordenado apresenta uma transição de fase de segunda ordem. Os resultados sugerem que a correspondente relação dos expoentes pertencem à mesma classe de universalidade como o modelo ferromagnético bidimensional regular. Existe um ponto tricrítico próximo de $\Delta_t = 3.05(4)$ com diferentes expoentes críticos. Para $\Delta_t \leq \Delta < 3.4$ este modelo mostra uma transição de fase de primeira ordem. Finalmente, para $\Delta \geq 3.4$ o sistema é sempre na fase paramagnética.

Palavras-chave: modelo Blume-Capel, simulações de Monte Carlo, redes aleatórias.

Abstract

In this work we study the critical properties of the spin-1 Blume-Capel model in two dimensions on Voronoi-Delaunay random lattices with quenched connectivity disorder. The system is treated by applying Monte Carlo simulations using the heat-bath update algorithm together with single histograms re-weighting techniques. We calculate the critical temperature as well as the critical exponents as a function of the crystal field Δ . It is found that this disordered system exhibits phase transitions of first- and second-order types that depend on the value of the crystal field. For values of $\Delta \leq 3$, where the nearest-neighbor exchange interaction J has been set to unity, the disordered system presents a second-order phase transition. The results suggest that the corresponding exponents ratio belong to the same universality class as the regular two-dimensional ferromagnetic model. There exists a tricritical point close to $\Delta_t = 3.05(4)$ with different critical exponents. For $\Delta_t \leq \Delta < 3.4$ this model undergoes a first-order phase transition. Finally, for $\Delta \geq 3.4$ the system is always in the paramagnetic phase.

Palavras-chave: Blume-Capel model, Monte Carlo simulations, random lattices.

Sumário

Sumário	i
Lista de ilustrações	iii
Lista de tabelas	vii
Lista de abreviaturas e siglas	vii
Lista de Símbolos	viii
1 Introdução	1
2 Fundamentação Teórica	3
2.1 Transições de Fases e Fenômenos Críticos	3
2.2 Expoentes críticos e Universalidade	7
2.3 Teoria de Escala de Tamanho Finito	9
2.4 Simulação de Monte Carlo	12
2.5 Mecânica Estatística	13
2.5.1 Processo de Markov	15
2.5.2 Ergodicidade	15
2.5.3 Balanço Detalhado	16
2.6 Modelo Blume-Capel	16
2.7 Algoritmo de Banho Térmico	17
2.8 Rede Aleatória de Voronoi-Delaunay	18
2.9 Método do Histograma	19
3 Estado da Arte	23
3.1 Introdução	23
3.2 Aleatoriedades em modelos de spins	23
4 Modelo e Método	26
4.1 Modelo e Simulações	26

5	Resultados e Discussão	31
5.1	Linha de transição de segunda ordem	31
5.2	Linha de transição de primeira ordem e ponto tricrítico	41
6	Conclusão e Perspectivas	48
	Referências	50

Lista de ilustrações

Figura 1 – Diagrama de fase PT para um fluido, no qual todas as transições de fase são de primeira ordem, exceto no ponto crítico C a partir do qual a transição entre líquido e gás é de segunda ordem.[1]	5
Figura 2 – Diagrama de fases em função de um campo aplicado contra a temperatura para um ferromagneto uniaxial simples.[2]	6
Figura 3 – Parâmetro de ordem em função da temperatura de um ferromagneto uniaxial. . .	6
Figura 4 – Curva de coexistência de oito fluidos diferentes.[3]	9
Figura 5 – Cumulante de Binder magnético para o modelo Blume-Capel com $\Delta = 0$ nas redes de Voronoi-Delaunay em função do inverso da temperatura K para diferentes tamanhos de redes obtidos por meio de simulação de Monte Carlo e a técnica de histograma [4].	11
Figura 6 – (a) Tesselação de Voronoi no espaço com $N = 504$ pontos. (b) A rede aleatória de Delaunay	19
Figura 7 – Distribuição de probabilidade para a energia para $L=16$. A simulação original foi realizada para $K=0.221654$. As demais distribuições foram obtidas através do método de um único histograma, descrito anteriormente no texto [5].	21
Figura 8 – Gráfico do calor específico contra T para $L=16$ do modelo Ising em duas dimensões. A linha tracejada é a solução exata, enquanto que a linha sólida corresponde ao resultado calculado de uma única simulação em $T = T_c$. A localização da temperatura simulada é marcada com a linha vertical [6].	22
Figura 9 – Cumulante de Binder magnético de quarta em função de K para vários valores de tamanho do sistema com $N = 1000, 2000, 4000, 8000, 16000, 32000$ e 64000 com $\Delta=-3.0$ (a) e $\Delta=3.0$ (b)	32

- Figura 10 – Logaritmo do módulo da magnetização no ponto de inflexão em função do logaritmo do tamanho da rede L para vários valores de Δ . As linhas sólidas são os melhores ajustes de acordo com a equação (4.16) e a linha tracejada é o ajuste linear (com $A_m(x) = 0$). Os correspondentes valores da razão β/ν são dados na figura, onde a segunda coluna são os resultados do ajuste linear e a terceira coluna, tendo em conta as correções de escala. 33
- Figura 11 – Logaritmo da susceptibilidade $\chi(K_c)$ na temperatura crítica em função do logaritmo do tamanho da rede L para vários valores de $\Delta \leq 3$. As linhas sólidas são os melhores ajustes de acordo com a equação (4.17) e a linha tracejada é o ajuste linear (com $A_\chi(x) = 0$). Os correspondentes valores da razão γ/ν são dados na figura, onde a segunda coluna são os resultados do ajuste linear e a terceira coluna, tendo em conta as correções de escala. 35
- Figura 12 – Logaritmo da susceptibilidade máxima $\chi(K_{max})$ em função do logaritmo do tamanho da rede L para vários valores de $\Delta \leq 3$. As linhas sólidas são os melhores ajustes de acordo com a equação (4.17) e a linha tracejada é o ajuste linear (com $A_\chi(x) = 0$). Os correspondentes valores da razão γ/ν são dados na figura, onde a segunda coluna são os resultados do ajuste linear e a terceira coluna, tendo em conta as correções de escala. 36
- Figura 13 – Logaritmo da derivada máxima do módulo da magnetização dada equação (4.18), para $p = 1$, versus o logaritmo do tamanho da rede L para vários valores de $\Delta \leq 3$. As linhas sólidas são os melhores ajustes de acordo com a equação (4.18) e a linha tracejada é o ajuste linear (com $A_p(x) = 0$). Os correspondentes valores da razão $1/\nu$ são dados na figura, onde a segunda coluna são os resultados do ajuste linear e a terceira coluna, tendo em conta as correções de escala. 37

Figura 14 – Logaritmo da derivada máxima do módulo da magnetização dada equação (4.18), para $p = 2$, versus o logaritmo do tamanho da rede L para vários valores de $\Delta \leq 3$. As linhas sólidas são os melhores ajustes de acordo com a equação (4.18) e a linha tracejada é o ajuste linear (com $A_p(x) = 0$). Os correspondentes valores da razão $1/\nu$ são dados na figura, onde a segunda coluna são os resultados do ajuste linear e a terceira coluna, tendo em conta as correções de escala.	38
Figura 15 – Pseudo temperatura crítica $K_c(L)$ em função de $L^{-1/\nu}$ de acordo com os máximos das diversas quantidades para $\Delta = -3$. As linhas sólidas são os ajustes de acordo com a equação (5.2) e as linha tracejada é o ajuste usando a mesma equação com $b = 0$. A segunda coluna na legenda fornece a extrapolação da temperatura crítica.	40
Figura 16 – Pseudo temperatura crítica $K_c(L)$ em função de $L^{-1/\nu}$ de acordo com os máximos das diversas quantidades para $\Delta = 3$. As linhas sólidas são os ajustes de acordo com a equação (5.2) e as linha tracejada é o ajuste usando a mesma equação com $b = 0$. A segunda coluna na legenda fornece a extrapolação da temperatura crítica.	41
Figura 17 – Magnetização em função da temperatura T para o valor de tamanho do sistema com $N = 16000$ sítios para $\Delta = 3.1$. Apresenta uma transição de fase primeira ordem	42
Figura 18 – Energia em função da temperatura T para o valor de tamanho do sistema com $N = 16000$ sítios para $\Delta = 3.1$. Apresenta uma transição de fase primeira ordem	42
Figura 19 – TEF do calor específico máximo versus N para $\Delta = 3.1$ e 3.3 com $N = 500$ até $N = 64000$. As linhas sólidas são os ajustes de acordo com a equação (4.12) e as linha tracejada é o ajuste usando a mesma equação sem correções de escala ,com $c_C = 0$. A inserção mostra o gráfico log-log e o ajuste linear dos dados . .	43
Figura 20 – TEF da suscetibilidade máxima versus N para $\Delta = 3.1$ e 3.3 com $N = 500$ até $N = 64000$. As linhas sólidas são os ajustes de acordo com a equação (4.12) e as linha tracejada é o ajuste usando a mesma equação sem correções de escala ,com $c_C = 0$. A inserção mostra o gráfico log-log e o ajuste linear dos dados . .	44

Figura 21 – Gráfico de $2/3 - B_{min}$ em K_c em função do logaritmo de $1/N$ para diversos tamanhos de redes e com valores de $\Delta=3.1$ e 3.3	45
Figura 22 – Gráfico de $2/3 - B_{min}$ em K_c em função do logaritmo de $1/N$ para diversos valores de tamanhos de redes e Δ na região de transição de fase de segunda ordem	46
Figura 23 – Pseudo temperatura de transição $T_1(L)$ em função de L^{-2} de acordo com os máximos de calor específico e da susceptibilidade para $\Delta = 3.1$ e $\Delta = 3.3$. As linhas sólidas são os ajustes de acordo com a equação (5.3) e as linhas tracejadas ajustes linear com $b' = 0$	47
Figura 24 – Diagrama de fase na temperatura T versus o campo cristalino Δ . O triângulo representa o ponto tricrítico e as linhas tracejadas é apenas um guia para os olhos.	47

Lista de tabelas

- Tabela 1 – Inverso da temperatura crítica, cumulante de quarta ordem e expoentes críticos obtidos para o modelo Blume-Capel spin-1 em duas dimensão nas redes aleatórias de Voronoi-Delaunay e campo cristalino $\Delta \leq 1$. A última coluna fornece as quantidades correspondentes para a classe de universalidade bidimensional de Ising. A primeira linha de K_c vem dos cruzamentos dos cumulantes a segunda linha de ajustes com equação (5.2). 39
- Tabela 2 – Inverso da temperatura crítica, cumulante de quarta ordem e expoentes críticos obtidos para o modelo Blume-Capel spin-1 em duas dimensão nas redes aleatórias de Voronoi-Delaunay e campo cristalino $2 \leq \Delta \leq 3$. A primeira linha de K_c vem dos cruzamentos dos cumulantes a segunda linha de ajustes com equação (5.2). 39

Lista de símbolos

T	Temperatura
T_c	Temperatura crítica
$T_c(L)$	Temperatura de transição da rede finita
K	Inverso da temperatura
K_c	Inverso da temperatura crítica
$K_c(L)$	Inverso da temperatura de transição da rede finita ou pseudo temperatura crítica
m	Magnetização por sítio
χ	Susceptibilidade Magnética
χ_{max}	Susceptibilidade Magnética máxima
e	Energia por sítio
C	Calor Específico
C_{max}	Calor Específico máximo
t	Temperatura reduzida $t = (T - T_c)/T_c$
β	Expoente da magnetização
γ	Expoente da susceptibilidade
ν	Expoente do comprimento de correlação
ω	Expoente de correção de escala
J	Constante interação de troca
S_i	Variável de spin do sítio i
H	Hamiltoniano
p	probabilidade de religação

p_c	probabilidade de religação crítica
Δ	Parâmetro de anisotropia do campo cristalino
Δ_t	Parâmetro de anisotropia do campo cristalino no ponto crítico
K_B	Constante de Boltzmann
L	Tamanho linear de rede
N	Número total de sítios da rede
d	dimensionalidade espacial da rede
U_4	Cumulante de Binder de quarta ordem da magnetização
U_4^*	Valor do cumulante no ponto crítico
B	Cumulante de Binder de quarta ordem da energia
z	Número de coordenação da rede
VD	Rede de Voronoi-Delaunay

1 Introdução

Há mais de um século o estudo de transições de fases e fenômenos críticos vem ganhando destaque na comunidade científica em geral, sendo notório que seu desenvolvimento tem recebido muitas influências a partir das investigações de sistemas magnéticos. Ao longo desse tempo vários modelos foram propostos na tentativa de descrever as características dos sistemas. O surgimento de conceitos importantes como da classe de universalidade possibilitou que diferentes sistemas fossem descritos por um conjunto de expoentes críticos independentemente de seus constituintes microscópicos, mas apenas da dimensionalidade espacial e do parâmetro de ordem. Assim como análise de escala possibilitou descrever como as grandezas físicas se comportam na região de criticalidade. Portanto estes conceitos contribuíram de forma significativa para o entendimento das transições de fases.

Nos últimos anos, com o notável aumento da capacidade de processamento dos computadores, tornou-se possível fazer o estudo em sistemas que apresente um grau de complexidade maior. O método de Monte Carlo é um método de simulação bastante robusto que em alguns casos permite obter resultados melhores em comparação com a abordagem realizada por métodos de aproximação analítica [7].

O estudo de modelos puros possibilitaram o entendimento do comportamento crítico de sistemas magnéticos porém muitos sistemas encontrados na natureza apresentam impurezas. De modo que estudos experimentais sobre o comportamento crítico de materiais reais são frequentemente confrontados com a influência das impurezas e heterogeneidades [8].

A importância do efeito da desordem temperada aleatória sobre o comportamento crítico de um sistema físico pode ser classificado pelo expoente do calor específico do sistema puro (α_{puro}). O critério devido a Harris [9] afirma que para $\alpha_{puro} > 0$ a desordem temperada aleatória é uma perturbação relevante, levando a um comportamento crítico diferente do que no caso puro. Por outro lado para $\alpha_{puro} < 0$ a desordem é irrelevante e, no caso marginal $\alpha_{puro} = 0$, nenhuma previsão pode ser feita.

Para sistema que exhibe transição de fase contínua a desordem temperada aleatória pode modificar o comportamento, levando a mudança na classe de universalidade. Por outro lado se o sistema sofre uma transição de fase de primeira ordem a desordem temperada pode levar a uma suavização da transição [10].

Neste trabalho estudamos o tipo de desordem temperada aleatória, nomeada de desordem nas conectividades, uma propriedade genérica de redes aleatórias cujo o número de coordenação local varia de sítio para sítio. Especificamente consideramos as redes aleatorias Voronoi-Delaunay em duas dimensão e realizamos um estudo extenso por meio simulação de Monte Carlo com o modelo Blume-Capel spin-1 com objetivo caracterizar o comportamento crítico deste sistema, obtendo o diagrama de fase, os expoentes críticos e as grandezas termodinâmicas.

Este trabalho está organizado em capítulos, distribuídos da seguinte maneira:

- no capítulo 1 é apresentado uma introdução do trabalho e o objetivo;
- no capítulo 2 aborda-se a fundamentação teórica necessária para o desenvolvimento do trabalho;
- no capítulo 3 é apresentado o estado da arte com a revisão dos principais resultados publicados na literatura sobre o modelo estudado neste trabalho;
- no capítulo 4 é apresentado a método empregado para obtenção dos resultados;
- no capítulo 5 é mostrado os resultados e discussão;
- no capítulo 6 é apresentada a conclusão e as perspectivas.

2 Fundamentação Teórica

Neste capítulo será feita uma breve descrição dos principais conceitos teóricos usados neste trabalho, tais como aspectos fundamentais a respeito das transições de fases e fenômenos críticos, o método de Monte Carlo, a técnica de histograma entre outros.

2.1 Transições de Fases e Fenômenos Críticos

As transições de fases e os fenômenos críticos são inerentes em inúmeros eventos da natureza e quando submetidos há determinadas condições, um grande número de sistemas da natureza passa a exibir um comportamento crítico característico de transições de fases. A água, por exemplo, se apresenta nos três estados distintos da matéria: sólido, líquido e gasoso sendo imprescindível para a presença da vida na terra. A transição de fase de um sistema físico é descrita por singularidades nas funções termodinâmicas sendo objeto de estudos no meio acadêmico e em diversas pesquisas científicas [1–3, 11, 12], desde o início do século XX até os dias de hoje.

As transições de fases estão presentes em diversos tipos de sistemas, tais como materiais magnéticos, fluidos simples, ligas metálicas, superfluidos e vários outros. A primeira teoria de sucesso pertence a Van der Waals 1873, em sua tese de doutorado que traz como tema o estudo sobre a "continuidade dos estados líquido e gasoso da matéria", sendo usada para descrever o comportamento crítico dos fluidos [13]. A transição de fase para o ferromagnetismo pôde ser explicada por meio de uma teoria fenomenológica apresentada por Pierre Curie e, posteriormente Pierre Weiss a desenvolveu mostrando vários pontos em comum com a teoria de Van der Waals. Essas teorias são conhecidas como teorias clássicas das transições de fases e são usadas para a descrição dos aspectos qualitativos de muitas espécies de transições de fases [2].

O estudo do comportamento crítico dos sistemas físicos é muito importante para o entendimento de suas propriedades e a teoria das transições de fase e fenômenos críticos possibilita a obtenção dessas propriedades e portanto, uma melhor compreensão relacionadas a estes fenômenos. Uma transição de fase ocorre quando existe uma descontinuidade na energia livre e nas suas derivadas. E que muitas vezes é notável uma mudança acentuada das propriedades do sistema em estudo. São exemplos clássicos de transição de fase, a transição paramagnética e ferromagnética que ocorre no sistema magnético e a transição líquido-gás no sistema de um fluido simples [1].

As transições de fase podem ser classificadas de acordo com Ehrenfest, levando em consideração o grau das derivadas da energia livre em relação ao parâmetro de ajuste que está exibindo a descontinuidade. De modo que são caracterizadas como de primeira ordem quando apresentam descontinuidade na primeira derivada da energia livre e de segunda ordem se a primeiras derivadas da energia livre for contínua e as segundas derivadas descontínuas ou infinitas [3].

Existe uma classificação moderna em que diferencia as transições de fase em duas categorias: descontínuas e contínuas. A transição é dita descontínua ou de primeira ordem, quando apresenta variação do parâmetro de ordem de forma descontínua e envolve calor latente. Por exemplo, a transição de fase que ocorre entre as fases líquida e sólida. Por outro lado, quando o parâmetro de ordem variar de maneira contínua e não possuir calor latente associado, a transição é contínua ou de segunda ordem, sendo a transição de fase magnética do modelo de Ising um exemplo. Este tipo de transição apresenta divergências em funções respostas como a susceptibilidade e o calor específico, tem um comprimento de correlação infinito e as correlações decaem como uma lei de potência [1].

O diagrama de fase de um fluido simples é mostrado na Figura 1 e a medida que a temperatura e pressão são variadas a água pode existir nas três fases: sólida, líquida e gasosa. Esse diagrama apresenta características especiais, tais como fronteira entre fases, ponto triplo e o ponto crítico. Essas fases distintas estão bem definidas dentro da fronteira que separa as regiões e são estados estáveis, e as linhas que separam os estados (sólido-líquido, líquido-gasoso e sólido-gasoso) são chamadas de curvas de coexistência de fases que ao serem atravessadas ocorre uma transição de fase de primeira ordem, caracterizada por uma variação brusca na densidade do fluido. Existe um ponto de coexistência das três fases denominado ponto triplo. E ao se mover sobre a linha de coexistência líquido-gás, a diferença entre as densidades, diminuem de forma contínua e ao atingir o ponto crítico, ou seja, em $T = T_c$ ^[1] tem seu valor nulo. Nesse ponto as duas fases se tornam indistintas e o sistema exibe uma transição de fase de segunda ordem.

De forma análoga a um fluido simples, o estudo do ferromagneto uniaxial simples tem contribuições interessante para a explicação das transições de fase magnéticas. Esse sistema apresenta maior simetria do que um fluido simples de modo que a simetria extra facilita sua análise. O diagrama de fase do ferromagneto é mostrado na Figura 2, observa-se que a campo externo nulo e $T < T_c$ o sistema apresenta uma curva de coexistência de fases ordenadas compostas por duas regiões: uma com spins para cima e outra com spins para abaixo que representam respectivamente

¹ Conhecida como temperatura crítica ou temperatura de Curie.

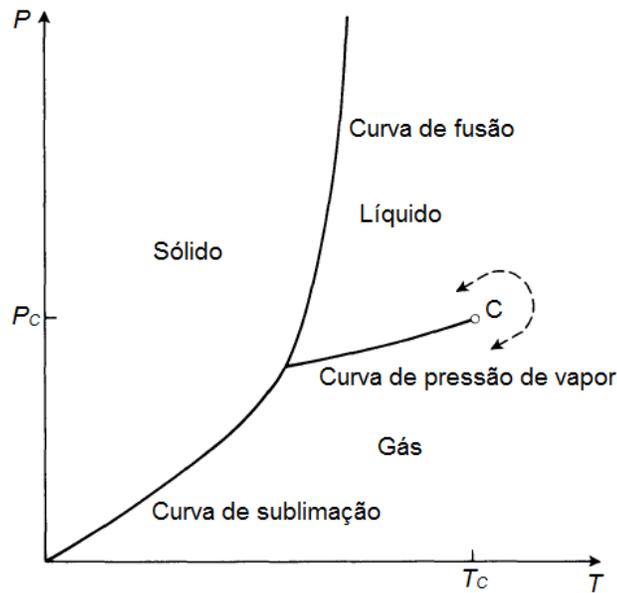


Figura 1 – Diagrama de fase PT para um fluido, no qual todas as transições de fase são de primeira ordem, exceto no ponto crítico C a partir do qual a transição entre líquido e gás é de segunda ordem.[1]

as magnetizações que são iguais em módulo.

Percebe-se que na Figura 2 abaixo de T_c ocorre uma quebra de simetria do sistema e ao atravessar a fronteira entre as fases ordenadas ocorre um salto na magnetização, indicando que acontece uma transição de fase descontínua. Por outro lado, acima de T_c o sistema ferromagneto apresenta magnetização espontânea nula e uma fase simétrica. No ponto crítico ocorre uma separação entre as fases ferromagnética com magnetização diferente de zero e a fase paramagnética com magnetização nula. O parâmetro de ordem do sistema é representado pela magnetização espontânea mostrado na Figura3.

A definição de parâmetro de ordem foi introduzida por Landau [7] e está relacionado com a quebra de simetria do sistema. É uma quantidade que apresenta valores distintos em cada fase, tornando-se nulo na fase desordenada e diferente de zero na ordenada, sendo usado no estudo de transição de fase. Vários tipos de sistemas apresentam parâmetro de ordem como: ferromagneto (magnetização espontânea), líquido-gás (diferença entre as densidades, $\rho_L - \rho_G$), entre outros. Estes parâmetros de ordem desaparecem continuamente conforme a temperatura se aproxima da temperatura de crítica, e torna-se zero na fase de alta temperatura.

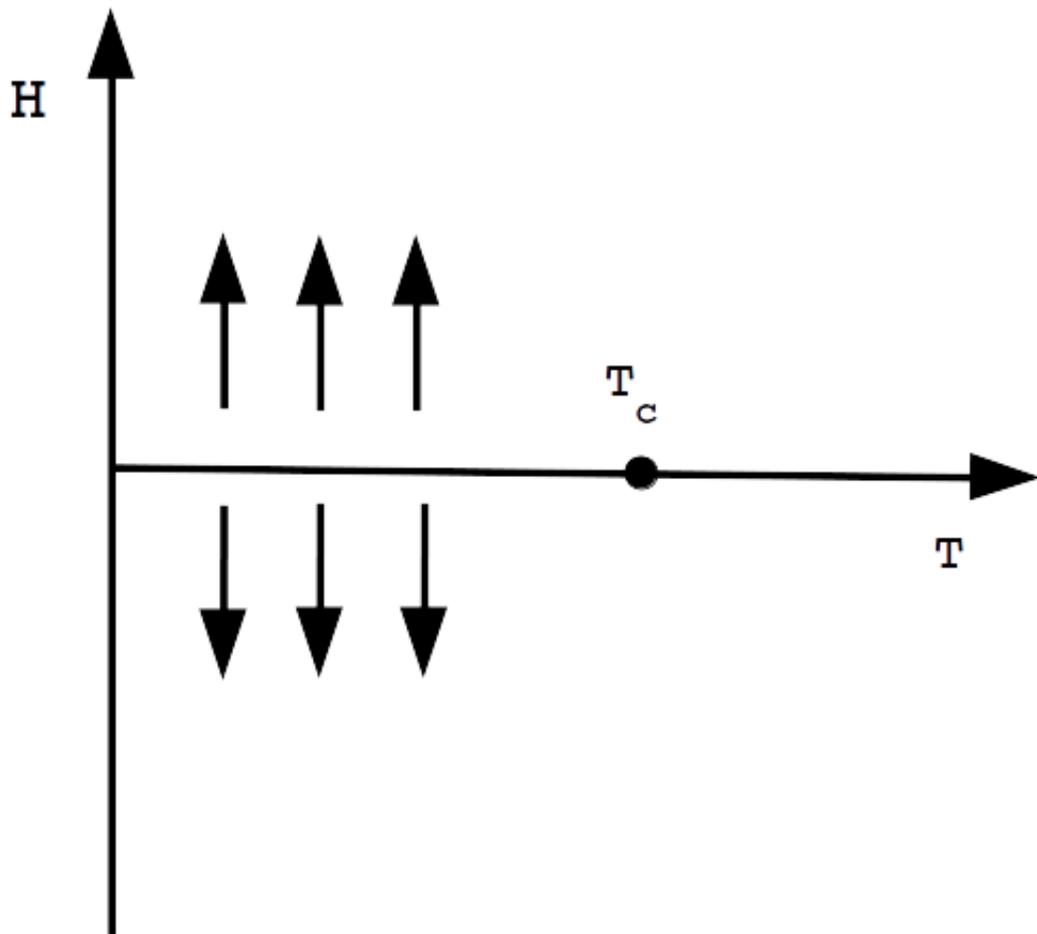


Figura 2 – Diagrama de fases em função de um campo aplicado contra a temperatura para um ferromagneto uniaxial simples.[2]

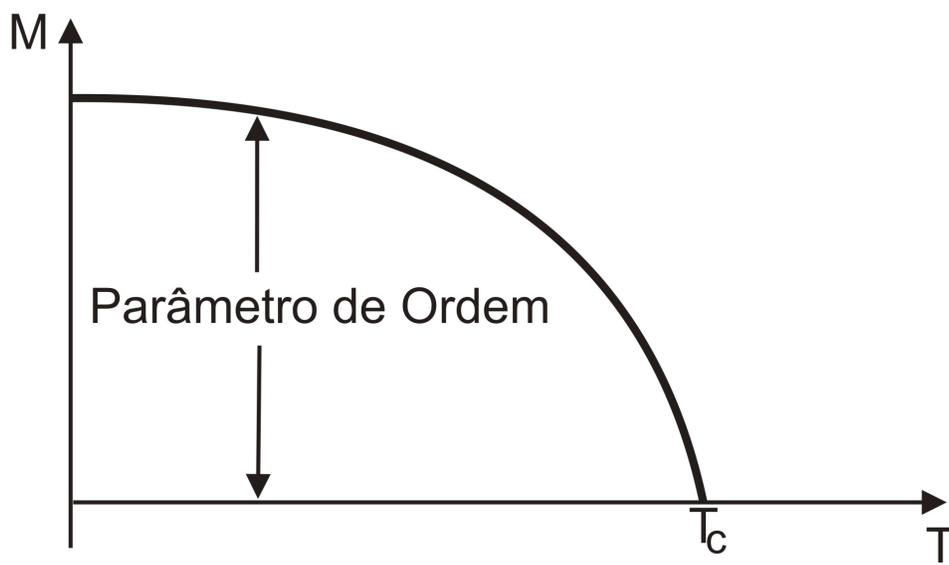


Figura 3 – Parâmetro de ordem em função da temperatura de um ferromagneto uniaxial.

2.2 Expoentes críticos e Universalidade

Nas vizinhanças de um ponto crítico algumas funções termodinâmicas apresentam um comportamento divergente ou singular, que podem ser descritas através de leis de potência, caracterizadas por um conjunto de expoentes críticos [1]. A partir da definição de uma temperatura reduzida t vamos analisar essas divergências.

$$t = \frac{T - T_c}{T_c} \quad (2.1)$$

onde t mede a distância da temperatura crítica T_c . O expoente crítico associado a uma determinada função $F(t)$ é dada por:

$$\begin{aligned} \lambda &= \lim_{t \rightarrow 0} \frac{\ln|F(t)|}{\ln|t|}, \\ F(t) &= \mathcal{A}|t|^\lambda(1 + bt^{\lambda_1} + \dots), \end{aligned} \quad (2.2)$$

Assim tomando o limite e desprezando os termos de correção, $F(t)$ pode ser escrita em termos de λ , na forma:

$$F(t) \sim |t|^\lambda.$$

As grandezas descritas por $F(t)$ apresentam um comportamento assintótico nas proximidades do ponto crítico à medida que $t \rightarrow 0$. Para realizar o estudo de sistemas magnéticos na região crítica algumas grandezas físicas como a magnetização, a susceptibilidade, o comprimento de correlação e o calor específico desempenham um papel fundamental, e tem seus comportamentos descritos como leis de potência [1, 3].

Por exemplo, o sistema ferromagneto, a campo magnético nulo na região próxima do ponto crítico seu comportamento é descrito por uma lei de potência. Portanto, a sua magnetização é caracterizada por um expoente crítico β e representada da seguinte forma

$$M(t) \sim (-t)^\beta, \quad (2.3)$$

De modo análogo, a susceptibilidade magnética a campo magnético nulo, o calor específico a campo magnético nulo e o comprimento de correlação respectivamente, no ponto crítico são descritos pelos seguintes expoentes γ , α , ν , comportando-se de maneira seguinte:

$$\chi_T \sim |t|^{-\gamma}, \quad (2.4)$$

$$C_H \sim |t|^{-\alpha}, \quad (2.5)$$

$$\xi \sim |t|^{-\nu}, \quad (2.6)$$

Existem as relações de desigualdades entre os expoentes críticos que decorrem a partir de considerações termodinâmicas fundamentais. Algumas relações mais conhecidas são citadas abaixo [3]:

$$\alpha + 2\beta + \gamma \geq 2, \text{ (Rushbrooke)} \quad (2.7)$$

$$(2 - \eta)\nu \geq \gamma, \text{ (Fisher)} \quad (2.8)$$

$$\gamma \geq \beta(\delta - 1), \text{ (Widom)} \quad (2.9)$$

$$\nu d \geq (2 - \alpha), \text{ (Josephson)} \quad (2.10)$$

onde d é a dimensionalidade espacial do sistema.

De acordo com os resultados experimentais e com base na teoria de hipótese de escala foi mostrado que essas relações de desigualdades entre os expoentes críticos são satisfeitas como igualdades. Na literatura os valores destes expoentes críticos são conhecido exatamente para o modelo de Ising numa rede quadrada onde Onsager mostrou por meio de solução exata os seguintes valores : $\alpha = 0$, $\gamma = 1.75$, $\beta = 0.125$ e $\nu = 1$. De modo que modelos diferentes podem fazer parte da mesma classe de universalidade caracterizada pelo conjunto de expoentes críticos de mesmos valores. Quando sistemas físicos distintos são caracterizados por mesmos expoentes críticos diz-se que estes sistemas pertencem à mesma classe de universalidade. O índice de universalidade é o gráfico produzido por Guggenheim 1945, para oito fluidos distintos, cujas coordenadas mantinham as relações entre as temperaturas $\frac{T}{T_c}$ e as densidades $\frac{\rho}{\rho_c}$. A Figura 4, mostra a curva de coexistência de oito fluidos diferentes, onde um ajuste desta dá o mesmo expoente crítico $\beta = 1/3$, ou seja,

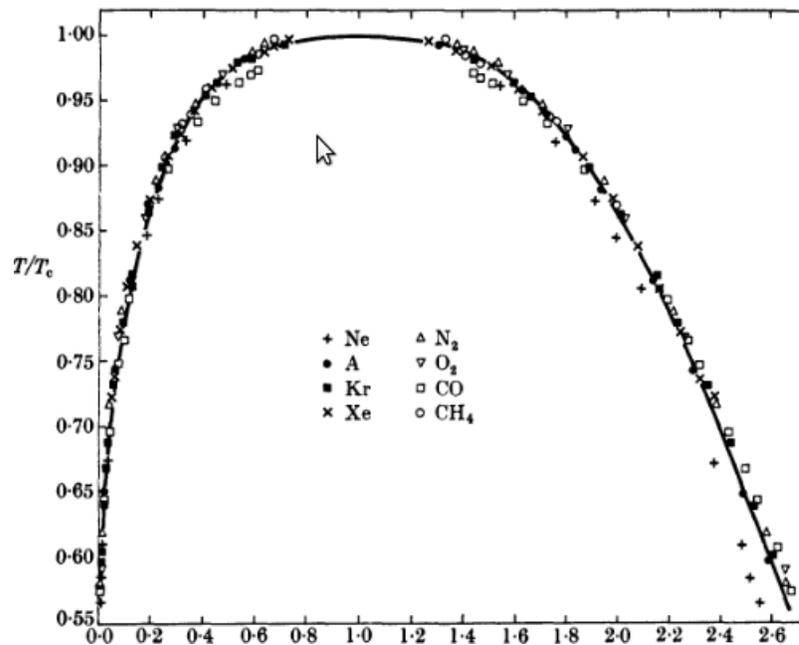


Figura 4 – Curva de coexistência de oito fluidos diferentes.[3]

fazem parte da mesma classe de universalidade. Esses dados podem ser ajustados através de uma equação cúbica [2,3].

A classe de universalidade possibilita por meio do estudo de sistemas mais simples obtermos propriedades relevantes de sistemas mais complexos. E para modelos com interações de curto alcance os expoentes críticos dependem apenas de poucos parâmetros como: a simetria do parâmetro de ordem e a dimensionalidade espacial do sistema. Vale resaltar que a desordem pode modificar a classe de universalidade.

2.3 Teoria de Escala de Tamanho Finito

A teoria de escala de tamanho finito é um método utilizado para obter informações a respeito de grandezas físicas no limite termodinâmico com base no estudo das propriedades de sistemas finitos [14, 15]. Essa teoria mostra-se fundamental para analisar os resultados provenientes de simulações computacionais realizadas em sistemas finitos. Desse modo numa transição de fase de segunda ordem o comportamento crítico de um sistema no limite termodinâmico pode ser extraído a partir da dependência da parte singular da energia livre com o tamanho do sistema. Pode-se assumir a condição de homogeneidade do sistema e usando as variáveis L e T , que são respectivamente o

tamanho linear do sistema e a temperatura. Obtêm-se a relação de escala em torno do ponto crítico, ou seja, em T_c com a seguinte forma:

$$F(L, T) = L^{-(2-\alpha)/\nu} \mathcal{F}(tL^{1/\nu}) \quad (2.11)$$

onde $t = \frac{T-T_c}{T_c}$ é denominada de temperatura reduzida e os expoentes críticos tem os valores apropriados para o sistema infinito [16]. Diversas propriedades termodinâmicas podem ser obtidas a partir da energia livre na equação acima e seguem as leis de escala seguintes:

$$C = L^{\alpha/\nu} \tilde{C}(tL^{1/\nu}), \quad (2.12a)$$

$$M = L^{-\beta/\nu} \tilde{M}(tL^{1/\nu}), \quad (2.12b)$$

$$\chi = L^{\gamma/\nu} \tilde{\chi}(tL^{1/\nu}), \quad (2.12c)$$

onde $\tilde{C}(x)$, $\tilde{M}(x)$ e $\tilde{\chi}(x)$ são funções de escala e α , β , γ e ν são os expoentes críticos do calor específico, da magnetização, da susceptibilidade e do comprimento de correlação respectivamente. As equações 2.12a, 2.12b e 2.12c mostram como as quantidades termodinâmicas devem variar com o tamanho do sistema L através da variável de escala $x = tL^{1/\nu}$. Na criticalidade as propriedades termodinâmicas exibem um comportamento que seguem uma lei de potência, as funções de escala tornam-se da seguinte forma:

$$C \propto L^{\alpha/\nu} \quad (2.13a)$$

$$M \propto L^{-\beta/\nu} \quad (2.13b)$$

$$\chi \propto L^{\gamma/\nu} \quad (2.13c)$$

essas relações podem ser usadas para extrair estimativas do quociente entre os expoentes críticos como α/ν , β/ν e γ/ν .

Uma outra quantidade importante é o cumulante de quarta ordem da magnetização também conhecido como cumulante de Binder [17] que permite obter a temperatura crítica do sistema é dado por:

$$U_4 = 1 - \frac{\langle M^4 \rangle}{3\langle M^2 \rangle^2} \quad (2.14)$$

Quando $L \rightarrow \infty$, U_4 assume os seguintes valores $U_4 \rightarrow 0$ se $T > T_C$ e $U_4 = 2/3$ se $T < T_C$. Em redes de tamanho suficientemente grande, o cruzamento das curvas do cumulante de Binder

se intersectam no ponto crítico. A análise do gráfico de $U_4 \times T$ para diferentes tamanhos de redes no ponto de cruzamento permite obter uma estimativa da temperatura crítica e identificar ainda que de forma preliminar a classe de universalidade do valor de U_4^* ². Pode-se também definir uma quantidade K como sendo o inverso da temperatura T e de modo semelhante plotar o gráfico de U_4 x K para obter a estimativa para K_C e U_4^* (ver Figura 5).

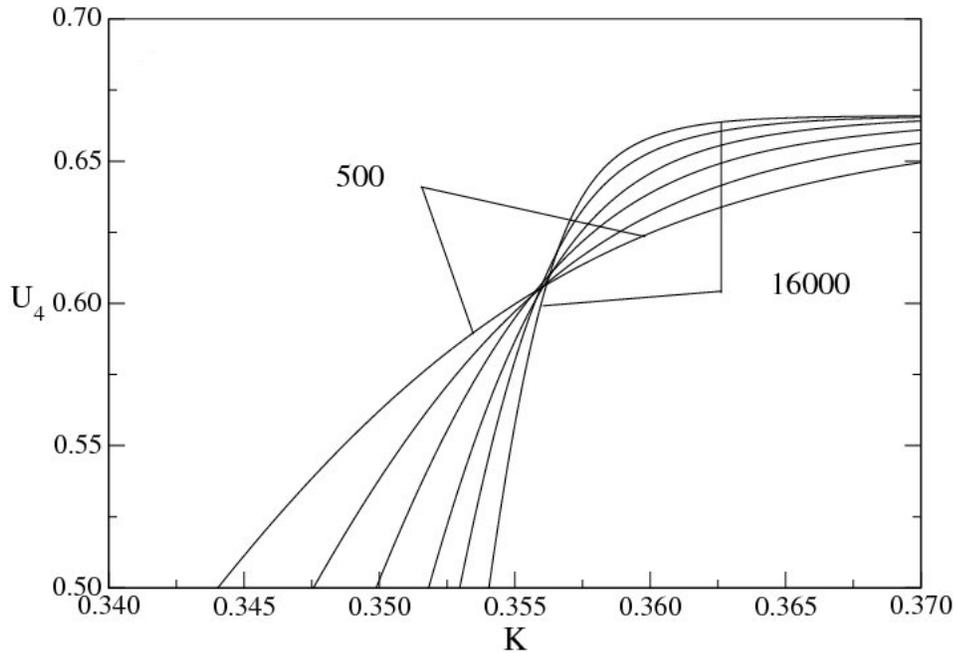


Figura 5 – Cumulante de Binder magnético para o modelo Blume-Capel com $\Delta = 0$ nas redes de Voronoi-Delaunay em função do inverso da temperatura K para diferentes tamanhos de redes obtidos por meio de simulação de Monte Carlo e a técnica de histograma [4].

Existe outra forma de se obter a temperatura de transição através da localização dos picos de grandezas como calor específico e a susceptibilidade magnética que apresentam divergência na criticalidade. O local do pico define uma temperatura de transição $T_C(L)$ de uma rede finita, variando com o tamanho do sistema da forma:

$$T_C(L) = T_C + aL^{-1/\nu}, \quad (2.15)$$

onde T_C é a temperatura crítica de uma rede infinita, a é uma constante. Utilizando a equação 2.15 pode-se indicar a localização da temperatura de transição de uma rede infinita, sendo necessário o conhecimento acurado do valor do expoente ν e de $T_C(L)$. Assim plotando o gráfico em escala Log-Log de $T_C(L)$ versus $L^{-1/\nu}$ e fazendo um ajuste linear fornece T_C .

² representa o ponto onde as curvas de diferentes tamanhos se interceptam para o modelo de Ising numa rede regular seu valor universal $U_4^* = 0.6106924(18)$ [18]

Para estimar o valor do expoente crítico ν pode-se usar quantidades menos tradicionais como por exemplo as derivadas logarítmicas de enésima potência da magnetização dada pela seguinte forma

$$\frac{\partial \ln \langle m^n \rangle}{\partial K} = \left(\frac{\langle m^n E \rangle}{\langle m^n \rangle} \right) - \langle E \rangle \quad (2.16)$$

onde as derivadas máximas dessas quantidades fornecem estimativa para a temperatura de transição do sistema.

Os expoentes críticos e a temperatura crítica podem ser obtidos por meio do uso de simulação de Monte Carlo realizadas em sistemas com tamanho linear suficientemente grande caracterizados pelas as funções de escalas das quantidades termodinâmicas. Vale ressaltar que se tais sistemas são pequenos e estão distante da temperatura de transição há necessidade de acrescentar termos de correções de escala e as funções tornam-se da seguinte forma

$$C = C^0 L^{-\alpha/\nu} [1 + b_C L^{-\omega}], \quad (2.17a)$$

$$M = M^0 L^{-\beta/\nu} [1 + b_M L^{-\omega}], \quad (2.17b)$$

$$\chi = \chi^0 a L^{-\gamma/\nu} [1 + b_\chi L^{-\omega}], \quad (2.17c)$$

$$T_c(L) = T_c + a' L^{-1/\nu} [1 + b' L^{-\omega}], \quad (2.17d)$$

$$K_c(L) = K_c + a L^{-1/\nu} [1 + b L^{-\omega}], \quad (2.17e)$$

onde b_C, b_M, b_χ, b' e b são constantes não universais e ω é o expoente de correção de escala.

2.4 Simulação de Monte Carlo

O Método de Monte Carlo é um método de simulação computacional que se fundamenta em princípios da mecânica estatística e utiliza números aleatórios para resolver problemas práticos. Sua denominação é uma referência a jogos de azar, realizados nos cassinos localizados em Mônaco, na cidade de Monte Carlo. Um dos primeiros trabalhos em Monte Carlo foi o artigo de Nicolas Metropolis e Stanislaw Ulam em 1949 intitulado como *The Monte Carlo Method* [19], sendo sua importância na avaliação de integrais que não possuem solução analítica.

Atualmente com o desenvolvimento dos computadores e o aumento da capacidade de processamento, o método de Monte Carlo adquiriu um caráter mais dinâmico e rápido na solução de diversos problemas, por exemplo, como modelo para simular as interações de partículas, materiais

ferromagnéticos, modelar processos aleatórios, ferramenta para calcular as propriedades termodinâmicas entre outras. Diante disso, tem mostrado resultados satisfatórios quando usado para resolver problemas em diferentes áreas de pesquisa.

Quanto à aplicação de simulações computacionais em mecânica estatística, ele desempenha um papel fundamental entre a teoria e o experimento onde muitas vezes o tratamento analítico de um hamiltoniano torna-se bastante complexo, então a utilização da simulação possibilita comparar se as propriedades obtidas a partir deste estão de acordo com o experimento, caso não esteja, outro hamiltoniano deve ser proposto.

Logo, é perceptível a enorme importância alcançada pelas simulações de Monte Carlo em vários campos da ciência possibilitando o surgimento de novos algoritmos que passaram a ser utilizados para a resolução dos mais variados tipos de problemas [20], sendo suas contribuições importantes também para a evolução de estudos de sistemas complexos de resolução complicada facilitando a interpretação de dados e os resultados experimentais.

2.5 Mecânica Estatística

A mecânica estatística tem interesse no estudo das propriedades dos sistemas da matéria condensada. A dificuldade crucial relacionada com estes sistemas é que são constituídos por um número muito grande de partes, tipicamente átomos ou moléculas. Devido a impossibilidade de se calcular todas as configurações do sistema, uma estratégia possível baseia-se na realização de médias sobre um número menor dessas configurações. Isto pode ser realizado por meio de simulação de Monte Carlo. Em termos gerais, a dinâmica de um sistema pode ser representada por meio da equação mestra:

$$\frac{d\omega_\mu}{dt} = \sum_\nu [\omega_\nu(t)R(\nu \rightarrow \mu) - \omega_\mu(t)R(\mu \rightarrow \nu)] \quad (2.18)$$

onde $\omega_\mu(t)$ representa a probabilidade de encontrar o sistema no estado μ no tempo t e $R(\nu \rightarrow \mu)$ é a taxa de transição entre os estados ν e μ . As probabilidades $\omega_\mu(t)$ deve satisfazer a regra da soma

$$\sum_\mu \omega_\mu(t) = 1 \quad (2.19)$$

Resolvendo a equação 2.18 atribuindo-lhe a condição 2.19, temos uma distribuição de probabilidade ω_μ que varia no tempo. Pode-se estimar as propriedades macroscópicas do sistema por meio

da equação

$$\langle Q \rangle = \sum_{\mu} Q_{\mu} \omega_{\mu}(t) \quad (2.20)$$

Considerando-se o caso em que a taxa com que o sistema transita para estado μ , é igual a taxa com que o sistema transita do estado μ , para qualquer outro estado, situação em que temos os termos da diferença contidas nos colchetes na equação 2.18 são iguais. Diante disso temos, $\frac{d\omega_{\mu}}{dt} = 0$, a distribuição de probabilidades torna-se constante no tempo e o sistema está em equilíbrio.

Josiah Willard Gibbs (1902) mostrou que um sistema em equilíbrio térmico com um reservatório de calor à temperatura T, as probabilidades de ocupação dos estados μ são,

$$p_{\mu} = \frac{1}{Z} e^{-E_{\mu}/\kappa T} \quad (2.21)$$

onde E_{μ} é a energia do estado μ , κ é a constante de Boltzmann e Z é a função de partição,

$$Z = \sum_{\mu} e^{-E_{\mu}/\kappa T} = \sum_{\mu} e^{-E_{\mu}\beta} \quad (2.22)$$

O conhecimento da função de partição possibilita conhecer todo comportamento macroscópico de um sistema no equilíbrio. Reescrevendo a equação 2.20 com a distribuição de equilíbrio sendo a de Boltzmann temos:

$$\langle Q \rangle = \frac{\sum_{\mu} Q_{\mu} e^{-\beta E_{\mu}}}{\sum_{\mu} e^{-\beta E_{\mu}}} \quad (2.23)$$

onde a soma é realizada sobre todas as configurações do sistema tornando impraticável usar esta fórmula para fazer simulação de Monte Carlo em um sistema grande afim de obter as medidas de valores esperados de grandezas observáveis.

Para contornar essas dificuldades usamos o método de amostragem por importância [20, 21], que consiste em realizar a simulação de Monte Carlo considerando somente as configurações de maior relevância, em que cada estado do sistema é selecionado de acordo com uma probabilidade proporcional ao peso de Boltzmann, ao invés de selecionarmos todas as configurações.

De modo que para uma grandeza Q, seu valor médio é calculado como:

$$\langle Q_N \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N Q_{\mu_i} \quad (2.24)$$

o cálculo do valor esperado é reduzido à média aritmética simples em relação aos N estados representativos do sistema. As simulações de Monte Carlo são fundamentadas no processo de Markov juntamente com a ergodicidade e o balanço detalhado garantem que a distribuição de Boltzmann seja gerada no equilíbrio.

2.5.1 Processo de Markov

O método de Monte Carlo é fundamentado pelo processo de Markov, que gera uma trajetória de configurações de modo que a nova configuração é selecionada de maneira aleatória e dependente apenas da configuração antecedente. A probabilidade de gerar um estado ν , dado um estado μ é denominada de probabilidade de transição $P(\nu \rightarrow \mu)$ e para um adequado processo de Monte Carlo todas as probabilidades de transição devem atender duas condições:

- Não devem variar ao longo do tempo;
- Devem depender somente das propriedades dos estados atuais μ e ν , e não de quaisquer outros estados que o sistema passou anteriormente.

As probabilidades de transições $P(\mu \rightarrow \nu)$ devem satisfazer a restrição

$$\sum_{\nu} P(\mu \rightarrow \nu) = 1 \quad (2.25)$$

uma vez que os processos de Markov devem gerar algum estado ν quando tinha um sistema no estado μ .

Em uma simulação de Monte Carlo o processo de Markov é usado repentinamente para gerar uma cadeia de Markov de estados. Iniciando com o estado μ , utilizando o processo para gerar o novo estado ν , e então mantendo esse estado no processo para gerar um outro estado λ , e assim por diante. O processo de Markov é escolhido especialmente de modo que quando ele é executado durante um período de tempo suficientemente longo a partir de qualquer estado do sistema, acabará por produzir uma sucessão de estados que aparecem com probabilidade dada pela distribuição de Boltzmann. Portanto partindo de um estado qualquer, o processo de Markov conduz o sistema para um estado de equilíbrio: uma sucessão de estados com probabilidades dada pela distribuição de Boltzmann [20].

2.5.2 Ergodicidade

A condição de ergodicidade é que torna possível ao processo de Markov, atingir qualquer outro estado partindo de um dado estado do sistema em um intervalo de tempo suficiente para isto. Essa condição deve ser atendida, pois devemos ter a certeza de que todos estados são acessíveis na formação da cadeia de Markov.

Em um processo de Markoviano há a possibilidade de algumas probabilidades de transição entre dois dados estados serem nulas, porém a condição de ergodicidade nos garante que deve haver pelo menos um caminho cuja probabilidade de transição entre dois estados escolhidos seja não nula.

2.5.3 Balanço Detalhado

A condição de balanço detalhado assegura que a distribuição de Boltzmann, é a distribuição gerada quando o sistema está no equilíbrio, e não outra distribuição. A condição essencial é que a taxa na qual o sistema faz transição para um dado estado, e desse para um outro estado qualquer deve ser igual. Matematicamente pode ser expressa por

$$\sum_{\nu} p_{\mu} P(\mu \rightarrow \nu) = \sum_{\nu} p_{\nu} P(\nu \rightarrow \mu) \quad (2.26)$$

Usando a regra da soma, equação 2.25 pode ser simplificada para a seguinte forma

$$p_{\mu} = \sum_{\nu} p_{\nu} P(\nu \rightarrow \mu) \quad (2.27)$$

Para qualquer conjunto de probabilidades de transição que satisfaça esta equação, a probabilidade de distribuição p_{μ} estará no equilíbrio da dinâmica do processo de Markov. Uma condição adicional para as probabilidades de transição que deve ser levada em consideração é:

$$p_{\mu} P(\mu \rightarrow \nu) = p_{\nu} P(\nu \rightarrow \mu) \quad (2.28)$$

Esta é a condição de balanço detalhado que mostra que na média, o sistema vai do estado μ para o estado ν na mesma taxa de transição que vai do estado ν para o estado μ . Podemos escrever as probabilidades p_{μ} e p_{ν} de forma que satisfaça à distribuição de Boltzmann

$$\frac{P(\mu \rightarrow \nu)}{P(\nu \rightarrow \mu)} = \frac{p_{\mu}}{p_{\nu}} = \exp[-\beta(E_{\nu} - E_{\mu})] \quad (2.29)$$

Esta equação é uma restrição para a escolha das probabilidades de transição $P(\mu \rightarrow \nu)$, que em conjunto com a condição de ergodicidade assegura que a distribuição de equilíbrio do processo de Markov é a distribuição de Boltzmann.

2.6 Modelo Blume-Capel

O modelo Blume-Capel foi proposto originalmente por Blume [22] e Capel [23] para o estudo das transição de fase de primeira ordem em sistemas magnéticos, sendo uma generalização do

modelo de Ising com $S = 1$. O Hamiltoniano do modelo é descrito por:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j + \Delta \sum_i S_i^2, \quad (2.30)$$

onde as variáveis de spins S_i assumem os valores $0, \pm 1$, sendo J a constante de acoplamento e Δ é o campo de anisotropia. O primeiro termo representa a interação na rede cuja a soma é realizada sobre os pares de primeiros vizinhos mais próximos dos sítios e o segundo termo representa o somatório sobre todos os spins numa rede com D dimensões. Este modelo tem sido estudado por diversas técnicas de aproximação, como exemplo, por expansões em séries [24], escala de tamanho finito [25, 26], aproximação de campo médio [22, 23], grupo de renormalização [27] e simulação de Monte Carlo [28–33].

O diagrama de fase do modelo Blume-Capel apresenta uma fase ordenada (ferromagnética) e outra desordenada (paramagnética) separadas por uma linha de transição, que se altera de um carácter de segunda ordem (tipo Ising) para uma transição de primeira ordem no ponto tricrítico. Quando $\Delta \rightarrow -\infty$ somente os valores das variáveis de spins $S = \pm 1$ prevalecem, e o modelo de Ising com Spin-1/2 é recuperado. Por outro lado quando $\Delta \rightarrow \infty$ tende prevalecer $S = 0$, e neste limite o sistema fica caracterizado como paramagnético.

O modelo Blume-Capel possui uma versão estendida denominada de modelo Blume-Emery-Griffiths (BEG) [34], que originamente teve como interesse estudar a fase de separação da mistura He^3 e He^4 , onde o átomo de He^3 é representado pelo estado com valor $S = 0$, e os átomos He^4 é representado pelos estados com valores $S = \pm 1$. Cada sítio da rede corresponde apenas um único átomo de He^3 ou He^4 , onde o átomo de He^4 possuem um grau de liberdade adicional que é introduzido com o objetivo de conceder um parâmetro de ordem ao sistema.

O modelo BEG tem extensivamente estudado sistemas que exibem comportamento tricrítico tais como fluidos de multicomponentes [35] e ligas semicondutoras [36].

2.7 Algoritmo de Banho Térmico

O algoritmo de banho térmico foi proposto por Creutz no contexto de teoria de calibre em rede [37], sendo uma variante do algoritmo de Metropolis local. Em vez de permitir a mudança na energia para determinar a nova configuração do spin, pode-se simplesmente selecionar aleatoriamente uma nova direção do spin e, em seguida, comparar um número aleatório $Z(x)$ com a probabilidade

de Boltzmann da nova configuração, ou seja, aceitar a nova configuração se $Z(x) < e^{-E_i/K_B T}$, onde E_i é a energia do estado testado. Este método é mais útil em circunstâncias em que a abordagem tipo Metropolis tem uma baixa taxa aceitação [7]. O algoritmo de banho térmico é capaz de gerar o estado de equilíbrio do sistema, fazendo uma série de passos de Markov no espaço da configuração. O algoritmo funciona da seguinte forma:

- O sistema começa com uma dada configuração inicial .
- Para cada sítio no sistema realiza-se a evolução da configuração: o sítio é escolhido e seu novo estado é determinado (com uma certa probabilidade) enquanto os estados de todos os outros sítios é considerado fixo.
- O passo de evolução é repetido o número de vezes desejado

Todo o processo deve ser repetido várias vezes, alguns passos de Monte Carlo devem ser descartados até o sistema atingir uma configuração de equilíbrio, em seguida computa-se a média das grandezas.

2.8 Rede Aleatória de Voronoi-Delaunay

Os diagramas de Voronoi ou tesselação de Voronoi são estruturas que representam transmissões de informações a vizinhos bem próximos de um dado conjunto de pontos. Estes diagramas são aplicados em diversas áreas como: estatística, minerologia, meteorologia, fisiologia, cartografia, computação, planejamento urbano entre outras [38]

A tesselação de Voronoi é dual da triangulação de Delaunay, logo a partir de uma pode-se obter a outra. A construção da tesselação de Voronoi para um determinado conjunto de pontos no plano é definida da forma seguinte: Para todos os pontos primeiro determina-se uma célula poligonal constituída pela região do espaço mais próximo a esse ponto do que qualquer outro ponto. Então, se considera que as duas células são vizinhas quando elas possuem uma extremidade em comum. A partir da tesselação de Voronoi a rede dual pode ser obtida pelo seguinte procedimento:

- i Quando duas células são vizinhas, um link é colocado entre os dois pontos localizados nas células;

- ii A partir dos links obtém-se a triangulação do espaço que é chamada de rede de Delaunay;
- iii A cada ponto ou sítio da triangulação de Delaunay corresponde ao núcleo da célula da tesselação de Voronoi.

A construção da rede de Delaunay segundo o algoritmo de Friedberg e Ren [39]. Inicialmente desenha-se N pontos ou sítios aleatórios, distribuídos segundo uma distribuição de Poisson, em uma caixa de tamanho $L \times L$. Em seguida liga-se estes pontos de acordo a prescrição de Voronoi-Delaunay. Na Figura 6 são mostrado exemplo da tesselação de Voronoi e da dual rede aleatória de Delaunay.

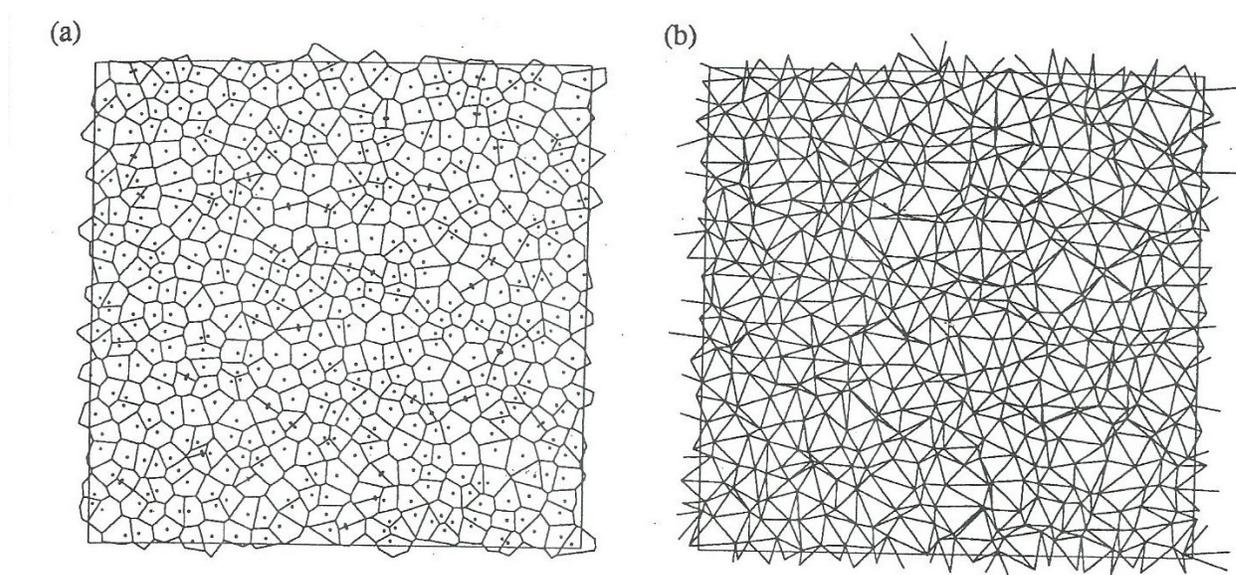


Figura 6 – (a) Tesselação de Voronoi no espaço com $N = 504$ pontos. (b) A rede aleatória de Delaunay

2.9 Método do Histograma

O método do histograma é uma técnica usada para extrair informações das simulações de Monte Carlo e sua aplicação tem sido bem-sucedida no estudo dos fenômenos críticos [5,40]. Esta técnica permite fazer uma simulação numa determinada temperatura T_0 e extrapolar os resultados para um intervalo de temperatura próximas a T_0 , de modo que torna possível obter as propriedades estatísticas do sistema com ganho computacional significativo. O método do histograma tem como

base inicial as idéia de Valleu e Card [20] e uma versão mais comum, foi proposta por Ferrenberg e Swendsen [40].

Partindo de um sistema canônico em que a probabilidade de encontrar os observáveis, tais como a energia total (E) e a magnetização (M) é dada por:

$$P_K(E, M) = \frac{W(E, M)}{Z(K)} \exp(-KE) \quad (2.31)$$

$$Z(K) = \sum_{E, M} W(E, M) \exp(-KE) \quad (2.32)$$

onde $W(E, M)$ corresponde a densidade de estados com valores de energia E e magnetização M , sendo $Z(K)$ a função de partição para um dado valor de K .

Uma simulação realizada em uma temperatura $T = T_0$ gera configurações do sistema com frequência proporcional ao peso de Boltzmann $\exp[-K_0 E]$, visto que esta simulação de Monte Carlo vai gerar uma distribuição de probabilidades de equilíbrio. O histograma $H(E, M)$ fornece uma estimativa exata da distribuição de probabilidade de equilíbrio apenas para o sistema no limite termodinâmico. No caso de uma simulação real ocorre erro estatístico no histograma. Desse modo o histograma $H(E, M)$, deve ser normalizado pelo número de medidas N realizadas, para fornecer uma estimativa para $P_{K_0}(E, M)$, temos:

$$\frac{H(E, M)}{N} = \frac{\tilde{W}(E, M)}{Z(K_0)} \exp(-K_0 E) \quad (2.33)$$

onde $\tilde{W}(E, M)$ corresponde a uma estimativa para a real densidade de estados $W(E, M)$. Conhecendo-se a distribuição de probabilidade exata para um valor de K é suficiente para determinar qualquer K . Pode-se reescrever a equação 2.33 da seguinte forma:

$$\tilde{W}(E, M) = \frac{Z(K_0)}{N} H(E, M) \exp(K_0 E) \quad (2.34)$$

Trocando a densidade de estados $W(E, M)$ na equação 2.31 pela real densidade de estados $\tilde{W}(E, M)$ dada na equação 2.34. Assim este resultado pode ser utilizado para calcular a distribuição de probabilidade para valores distintos de K com

$$P_K(E, M) = \frac{H(E, M) \exp(\Delta K E)}{\sum_E H(E) \exp(\Delta K E)} \quad (2.35)$$

onde $\Delta K = K_0 - K$. Deste modo usando essa nova distribuição de probabilidade $P_K(E, M)$ pode-se calcular o valor médio de qualquer função $f(E, M)$ através de

$$\langle f(E, M) \rangle_K = \frac{\sum_{E, M} f(E, M) H(E) \exp(\Delta K E)}{\sum_{E, M} H(E, M) \exp(\Delta K E)}. \quad (2.36)$$

e o sistema pode ser estudado como uma função contínua de K . Como o valor de K pode variar continuamente possibilita este método ser ideal para localizar os picos das derivadas termodinâmicas e estudar o comportamento crítico com boa resolução.

No entanto, nas simulações de Monte Carlo as medidas realizadas são finitas e as grandezas provenientes do uso do método de histograma fornecem resultados confiáveis apenas para uma estreita faixa de intervalo para $\Delta K = K_0 - K$ finito em torno do valor simulado. Quando ΔK varia bastante, a distribuição de probabilidade extrapolada se desloca da medida realizada pelo histograma tornando essas medidas sensivelmente afetadas. Este efeito é mostrado na Figura 7, onde representa o histograma da simulação do modelo de Ising

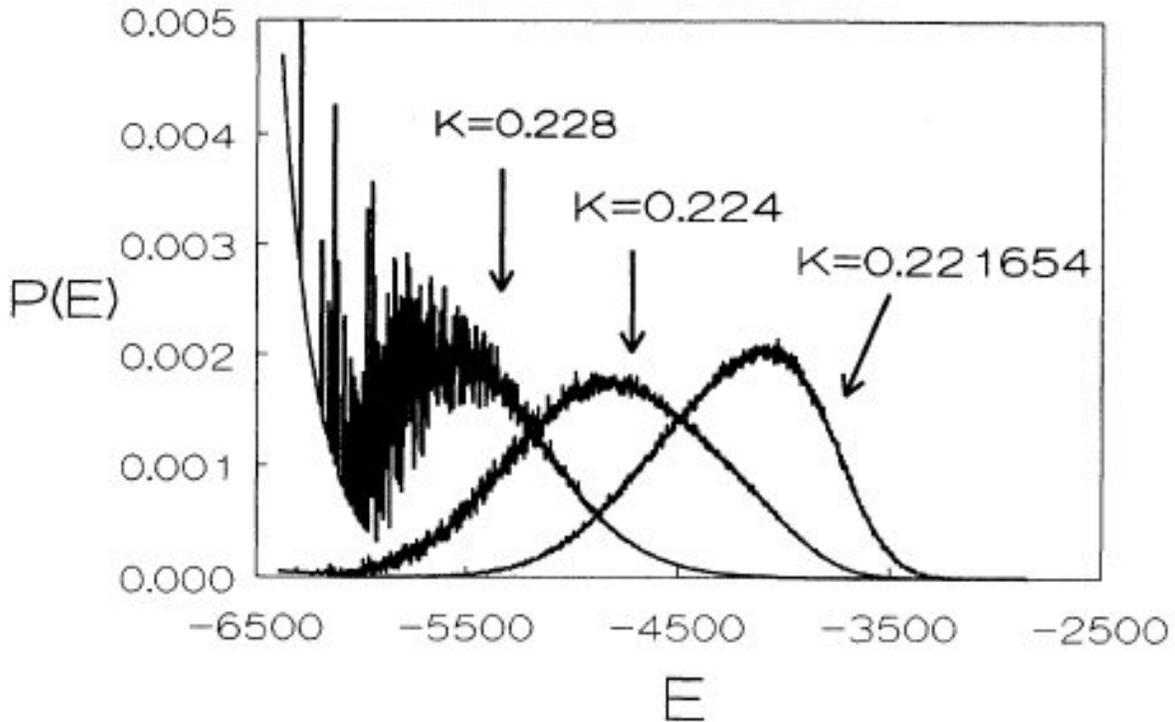


Figura 7 – Distribuição de probabilidade para a energia para $L=16$. A simulação original foi realizada para $K=0.221654$. As demais distribuições foram obtidas através do método de um único histograma, descrito anteriormente no texto [5].

Apesar do método de histograma apresentar erros adicionais aos já inerentes das simulações de Monte Carlo tem se mostrado muito eficiente para definir a localização e o valor máximo das

grandezas termodinâmicas próximo a criticalidade. Como pode ser observado na Figura 8, onde calor específico é calculado em função da temperatura e comparado com resultados exatos para o modelo ferromagnético de Ising em duas dimensões com $L = 16$.

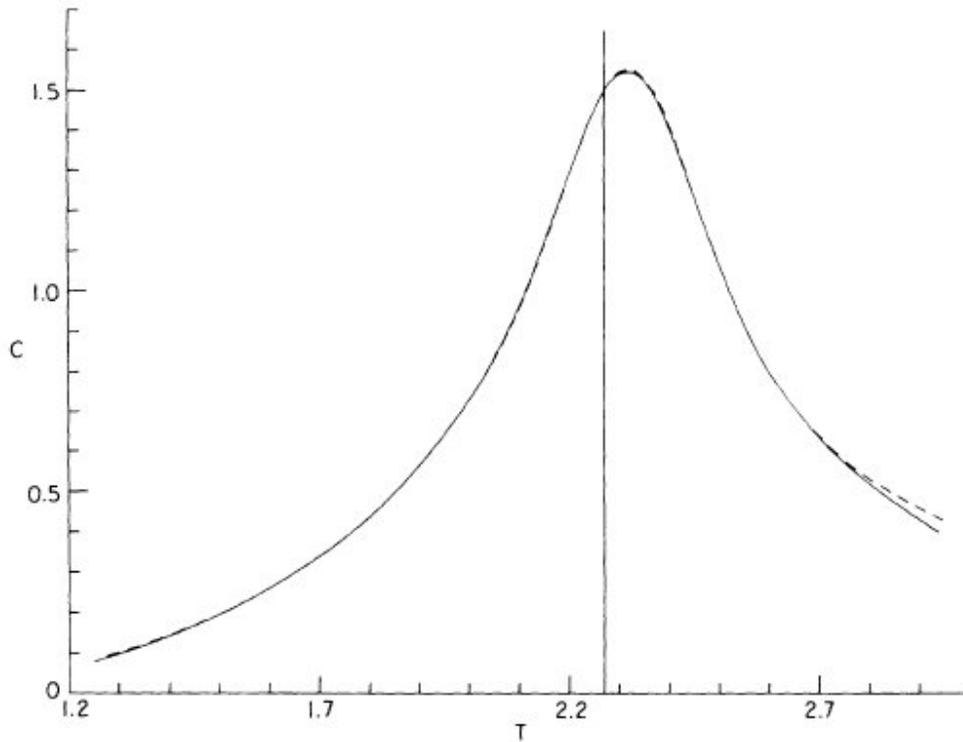


Figura 8 – Gráfico do calor específico contra T para $L=16$ do modelo Ising em duas dimensões. A linha tracejada é a solução exata, enquanto que a linha sólida corresponde ao resultado calculado de uma única simulação em $T = T_c$. A localização da temperatura simulada é marcada com a linha vertical [6].

3 Estado da Arte

3.1 Introdução

O estudo dos sistemas aleatórios foi intensificado nas últimas décadas, não apenas experimentalmente, mas também teórico e computacionalmente [41, 42]. O principal motivo reside no fato de que realizações experimentais de materiais reais são bastante difícil de ser obtidas numa forma pura. Portanto, a presença de impurezas e heterogeneidades são de fato importantes de modo a descrever o comportamento de tais realizações físicas sob diferentes condições externas [8].

Em relação a materiais magnéticos, algumas abordagens teóricas gerais têm sido capazes de prever os efeitos que alguns tipos de aleatoriedade vai produzir em um sistema puro. O critério de Harris [9, 43] afirma que, quando o expoente crítico do calor específico do sistema puro α_{pure} é positivo, a desordem temperada aleatória é uma perturbação relevante, levando a um comportamento crítico diferente do que no caso puro (que é o que acontece com o modelo de Ising tridimensional). Por outro lado, quando α_{pure} é negativo, a desordem é irrelevante (como é o caso do modelo de Heisenberg tridimensional) e o comportamento crítico não muda. No caso marginal, $\alpha_{pure} = 0$, nenhuma previsão pode ser feita (isto é o que acontece com o modelo de Ising bidimensional, no entanto, o cenário de ter os mesmos expoentes críticos, com correções logarítmicas, parece ser o mais comum nos dias de hoje [44–52]). Resultados semelhantes também foram obtidos sobre os sistemas topologicamente desordenados, definidos em redes com conectividades aleatórias [43, 53].

3.2 Aleatoriedades em modelos de spins

A presença de aleatoriedades pode alterar de forma drástica o caráter da transição como também provocar mudança na classe de universalidade [54–60]. Por exemplo, argumentos gerais e cálculos do grupo de renormalização [57], estudo realizado através de rigorosos cálculos matemáticos [54], e mapeamento físico intuitivo de diferentes sistemas desordenados [59] indica que para a dimensionalidade espacial $d = 2$ [54, 55], uma transição de fase de primeira ordem pode ser convertida em uma transição de fase de segunda ordem mesmo para um infinitésimo de ligação aleatórias, e para $d \geq 3$ [55] o mesmo ocorre para desordem além de um limiar de força (ver referência [56]). Este tipo de efeito de suavização de transições de fase de primeira ordem abaixo de duas dimensões

tem sido recentemente estabelecido [61] em uma unificada e rigorosa forma incluindo uma enorme variedade de diferentes tipos de aleatoriedades em ambos os modelos de spins clássico e quântico.

As previsões acima têm corroborado no caso do modelo de Potts com q -estados aleatórios bidimensional [59, 60, 62–69]. Por exemplo, estudo via simulação de Monte Carlo [60, 66, 67], cálculos com matriz de transferência [69], e técnicas de teoria de campo conforme [64]. Tem sido mostrado que, para $q > 4$, a transição de primeira ordem é substituída por uma transição de segunda ordem e a classe de universalidade do modelo aleatório em duas dimensões é diferente do puro ou do sistema de Ising desordenado com o correspondente número de estados q . O modelo de Potts com q estados então tem sido considerado um modelo padrão, onde as previsões discutidas acima podem ser testadas sob um ponto de vista teórico.

Outro modelo, bastante interessante, onde essas idéias também podem ser aplicadas, é o modelo Blume-Capel (BC) [23, 70]. Para spin-1, é bem conhecido que para $d \geq 2$ a versão pura exhibe linhas de transição de fase de primeira e de segunda ordem, bem como um ponto tricrítico. Apesar do interesse teórico neste modelo, mas tem também um recurso experimental porque pode ser aplicado na descrição de vários sistemas reais além daqueles magnéticos [71] tais como ligas ternárias, fluidos de componentes múltiplos e mistura ^3He - ^4He [72], entre outras.

A versão diluída por ligação do modelo Blume-Capel em duas dimensões foi estudado via simulações de Monte Carlo pela aplicação da algoritmo de Wang-Landau em redes quadradas e triangulares [33, 73, 74]. As simulações detalhadas mostraram que os expoentes críticos ao longo da linha de transição de segunda ordem são os mesmos como aqueles para o modelo de Ising puro, como esperado. No entanto, o quadro é bastante diferente para a transição contínua proveniente de uma linha de primeira ordem do modelo puro. Enquanto que para a rede quadrada [33, 73] os novos expoentes críticos são agora diferentes, e para a rede triangular eles estão na mesma classe de universalidade como para o sistema puro [74]. Este é um tipo de resultado surpreendente porque se poderia esperar o mesmo comportamento crítico. Assim, como a universalidade não é dependente da topologia da rede, apenas da dimensão em vez disso, seria muito bem-vindo para tratar o modelo de BC em outras estruturas aleatórias ou redes aleatórias para procurar o que será o respectivo comportamento crítico.

A nossa proposta neste trabalho é fazer o tratamento do modelo Blume-Capel spin-1 bidimensional em redes aleatórias de Voronoi-Delaunay com desordem temperadas nas conectividades a fim de estudar o comportamento da transição entre as fases ordenada (ferromagnética) e desordenada

(paramagnética).

Estudos sobre desordem nas conectividades focado principalmente em redes em duas dimensões foram realizados por meio de simulações de Monte Carlo no modelo de Ising nas redes aleatórias de Voronoi-Delaunay [75, 76], mostraram que os expoentes críticos encontrados são os mesmos que aqueles para o modelo de Ising na rede quadrada. Portanto, pertence a mesma classe de universalidade de Ising bidimensional.

Contudo, para o modelo Blume-Capel spin-1 Fernandes et. al [4] mostraram que os expoentes não tiveram mudança para o tipo de rede aleatória de Voronoi-Delaunay sem direcionamento ou seja pertence a classe de universalidade de Ising em duas dimensões, mas para o tipo de rede aleatória de Voronoi direcionada foi mostrado que esta apresenta dois tipos de transição: uma transição de fase de segunda ordem para $p < p_c$ e uma transição de fase de primeira ordem para $p > p_c$, sendo que $p_c \approx 0.35$ é a probabilidade de religação crítica, onde o sistema muda a ordem da transição. Os expoentes críticos para $p < p_c$ foi calculado e estes não pertencem à mesma classe de universalidade como o modelo ferromagnético bidimensional regular.

Recentemente tem havido um grande interesse em estudar redes, que são diferentes das redes de Bravais cristalinas regulares [77–79]. O tratamento de tais redes complexas ou redes sem escala, tem sido motivada principalmente por conectividades de computadores e organizações sociais [78], entre outros. Em seguida, verifica-se bastante interessante compreender o comportamento de um sistema magnético em tais redes e em grafos aleatórios também. Apesar de ser puramente teórico até agora, este certamente poderia desencadear a possibilidade de sintetizar realizações experimentais de materiais regidos por sítios de redes aleatórias. Consequentemente, um modelo magnético pode ser definido por interações usuais de spin, com cada spin localizado nos sítios de uma rede complexa [80]. As principais questões agora diz respeito à existência de uma adequada transição de fase de primeira ou de segunda ordem e, em último caso, a classe de universalidade correspondente da transição crítica.

4 Modelo e Método

4.1 Modelo e Simulações

Consideramos o modelo ferromagnético de Blume-Capel spin-1 com campo cristalino definido pelo o Hamiltoniano

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j + \Delta \sum_{i=1}^N s_i^2, \quad (4.1)$$

onde a primeira soma é executada sobre os pares de sítios numa rede de Voronoi-Delaunay (VD) e o modelo Blume-Capel spin-1 com as variáveis S_i assume values $\pm 1, 0$. Na equação (4.1) J é o acoplamento de troca e Δ é o parâmetro de anisotropia de único íon. A segunda soma é feita sobre os N spins na rede aleatória.

No limite $\Delta \rightarrow -\infty$, somente os estados ± 1 para cada variável de spin, e recupera-se o modelo de Ising com Spin-1/2. Para uma rede regular a temperatura de transição de segunda ordem diminui à medida que o valor de Δ aumenta até o ponto tricrítico, onde a transição muda para primeira ordem. Esta temperatura de transição de primeira ordem, por sua vez, cai para zero em $\Delta = z/2$, onde z é o número de coordenação da rede. Alguns valores típicos de ponto tricrítico são $\Delta_t = 2.925(8)$ e $T_t = 1.025(10)$ [81] para rede triangular regular e $\Delta_t = 1.965(5)$ e $T_t = 0.609(4)$ para rede quadrada [26].

No presente caso as variáveis de spins S_i são colocadas em cada sítio de uma rede aleatória VD com $N = L \times L$ sítios, onde L é o lado da rede bidimensional regular. Nas redes aleatórias tipo VD o número de coordenação varia localmente entre 3 e 17 em duas dimensões, com os vizinhos mais próximos médios sendo 6, semelhante à rede triangular. A construção de Voronoi ou tesselação para um determinado conjunto de pontos no plano é definido como se segue [82, 83]. Para cada ponto, primeiro constroi-se uma célula poligonal que consiste na região de espaço mais próxima do ponto do que a qualquer outro ponto. Portanto, se duas dessas células compartilham uma aresta, elas são consideradas como vizinhas. A partir da disposição de Voronoi pode-se obter a rede dual pelo procedimento seguinte: quando duas células são vizinhas, uma ligação é colocado entre os dois pontos localizados nas células. A partir das ligações, obtém-se a triangulação do espaço que é chamada de rede aleatória de Delaunay. Portanto, a rede de Delaunay é dual à tesselação de Voronoi.

As simulações foram realizadas com o modelo Blume-Capel spin-1 nas redes aleatórias de Voronoi-Delaunay com diversos valores de $\Delta = -3.0, -2.0, -1.0, 0, 1.0, 2.0, 2.5, 2.7, 2.8, 2.9, 3, 3.1, 3.3$ e 3.4 em redes compostas de diferentes tamanhos com N variando de $N = 500, 1000, 2000, 4000, 8000, 16000, 32000$ e 64000 , sendo N o número total de sítios. E para simplificar, definimos o comprimento linear do sistema em termos do tamanho de uma rede regular em duas dimensões $L = N^{1/2}$. Consideramos também $J = 1$ de tal forma que os valores acima de campo de cristal são dadas em unidades de interação de troca. Para cada tamanho do sistema, médias temperada sobre a desordem nas conectividade são aproximados por uma média sobre $R = 100$ realizações independentes de redes.

As amostras das desordens para um dado N , por sua vez, foram geradas seguindo dois procedimentos principais. Em primeiro lugar, cria-se uma caixas R e usando um gerador de números aleatórios de N nodos são colocadas de forma aleatória dentro de cada caixa, de tal forma a gerar R caixas numeradas $\text{caixa}N_1, \text{caixa}N_2, \dots, \text{caixa}N_R$. Em segundo, para cada caixa computa-se:

- i o número de vizinhos de um determinado site;
- ii o rótulo da cada vizinho de um determinado site;
- iii a distância correspondente entre o site e os seus vizinhos.

Tudo isto é feito de acordo com a prescrição de Delaunay para cada caixa e os resultados são armazenados em arquivos $\text{red}N_1, \text{red}N_2, \dots, \text{red}N_R$. O programa principal de Monte Carlo em seguida chama cada um desses arquivos de redes para execução das simulações correspondentes.

Para cada simulação, iniciamos com uma configuração uniforme de spins (os resultados são, contudo, independente da configuração inicial). Executamos 1.5×10^7 passos de Monte Carlo (MCS) por spin com 5×10^6 configurações descartadas por termalização usando o gerador de números aleatórios [84].

A fim de estudar o comportamento crítico do modelo utilizamos o algoritmo de banho térmico e para cada 10 passos de MCS definimos a energia por spin, $e = E/N$, e a magnetização por spin, m , ambas foram medidas e seus valores foram gravados em arquivos de series temporais onde

$$E = -J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j + \Delta \sum_{i=1}^N s_i^2, \quad (4.2)$$

$$m = \sum_i s_i / N. \quad (4.3)$$

A partir dessas séries de medições de energia podemos computar, por repesagem usando a técnica de um único histograma [40] sobre um intervalo de temperatura controlável ΔT , grandezas como a energia média, o calor específico e o cumulante de Binder de quarta ordem da energia que são respectivamente dados por as seguintes funções,

$$u(K) = \frac{[\langle E \rangle]_{av}}{N} = [\langle e \rangle]_{av}, \quad (4.4)$$

$$C(K) = K^2 N [\langle e^2 \rangle - \langle e \rangle^2]_{av}, \quad (4.5)$$

$$B(K) = 1 - \frac{[\langle e^4 \rangle]_{av}}{3 [\langle e^2 \rangle]_{av}^2}, \quad (4.6)$$

onde $K = 1/T$, e T é a temperatura reduzida medida no sistema com $k_B = 1$, onde k_B é a constante de Boltzmann. Nas equações acima $\langle \dots \rangle$ representa a média termodinâmica e $[\dots]_{av}$ para médias sobre as realizações diferentes. De modo analogo, nós podemos derivar a partir das medidas da média do módulo da magnetização $[\langle |m| \rangle]_{av}$, a correspondente susceptibilidade, e o cumulante magnético de quarta ordem (ou cumulante de Binder da magnetização), dados respectivamente por

$$\chi(K) = KN [\langle m^2 \rangle - \langle |m| \rangle^2]_{av}, \quad (4.7)$$

$$U_4(K) = 1 - \frac{[\langle m^4 \rangle]_{av}}{3 [\langle m^2 \rangle]_{av}^2}. \quad (4.8)$$

Outras quantidades úteis envolvendo médias de ambas energia e magnetização são as derivadas do módulo da magnetização em relação ao inverso temperatura dadas por

$$\frac{d[\langle |m| \rangle]_{av}}{dK} = [\langle |m| E \rangle - \langle |m| \rangle \langle E \rangle]_{av}, \quad (4.9)$$

$$\frac{d \ln [\langle |m| \rangle]_{av}}{dK} = \frac{[\langle |m| E \rangle - \langle |m| \rangle \langle E \rangle]_{av}}{[\langle |m| \rangle]_{av}}, \quad (4.10)$$

$$\frac{d \ln [\langle |m^2| \rangle]_{av}}{dK} = \frac{[\langle |m^2| E \rangle - \langle |m^2| \rangle \langle E \rangle]_{av}}{[\langle |m^2| \rangle]_{av}}. \quad (4.11)$$

A fim verificar a temperatura crítica e a ordem da transição de fase deste modelo, aplicamos a teoria de escala de tamanho finito (TEF). Inicialmente, procura-se por um mínimo do parâmetro de quarta-ordem dado pela equação 4.6. Esta grandeza dá uma descrição qualitativa assim como uma também quantitativa da ordem da transição [85]. Por exemplo sabe-se [86] que este parâmetro assume um valor mínimo $B_{i,min}$ na temperatura de transição eficaz $T_c(N)$. Pode-se mostrar [87] que para uma transição de segunda ordem $\lim_{N \rightarrow \infty} (2/3 - B_{i,min}) \rightarrow 0$, mesmo em T_c , enquanto que uma transição de primeira ordem o mesmo limite que mede a mesma quantidade é pequeno e $(2/3 - B_{i,min}) \neq 0$.

Um procedimento alternativo para conseguir uma transição de fase de segunda ordem é olhar para os cruzamentos dos cumulantes dados pela equação (4.8) como uma função da temperatura para vários tamanhos de rede N . É conhecido que na temperatura crítica o cumulante de quarta ordem U_4 é independente do tamanho da rede e quando representados graficamente como uma função da T eles devem se cruzarem em T_c com o correspondente valor U_4^* sendo uma quantidade universal [17] (de fato, U_4^* é menos universal do que os expoentes críticos porque depende das condições de contorno e na razão de aspecto (forma) do sistema, ver referência [88]).

Uma análise ainda mais quantitativa pode ser realizada através de (TEF) do máximo do calor específico C_{max} , o máxima da susceptibilidade χ_{max} e o mínimo do parâmetro de Binder $B_{i,min}$. No caso de uma transição de fase de primeira ordem, então devemos esperar, para sistemas de grandes tamanhos, um comportamento assintótico (TEF) da forma [89,90],

$$C_{max} = a_C + b_C N + c_C/N + \dots \quad (4.12)$$

$$\chi_{max} = a_\chi + b_\chi N + c_\chi/N + \dots \quad (4.13)$$

$$B_{min} = a_B + b_B/N + c_B/N^2 + \dots \quad (4.14)$$

onde a_ℓ e b_ℓ , com $\ell = C, \chi$, e B são constantes, e o termo de correção de escala levado em conta é dado pelo terceiro termo com c_ℓ também sendo uma constante [91,92].

Por outro lado, no caso de uma transição de fase de segunda ordem, então devemos esperar, para tamanhos de sistemas grandes, um comportamento assintótico de (TEF) da forma

$$C = C_{reg}(T) + L^{\alpha/\nu} f_C(x) [1 + A_C(x)L^{-\omega}], \quad (4.15)$$

$$[\langle |m| \rangle]_{av} = L^{-\beta/\nu} f_m(x) [1 + A_m(x)L^{-\omega}], \quad (4.16)$$

$$\chi = \chi_{reg}(T) + L^{\gamma/\nu} f_\chi(x) [1 + A_\chi(x)L^{-\omega}], \quad (4.17)$$

$$\frac{d \ln[\langle |m|^p \rangle]_{av}}{dK} = L^{1/\nu} f_p(x) [1 + A_p(x)L^{-\omega}], \quad (4.18)$$

onde C_{reg} e $\chi_{reg}(T)$ são termos regular background dependentes da temperatura, ν , α , β , e γ são expoentes críticos usuais, e $f_i(x)$ são funções TEF com $x = (K - K_c)L^{1/\nu}$ sendo a variável de escala. O segundo termo nos colchetes aproximam todas as correções de escala por um único termo, onde ω é o expoente de correção de escala e A_i são constantes não universais (ver, por exemplo, a referência [93]). Deve-se ressaltar ainda que a equação 4.15 é válida apenas para $\alpha > 0$. Especificamente, para o modelo de Ising bidimensional caso ($\alpha = 0$) que é aqui relevante, o calor específico tem uma divergência logarítmica em L (ver, por exemplo, referência [94]). Além disso, tem sido mostrado que as correções de escala são importantes levar em consideração quando se estuda sistemas desordenados [47, 95].

Em todos os casos, estimamos as barras de erro das flutuações entre as realizações diferentes. Note que ambos contêm estes erros, o erro médio termodinâmico para uma dada realização e a variância teórica para médias termodinâmicas infinitamente precisas que são causadas pela variação quenched, da geometria das redes aleatória.

5 Resultados e Discussão

Neste capítulo serão apresentados resultados obtidos através de simulações de Monte Carlo para modelo Blume-Capel Spin-1 em redes aleatórias de Voronoi-Delaunay, em conjunto com a técnica escala de tamanho finito, e também da técnica de histograma. Desse modo calculou-se algumas grandezas termodinâmicas do modelo, bem como os expoentes críticos e o diagrama de fase a fim de fazer o estudo de seu comportamento crítico.

5.1 Linha de transição de segunda ordem

Inicialmente, uma estimativa aproximada da temperatura de transição K_0 foi obtida a partir do comportamento das grandezas físicas apresentadas no capítulo anterior, empregando apenas simulações simples. Em seguida, a técnica de repesagem padrão foi aplicada, considerando os R dados de séries temporais diferentes. Então, com os dados dos histogramas disponíveis se é capaz de determinar a dependência da temperatura das variáveis termodinâmicas de interesse na vizinhança do ponto de simulação K_0 . Uma vez que a dependência da temperatura é conhecida para cada realização, podemos facilmente calcular a média da desordem. Por exemplo, no caso do calor específico tem uma $C(K) = \sum_{i=1}^R C_i(K)/R$, a partir da qual se calcula os valores máximos das quantidades médias, por exemplo, $C_{max}(K_{max}) = \max_K C(K)$. O mesmo tem sido feito para outras grandezas termodinâmicas definidas no texto. Temos de fato também considerado $R = 50$ e $R = 150$. No entanto, temos notado que os valores correspondentes das grandezas físicas são apenas ligeiramente alterados quando se comparam com os resultados de $R = 50$ para $R = 100$ realizações, com as barras erros sendo menor. Por outro lado, quando se compara $R = 100$ para $R = 150$, principalmente os erros foram diminuídos, mesmo assim não significativamente. Por esta razão, a fim de economizar tempo computacional, consideramos $R = 100$ realizações independentes em todas as simulações.

A fim de melhor estimar a temperatura crítica, calculamos primeiro o cumulante de Binder de quarta ordem da magnetização dada pelo equação (4.8). Como discutido na seção 2.3, esta quantidade é independente do tamanho do sistema para uma transição de fase de segunda ordem e devem interceptarem na correspondente temperatura crítica [17]. Isto fornece uma maneira para calcular a temperatura de transição sem o conhecimento de qualquer expoente. Nas Figuras 9 (a) and (b) o

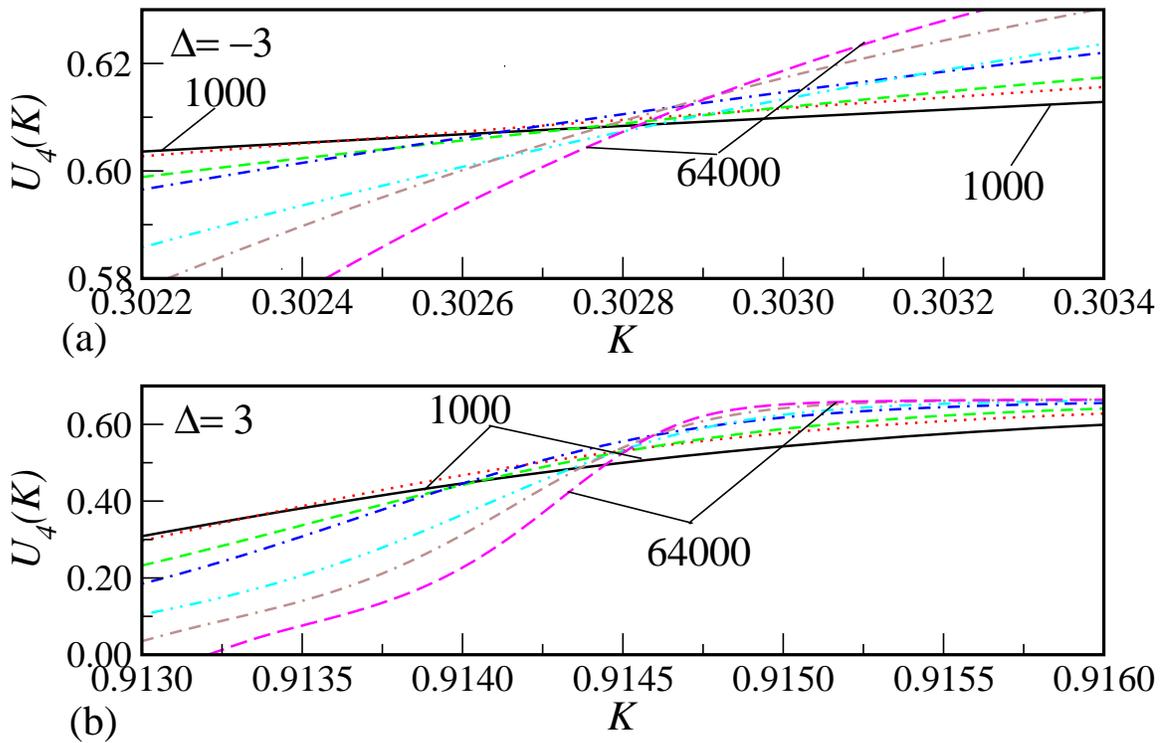


Figura 9 – Cumulante de Binder magnético de quarta em função de K para vários valores de tamanho do sistema com $N = 1000, 2000, 4000, 8000, 16000, 32000$ e 64000 com $\Delta = -3.0$ (a) e $\Delta = 3.0$ (b)

o cumulante de Binder de quarta ordem é mostrado como uma função de K para vários valores do tamanho do sistema de rede $N \geq 1000$ e do campo de cristal $\Delta = -3$ e $\Delta = 3$, respectivamente. Analisando os cruzamentos das curvas para os vários tamanhos de sistema obtemos $K_c = 0.303(1)$ para $\Delta = -3$ e $K_c = 0.914(2)$ para $\Delta = 3$. Para estimar U_4^* notamos que varia pouco em K_c para $\Delta = -3$, mas o mesmo não ocorre para $\Delta = 3$. Neste caso, temos $U_4^* = 0.61(1)$ para $\Delta = -3$ e $0.54(1)$ para $\Delta = 3$. É claro que, no primeiro caso se obtém um valor semelhante ao da rede bidimensional regular, enquanto que no segundo caso uma classe diferente universalidade parece emergir. Este mesmo processo é utilizado para calcular as temperaturas críticas e os cumulantes de quarta ordem para outros valores de Δ . Alguns resultados são apresentados na Tabela 1 para $\Delta \leq 1$ e na Tabela 2 para $2.0 \leq \Delta \leq 3.0$. Pode-se ver que o valor de U_4^* é aproximadamente o mesmo que do valor da classe de universalidade do modelo de Ising puro na rede regular, ou seja $0.6106924(18)$ [96] (que só vai se referir a 0.6107 nas tabelas abaixo), exceto para $\Delta = 3$, $U_4^* = 0.54(1)$. Isto sugere uma classe de universalidade diferente perto de campo de cristal $\Delta \sim 3$. A fim de verificar este ponto com mais detalhes os índices críticos correspondentes foram obtidos.

O logaritmo do módulo da magnetização no ponto de inflexão $|m|_i$ (quando a derivada de $|m|$ dada pela equação (4.9) tem um mínimo como uma função da temperatura) é mostrado na Figura 10 como função do logaritmo do tamanho rede L para diversos valores do campo de cristal Δ . Note que a quantidade $|m|_i$ também tem uma relação de escala de tamanho finito dada pela equação (4.16). Negligenciando correções de escala, ou seja tendo $A_m = 0$ na equação (4.16), o ajuste linear nos fornece a razão do expoente β/ν , que são mostrados na segunda coluna da Figura 10.

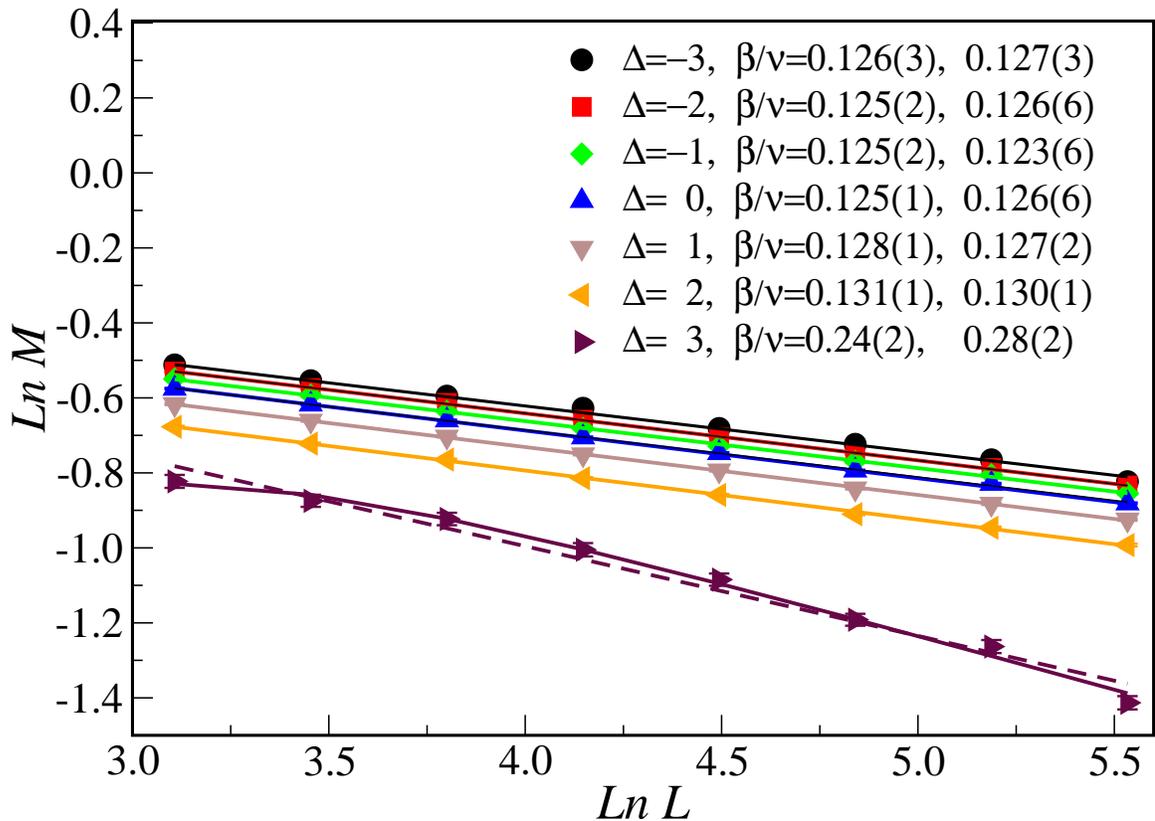


Figura 10 – Logaritmo do módulo da magnetização no ponto de inflexão em função do logaritmo do tamanho da rede L para vários valores de Δ . As linhas sólidas são os melhores ajustes de acordo com a equação (4.16) e a linha tracejada é o ajuste linear (com $A_m(x) = 0$). Os correspondentes valores da razão β/ν são dados na figura, onde a segunda coluna são os resultados do ajuste linear e a terceira coluna, tendo em conta as correções de escala.

Em relação as correções de escala, sabe-se que $\omega = 2$ vem da dimensão de escala negativa do principal operador irrelevante para o modelo de Ising bidimensional. No entanto, mesmo no caso Ising puro, isso não implica necessariamente que a principal correção de escala decai com L^{-2} . No caso da susceptibilidade, o termo background dá origem a principal correção de escala, com um expoente efetivo $\omega = 7/4$ (ver, por exemplo, referência [96]). Além disso, mesmo se a desordem

não alterar a classe de universalidade, pode ser associada com uma perturbação irrelevante com uma dimensão de escala negativa menor do que 2; este é o caso de diluição aleatória por sítio ou ligação que resulta numa perturbação marginalmente irrelevante. Assim, temos aqui considerado ω como um parâmetro de ajuste livre (mas analisado os ajustes para o valor especial de $\omega = 2$ também).

As linhas sólidas na Figura 10 são dadas a partir dos ajustes da equação 4.16. Por uma questão de clareza, nas próximas figuras, somente o ajuste linear para $\Delta = 3$ será mostrado, uma vez que ambos os ajustes são quase sobrepostos um ao outro para os outros valores do campo cristalino. Os resultados correspondentes para a relação dos expoente β/ν , tendo correções de escalar, são mostradas na terceira coluna da Figura 10. Observa-se que exceto para $\Delta = 3$, não há nenhuma diferença significativa entre os dois ajustes para os outros valores de Δ , assim como não houve diferença significativa na razão dos expoentes. A partir destes ajustes temos $\omega = 2.0(3)$. Este erro bastante grande no expoente $\omega = 2$ significa que não podemos inferir sobre qualquer correção de escala principal com expoente eficaz menor que 2 (mesmo para a susceptibilidade magnética, como será discutido abaixo). Podemos, no entanto, ver claramente o caráter de transição de segunda ordem para todos os valores do campo de cristal menores que $\Delta = 3$. Pode-se também notar que para esta quantidade um desvio da razão de expoentes do sistema puro começa a desenvolver para $\Delta \geq 1$. É também evidente que as correções de escala parecem ser mais eficaz para campos de cristal perto de 3. Nas tabelas 1 and 2 temos os expoentes correspondentes obtidos a partir dos ajustes tendo em conta as correções de escala.

O logaritmo da susceptibilidade magnética, dada pela equação (4.7), calculada no ponto crítico, $\chi(K_c)$, e também o máximo da suscetibilidade, χ_{max} , são mostrados, respectivamente, nas Figuras 11 and 12, como uma função do logaritmo do tamanho do sistema L . Para um determinado valor de Δ , e para cada tamanho de rede, $\chi(K_c)$, foi calculada a temperatura crítica correspondente, dada pela a primeira linha nas Tabelas 1 e 2 (isto é, provenientes dos cruzamentos dos cumulantes). Em ambas as figuras, as linhas sólidas são os ajustes com equação 4.17 e a linha a tracejada é o ajuste linear tendo $A_\chi(x) = 0$. Mais uma vez, uma transição de segunda ordem é evidente, com expoentes, dentro das margens de erro, o mesmo se calculados a partir de $\chi(K_c)$ ou χ_{max} . Contudo, neste caso, parece que a razão do expoente γ/ν está mais próxima da classe de universalidade de Ising mesmo para $\Delta = 2$, tendo uma mudança sensível para $\Delta = 3$. O valor correspondente do expoente de correção de escala também é $\omega = 2.0(3)$, e não foi possível obter um resultado

definitivo de um expoente menor, como foi observado para o modelo de Ising bidimensional puro.

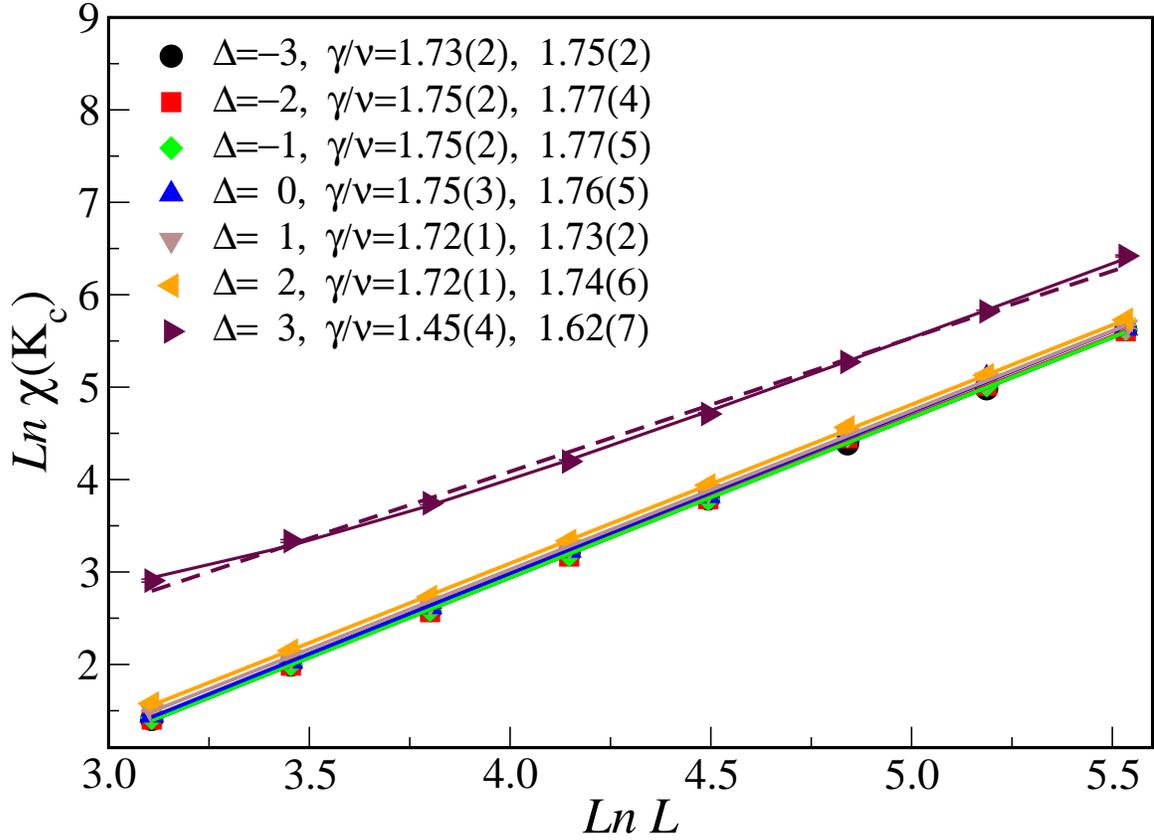


Figura 11 – Logaritmo da susceptibilidade $\chi(K_c)$ na temperatura crítica em função do logaritmo do tamanho da rede L para vários valores de $\Delta \leq 3$. As linhas sólidas são os melhores ajustes de acordo com a equação (4.17) e a linha tracejada é o ajuste linear (com $A_\chi(x) = 0$). Os correspondentes valores da razão γ/ν são dados na figura, onde a segunda coluna são os resultados do ajuste linear e a terceira coluna, tendo em conta as correções de escala.

Temos também notado nenhuma diferença significativa nos resultados, mesmo variando K_c entre suas barras de erro. Além disso, os expoentes obedecem, dentro das barras de erro, a relação hiperescala

$$2\frac{\beta}{\nu} + \frac{\gamma}{\nu} = d, \quad (5.1)$$

onde $d = 2$ é a dimensionalidade espacial da rede. Para completar, os expoentes a partir dos ajustes tomando as correções de escala são também dados nas Tabelas 1 e 2.

O expoente do comprimento de correlação ν pode também ser estimado a partir das derivadas dadas pela equação (4.18). Nas Figuras 13 e 14 mostram os máximos das derivadas dos logaritmos como uma função do logaritmo do tamanho de rede L para $p = 1$ e $p = 2$ e vários valores do

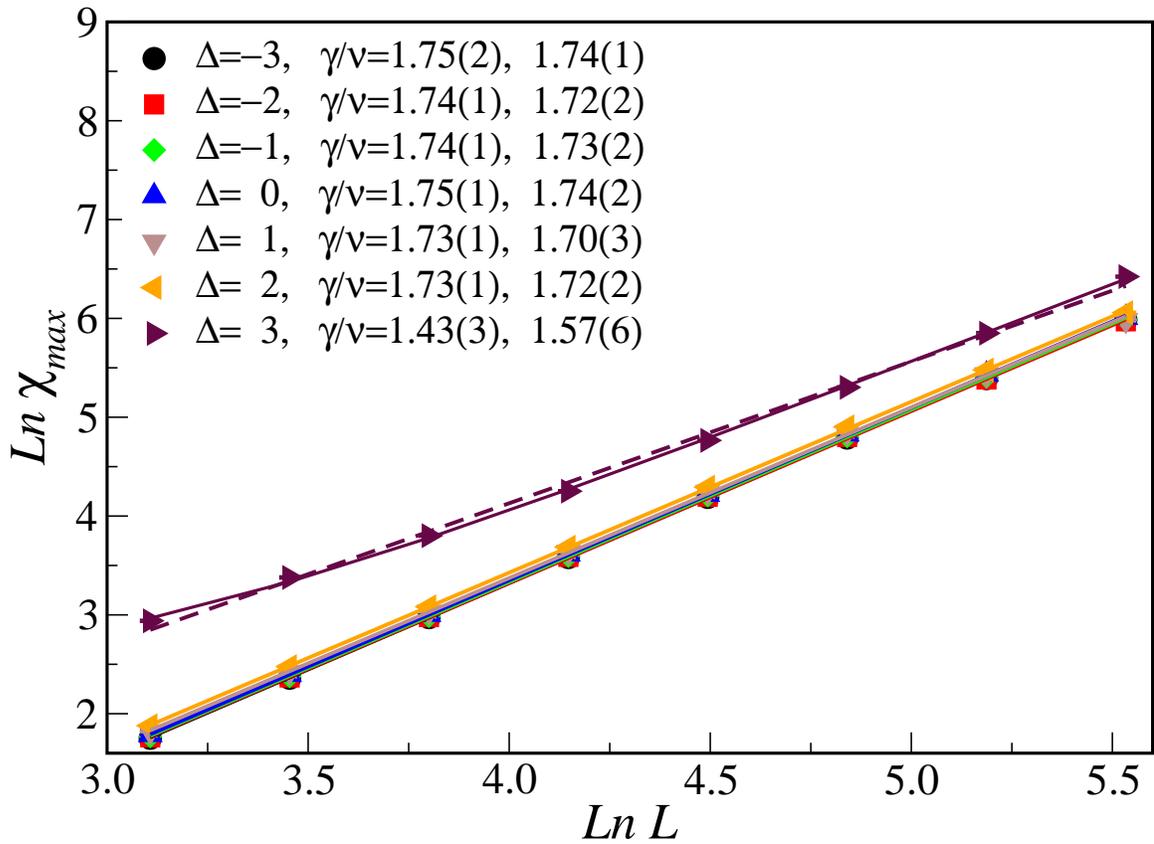


Figura 12 – Logaritmo da susceptibilidade máxima $\chi(K_{max})$ em função do logaritmo do tamanho da rede L para vários valores de $\Delta \leq 3$. As linhas sólidas são os melhores ajustes de acordo com a equação (4.17) e a linha tracejada é o ajuste linear (com $A_\chi(x) = 0$). Os correspondentes valores da razão γ/ν são dados na figura, onde a segunda coluna são os resultados do ajuste linear e a terceira coluna, tendo em conta as correções de escala.

campo cristalino $\Delta \leq 3$. As mesmas observações feitas antes mantêm-se agora para $p = 1$ e $p = 2$. No entanto, as correções de escala parecem ser menos pronunciado neste caso. Note também que o expoente $1/\nu$ também é comparável à classe de universalidade de Ising $\Delta = 2$. Por uma questão de comparação, os resultados completos para $\Delta = 0$, mostrado na Tabela 1, estão de acordo com a precedente referência [?].

Neste ponto, vale a pena analisar o comportamento dos ajustes ao desconsiderar sistematicamente os menores tamanhos de rede, a fim de monitorar o papel sub-levando de correções de escala não incluídas no ajuste Ansatz. Ao fazer isso, notar que, largando sistematicamente as redes menores nenhuma mudança significativa ocorre no valor dos parâmetros ajustados, em ambos os ajustes linear e não-linear de todos os valores de Δ . Pegando somente as quatro maiores redes, os valores são, dentro das barras de erro (o erro aumenta sistematicamente quanto menos redes são levadas

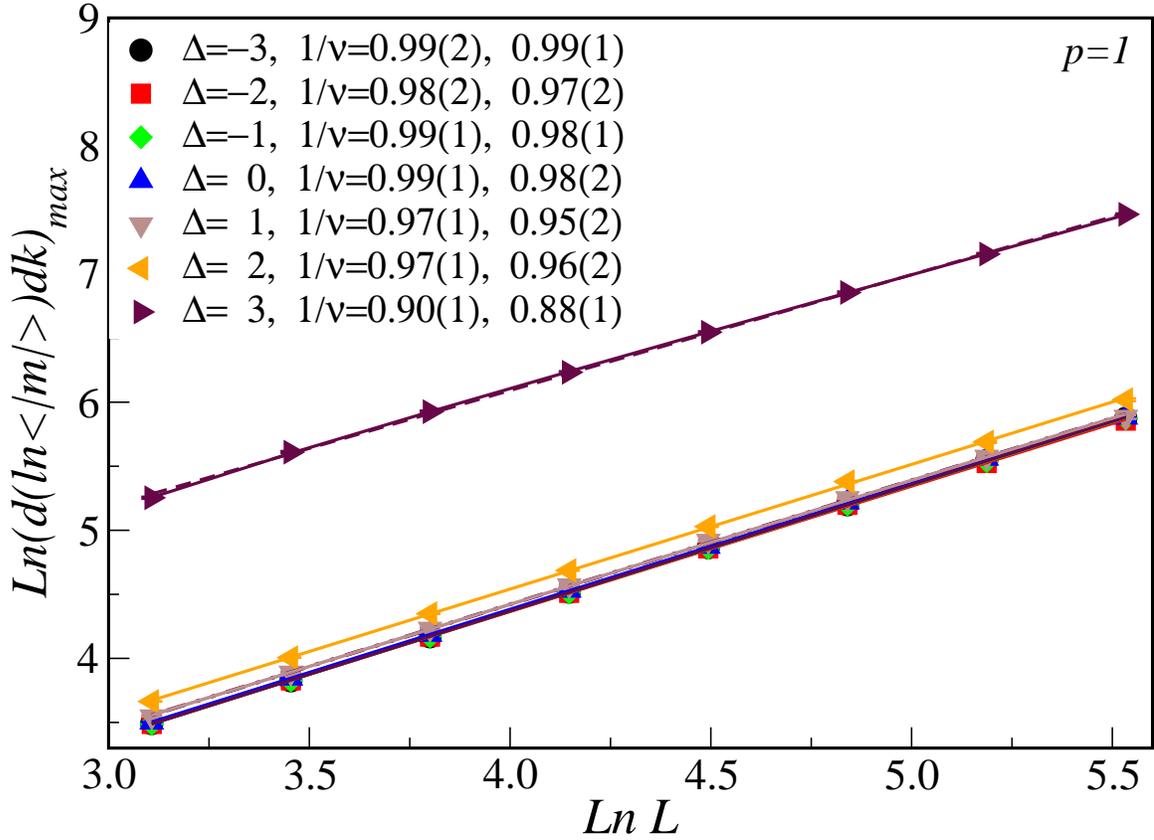


Figura 13 – Logaritmo da derivada máxima do módulo da magnetização dada equação (4.18), para $p = 1$, versus o logaritmo do tamanho da rede L para vários valores de $\Delta \leq 3$. As linhas sólidas são os melhores ajustes de acordo com a equação (4.18) e a linha tracejada é o ajuste linear (com $A_p(x) = 0$). Os correspondentes valores da razão $1/\nu$ são dados na figura, onde a segunda coluna são os resultados do ajuste linear e a terceira coluna, tendo em conta as correções de escala.

em consideração), os mesmos para ambos os ajustes, exceto para o ajuste linear de $\Delta = 3$. É interessante notar que, neste caso, deixando de incluir as redes menores, a relação dos expoentes críticos correspondente proveniente dos ajustes lineares convergem com os obtidos a partir da relação completa contendo os termos de correções de escala. Por exemplo, em $\Delta = 3$ com apenas as quatro maiores redes se obtém, a partir do ajuste linear $\beta/\nu = 0.30(3)$, $\gamma/\nu_{k_c} = 1.64(2)$, $\gamma/\nu_{max} = 1.59(2)$, $1/\nu_{p=1} = 0.88(1)$ e $1/\nu_{p=2} = 0.88(1)$, que deve ser comparado com os valores correspondentes do ajuste não linear $\beta/\nu = 0.28(2)$, $\gamma/\nu_{k_c} = 1.62(7)$, $\gamma/\nu_{max} = 1.57(6)$, $1/\nu_{p=1} = 0.88(1)$ e $1/\nu_{p=2} = 0.88(1)$.

Os resultados das Figuras 10 até 14, e também a partir do cumulante de magnetização quarta ordem U_4^* , que estão representados nas Tabelas 1 e 2, sugerem que, para $\Delta < 3$ tem uma transição de segunda ordem com expoentes que pertencem à mesma classe de universalidade do modelo

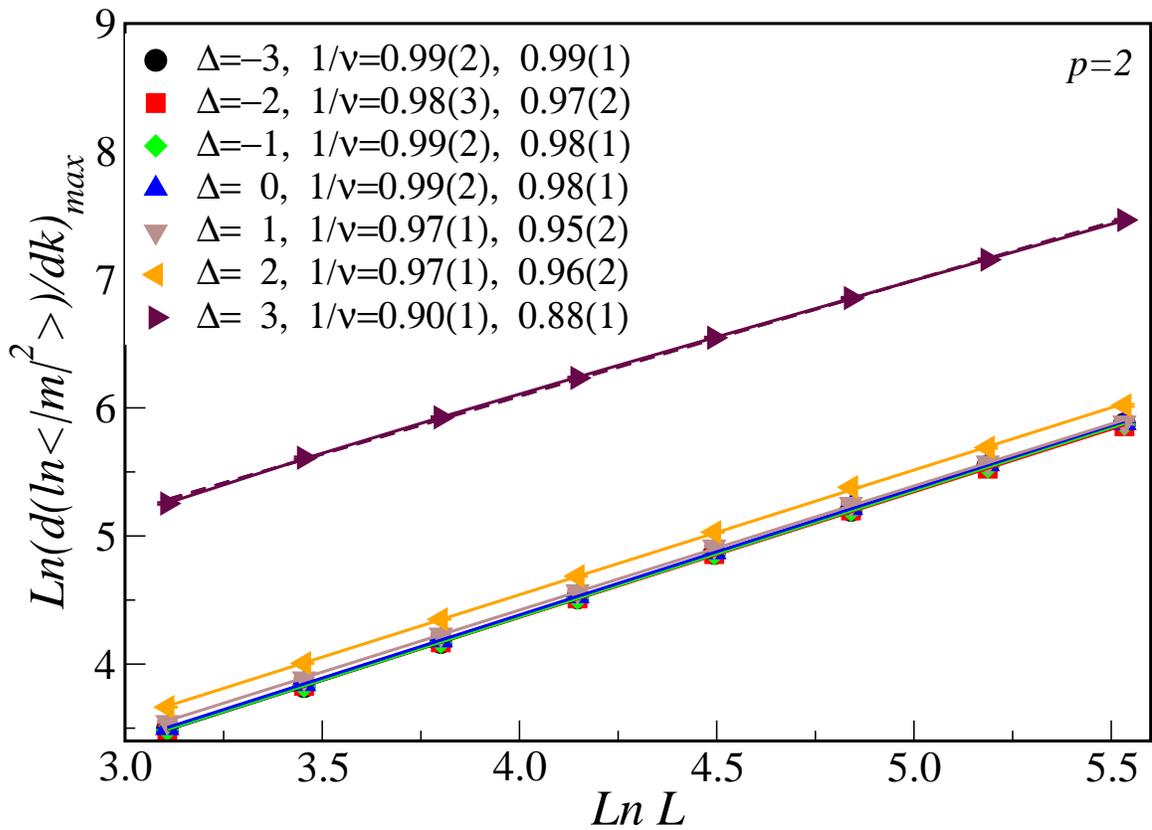


Figura 14 – Logaritmo da derivada máxima do módulo da magnetização dada equação (4.18), para $p = 2$, versus o logaritmo do tamanho da rede L para vários valores de $\Delta \leq 3$. As linhas sólidas são os melhores ajustes de acordo com a equação (4.18) e a linha tracejada é o ajuste linear (com $A_p(x) = 0$). Os correspondentes valores da razão $1/\nu$ são dados na figura, onde a segunda coluna são os resultados do ajuste linear e a terceira coluna, tendo em conta as correções de escala.

puro, menos para $\Delta = 3$, onde uma classe de universalidade diferente emerge. A variação dos expoentes de $2 < \Delta < 3$ pode ser devido à proximidade com o ponto multicrítico [ou, talvez, a presença de diferentes correções de escala não são tidas em conta nas equações (4.15)-(4.18)]. Se este ponto é um ponto tricrítico ou um ponto crítico terminal depende da existência e da topologia de uma possível linha de transição de primeira ordem para $\Delta > 3$. Em relação à tricriticalidade, neste caso tem um comportamento tricrítico não clássico uma vez que os expoentes tricrítico são aqueles de campo médio para $d \geq 3$. Tais análises para a transição de primeira ordem é deixado para a próxima seção.

Os resultados anteriores dependem, é claro, da localização da temperatura de transição. Assim, tendo os expoentes críticos disponível pode-se agora recalculas as temperaturas críticas a partir da

Tabela 1 – Inverso da temperatura crítica, cumulante de quarta ordem e expoentes críticos obtidos para o modelo Blume-Capel spin-1 em duas dimensão nas redes aleatórias de Voronoi-Delaunay e campo cristalino $\Delta \leq 1$. A última coluna fornece as quantidades correspondentes para a classe de universalidade bidimensional de Ising. A primeira linha de K_c vem dos cruzamentos dos cumulantes a segunda linha de ajustes com equação (5.2).

Δ	-3.0	-2.0	-1.0	0	1.0	Ising
K_c	0.303(1)	0.315(2)	0.332(2)	0.356(2)	0.396(1)	
K_c	0.303(2)	0.315(1)	0.332(1)	0.356(1)	0.396(1)	
U_4^*	0.61(1)	0.61(1)	0.61(2)	0.61(2)	0.61(1)	0.6107
β/ν	0.127(3)	0.126(6)	0.123(6)	0.126(6)	0.127(2)	0.125
γ/ν_{k_c}	1.75(2)	1.77(4)	1.77(5)	1.76(5)	1.73(2)	1.75
γ/ν_{max}	1.74(1)	1.72(2)	1.73(2)	1.74(2)	1.70(3)	1.75
$1/\nu_{p=1}$	0.99(1)	0.97(2)	0.98(1)	0.98(2)	0.95(2)	1
$1/\nu_{p=2}$	0.99(1)	0.97(2)	0.98(1)	0.98(1)	0.95(2)	1

Tabela 2 – Inverso da temperatura crítica, cumulante de quarta ordem e expoentes críticos obtidos para o modelo Blume-Capel spin-1 em duas dimensão nas redes aleatórias de Voronoi-Delaunay e campo cristalino $2 \leq \Delta \leq 3$. A primeira linha de K_c vem dos cruzamentos dos cumulantes a segunda linha de ajustes com equação (5.2).

Δ	2.0	2.5	2.7	2.8	2.9	3.0
K_c	0.471(2)	0.554(2)	0.615(3)	0.663(2)	0.737(2)	0.914(2)
K_c	0.471(1)	0.554(1)	0.615(2)	0.663(1)	0.737(3)	0.914(2)
U_4^*	0.61(3)	0.60(3)	0.60(2)	0.60(1)	0.60(2)	0.54(1)
β/ν	0.130(1)	0.135(6)	0.141(6)	0.144(8)	0.154(6)	0.28(2)
γ/ν_{k_c}	1.74(6)	1.73(2)	1.74(2)	1.74(3)	1.75(2)	1.62(7)
γ/ν_{max}	1.72(2)	1.71(3)	1.72(2)	1.70(4)	1.72(2)	1.57(6)
$1/\nu_{p=1}$	0.96(2)	0.95(2)	0.96(1)	0.94(3)	0.95(3)	0.88(1)
$1/\nu_{p=2}$	0.96(2)	0.95(3)	0.96(1)	0.94(3)	0.95(2)	0.88(1)

relação ETF

$$K_c(L) = K_c + aL^{-1/\nu} [1 + bL^{-\omega}], \quad (5.2)$$

onde $K_c(L)$ é a pseudo temperatura crítica para o tamanho da rede L , K_c é a temperatura crítica no limite termodinâmico e a e b são constantes não universais. Nas Figuras 15 e 16 temos os novos resultados de $K_c(L)$ para $\Delta = -3$ e $\Delta = 3$, respectivamente, como uma função de $L^{-1/\nu}$ para os nossos tamanhos de rede obtidos a partir do máximo do calor específico (4.5), o máximo da susceptibilidade magnética (4.7), e o respectivo máximo das derivadas do módulo da magnetização dada pelas equações (4.9), (4.10), e (4.11). O correspondente comprimento de correlação de expoente

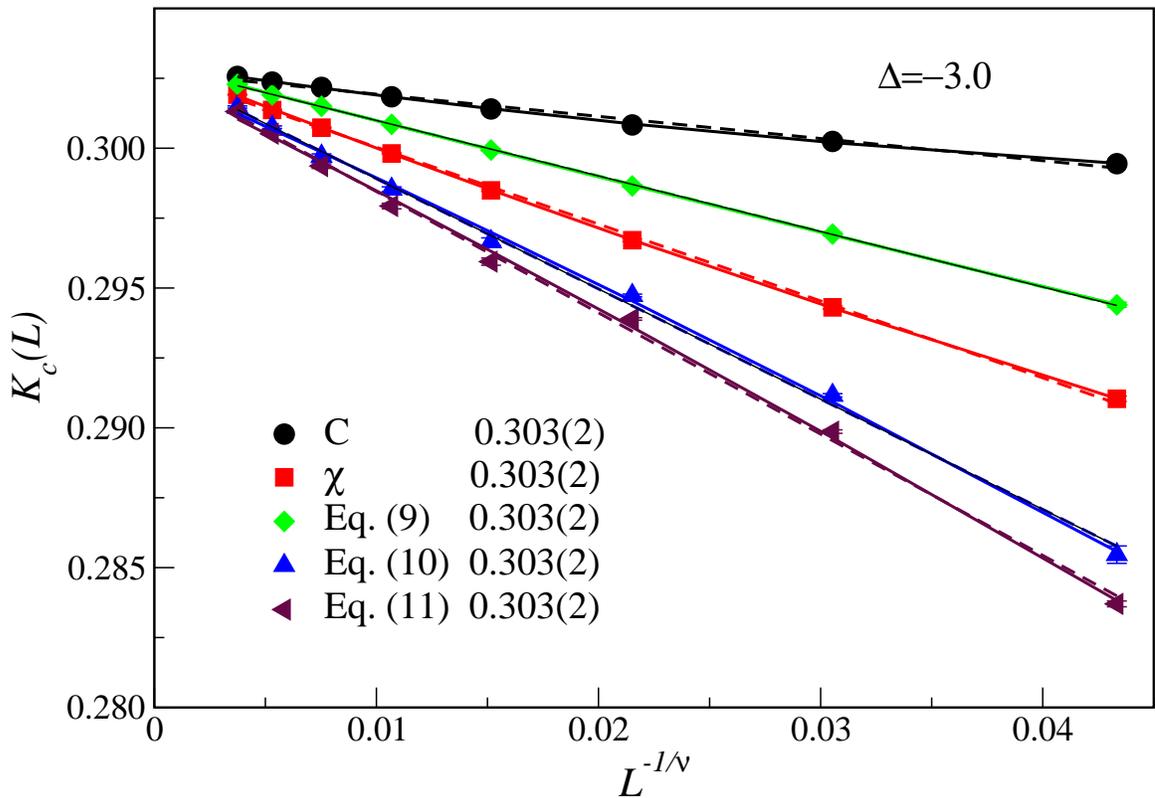


Figura 15 – Pseudo temperatura crítica $K_c(L)$ em função de $L^{-1/\nu}$ de acordo com os máximos das diversas quantidades para $\Delta = -3$. As linhas sólidas são os ajustes de acordo com a equação (5.2) e as linha tracejada é o ajuste usando a mesma equação com $b = 0$. A segunda coluna na legenda fornece a extrapolação da temperatura crítica.

crítico ν usado nos ajustes é dado nas Tabelas 1 and 2. Pode-se ver claramente que as novas temperaturas são recalculadas, dentro das barras de erro, as mesmas que as anteriormente obtidas a partir dos cruzamentos dos cumulantes de quarta ordem (são também as mesmas, independentemente da quantidade particular usada na extrapolação), dando mais confiança nos valores calculados dos expoentes críticos. Além disso, ainda dentro das barras de erro, os mesmos valores extrapolados de K_c foram obtidas se levando em conta as correções de escala ou não. O expoente de correção de escala é aqui também $\omega = 2.0(3)$, e como nos ajustes anteriores, desconsiderando sistematicamente as redes menores não foram notado mudanças significativas nas temperaturas ajustadas.

Podemos explorar mais relação (5.2) a fim de estimar o expoente crítico $1/\nu$. Como o limite termodinâmico K_c é a mesma para todas as quantidades e nenhuma diferença significativa foi observada, tendo em conta as correções de escala, podemos usar a equação (5.2) com $b = 0$ e K_c dadas nas Tabelas 1 e 2 a fim de obter $1/\nu$. Para o caso $\Delta = -3$ obtemos $1/\nu = 0.95(4)$ que fica próximo do valor do modelo de sistema puro. Para $\Delta = 3$ no entanto, temos $1/\nu = 1.04(12)$ e,

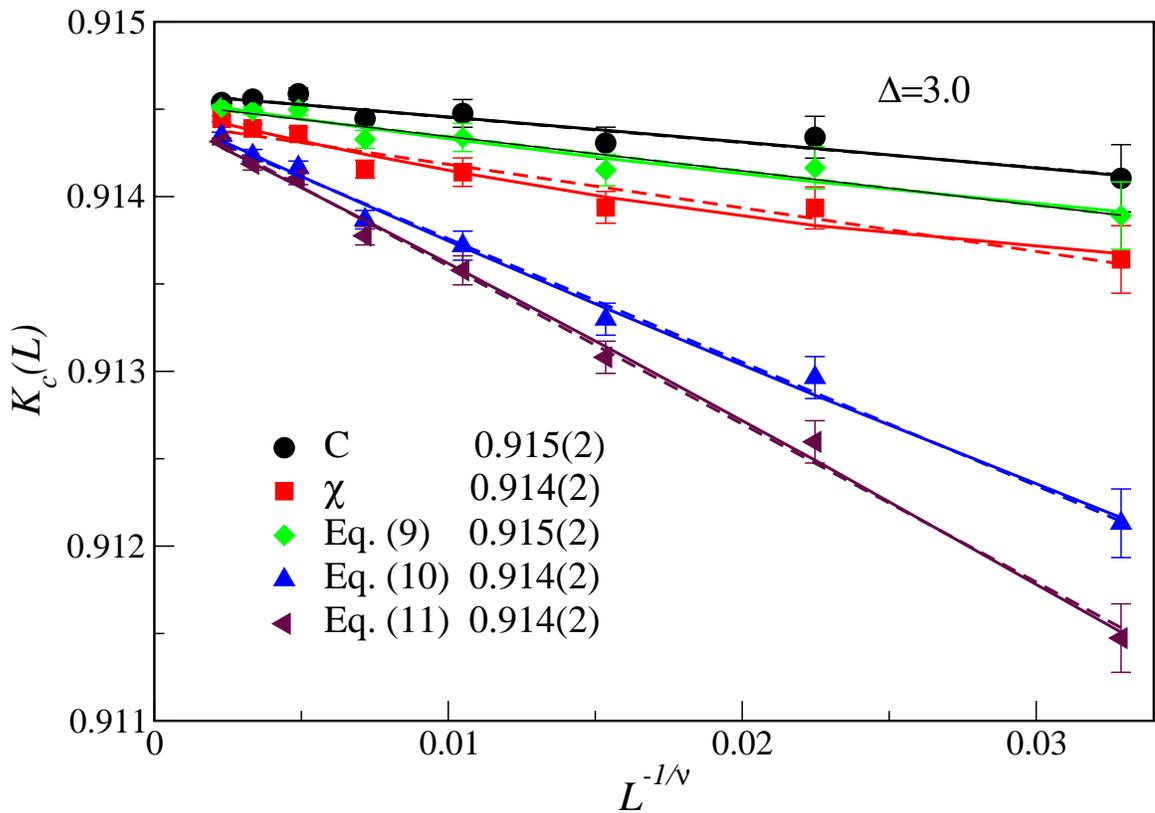


Figura 16 – Pseudo temperatura crítica $K_c(L)$ em função de $L^{-1/\nu}$ de acordo com os máximos das diversas quantidades para $\Delta = 3$. As linhas sólidas são os ajustes de acordo com a equação (5.2) e as linha tracejada é o ajuste usando a mesma equação com $b = 0$. A segunda coluna na legenda fornece a extrapolação da temperatura crítica.

devido ao erro maior, não é possível inferir uma classe de universalidade diferente neste caso.

5.2 Linha de transição de primeira ordem e ponto tricrítico

Para valores maiores do campo cristalino, ou seja, para $\Delta > 3.0$, nossas simulações de fato indicam que começa a ocorrer uma transição de fase de primeira ordem. Isto pode ser visto nas Figura 17 e 18 onde temos a magnetização M e a energia E em função da temperatura, para o valor de $\Delta = 3.1$, com tamanho de rede $N = 16000$ sítios. Analisando a forma das curvas observamos que mostra um comportamento característico de uma transição de fase de primeira ordem onde ocorre uma variação rápida de M e E em função da temperatura.

Afim de aprofundar nossa análise, temos medido como alternativa os máximos do calor específico e da susceptibilidade e analisado o seu comportamento TEF para campos de cristal perto de $\Delta = 3$. Isso pode ser visto nas Figuras 19 e 20 onde temos a TEF do calor específico e suscetibi-

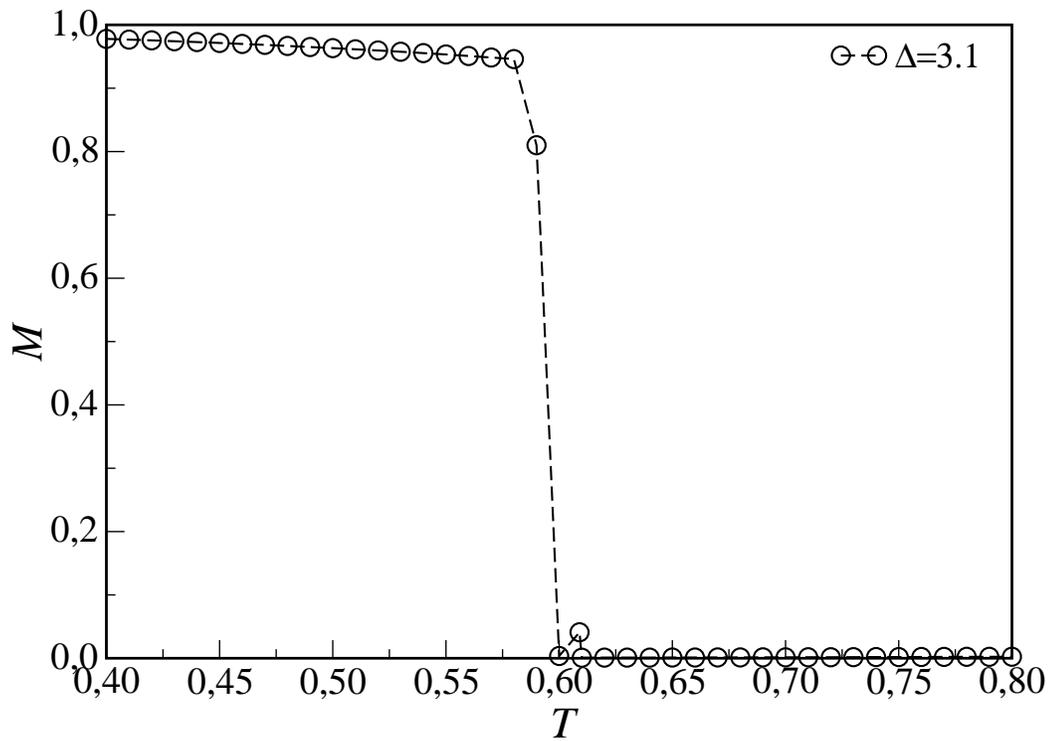


Figura 17 – Magnetização em função da temperatura T para o valor de tamanho do sistema com $N = 16000$ sítios para $\Delta = 3.1$. Apresenta uma transição de fase primeira ordem

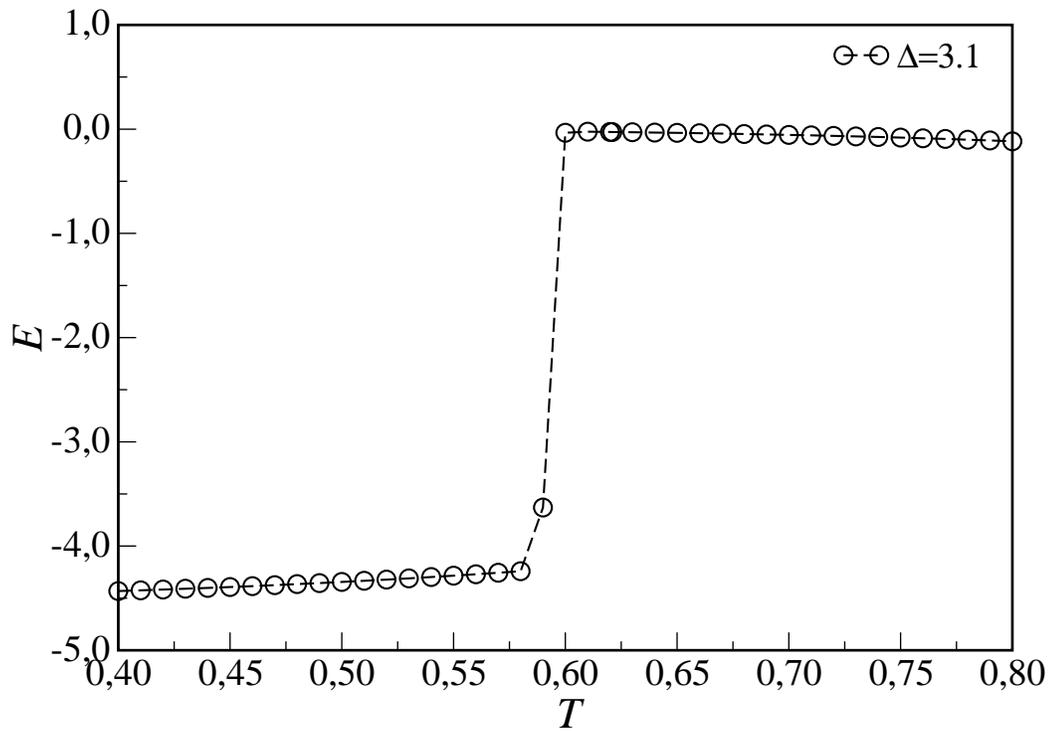


Figura 18 – Energia em função da temperatura T para o valor de tamanho do sistema com $N = 16000$ sítios para $\Delta = 3.1$. Apresenta uma transição de fase primeira ordem

lidade máximos em função dos tamanhos do sistema N para ambos os campo cristalino $\Delta = 3.1$ and 3.3 , respectivamente. Para uma transição de fase de primeira ordem esperamos, para tamanhos

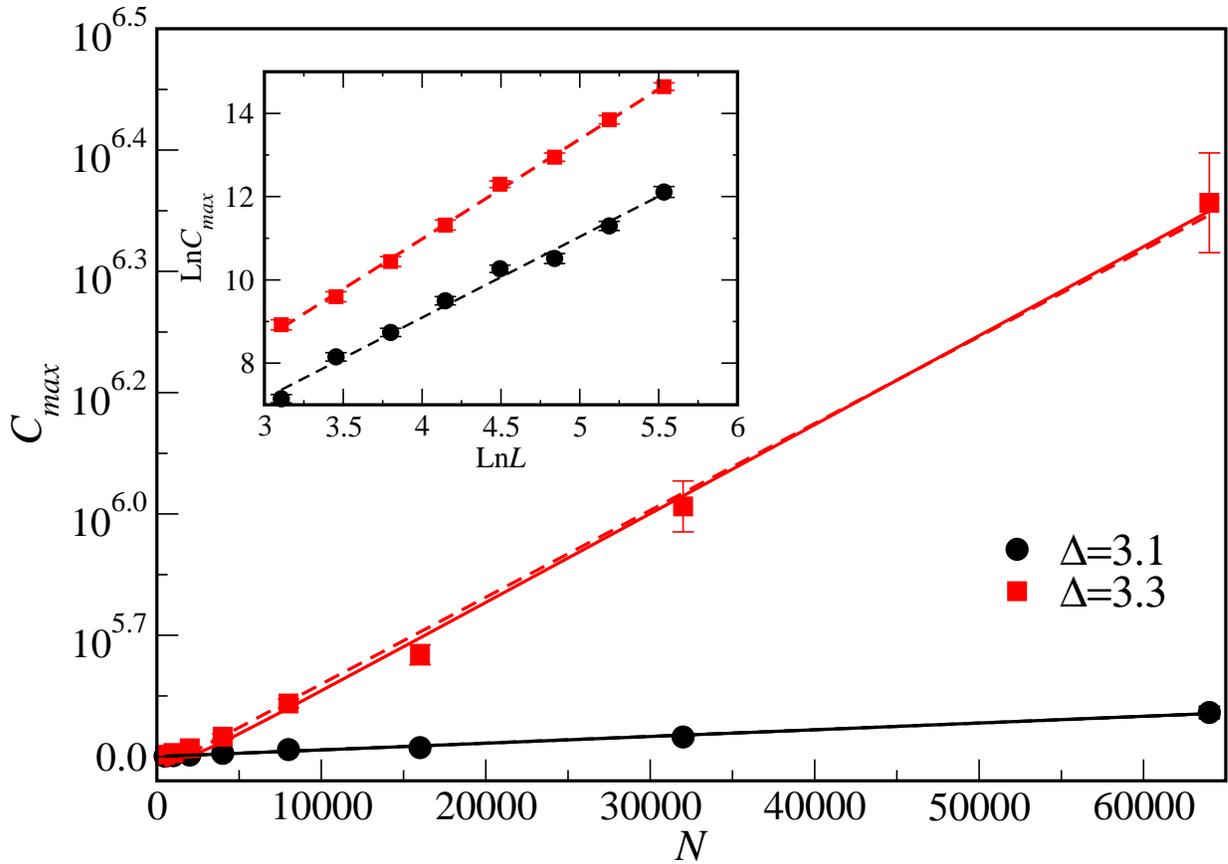


Figura 19 – TEF do calor específico máximo versus N para $\Delta = 3.1$ e 3.3 com $N = 500$ até $N = 64000$. As linhas sólidas são os ajustes de acordo com a equação (4.12) e as linha tracejada é o ajuste usando a mesma equação sem correções de escala ,com $c_C = 0$. A inserção mostra o gráfico log-log e o ajuste linear dos dados

grandes de sistema, um comportamento assintótico TEF da forma dada por equações (4.12) e (4.13) [89–92]. Pode-se ver claramente que apresenta uma natureza de transição de primeira ordem e que as correções de escala não parecem ser tão importante, mesmo neste caso. Este fato também é ilustrada na inserção das figuras, onde temos um gráfico log-log das quantidades físicas como função do tamanho da rede.

Em relação às inserções de Figuras 19 e 20, temos feito adicionalmente um ajuste linear usando relações (4.12) e (4.13) com $c_C = 0$ e $c_\chi = 0$ e permite que o expoente de dimensão da rede varie conforme $N = L^d$ nestas equações. Obtemos, neste caso um expoente $d = 1.93(3)$ para $\Delta = 3.1$ e $d = 2.3(1)$ para $\Delta = 3.3$, que são realmente próximo de $d = 2$, como esperado.

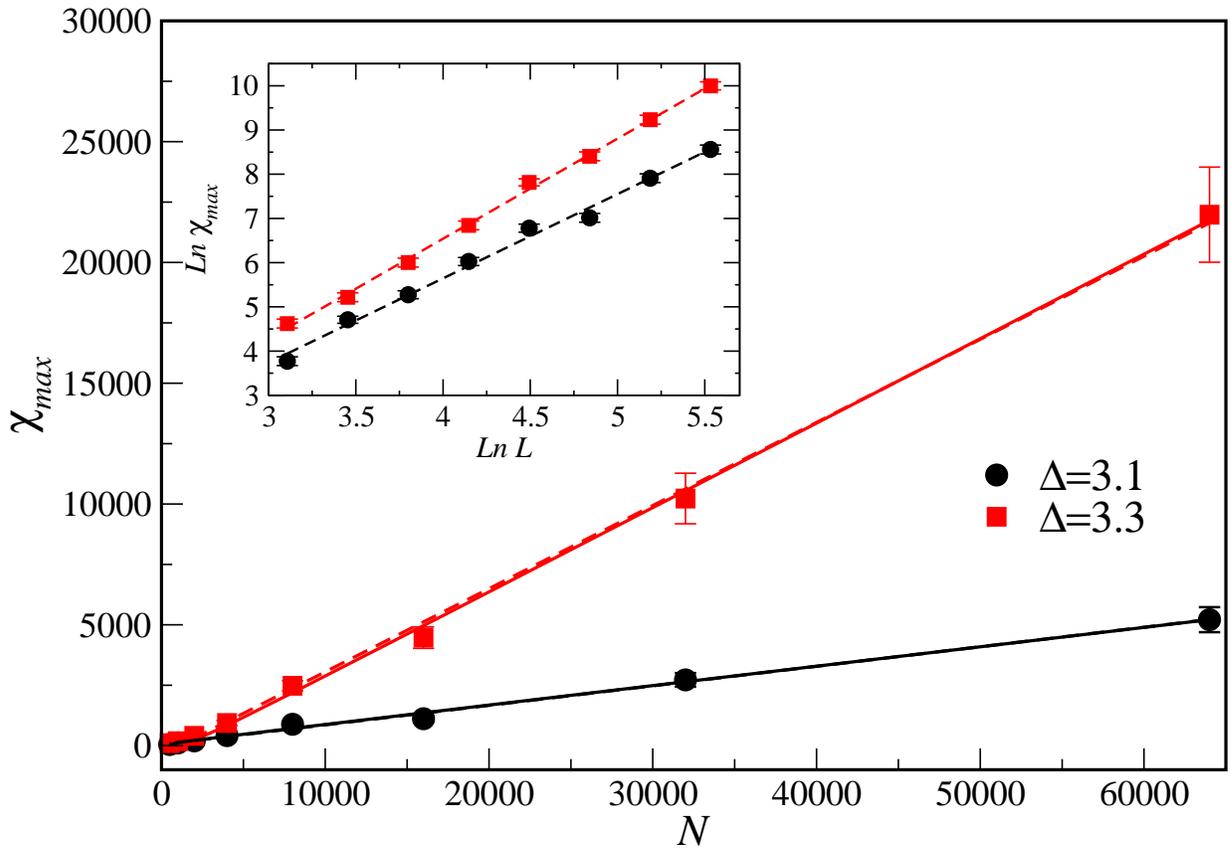


Figura 20 – TEF da suscetibilidade máxima versus N para $\Delta = 3.1$ e 3.3 com $N = 500$ até $N = 64000$. As linhas sólidas são os ajustes de acordo com a equação (4.12) e as linha tracejada é o ajuste usando a mesma equação sem correções de escala ,com $c_C = 0$. A inserção mostra o gráfico log-log e o ajuste linear dos dados

A fim de melhor caracterizar ainda a região de transição de primeira ordem retratamos na Figura 21 a diferença $2/3 - B_{min}$ como uma função do inverso do tamanho da rede $1/N$ para campos de cristal $\Delta = 3.1$ (círculos) e 3.3 (quadrados). $B(K)$ tem o comportamento usual com uma característica de mínimo como função da temperatura ou, de forma equivalente, como uma função de K . Então, para cada tamanho de rede, pegamos o valor mínimo do cumulante da energia de quarta ordem, obtido a partir da equação (4.6)) e plotamos $2/3 - B_{min}(K)$ versus $1/N$. Onde uma transição de fase de primeira ordem está presente, o $\lim_{N \rightarrow \infty} (2/3 - B_{i,min}) \neq 0$, mesmo na temperatura de transição, enquanto que numa transição de fase de segunda ordem este mesmo limite é igual a zero, isto é, $\lim_{N \rightarrow \infty} (2/3 - B_{i,min}) = 0$. Isto é claramente visto na figura 21, onde temos $(2/3 - B_{i,min}) = 0.8(5)$ para $\Delta = 3.1$, e correspondentemente $3.3(3)$ para $\Delta = 3.3$. Como uma questão de uma comparação adicional, a Figura 22 mostra a mesma quantidade, para diversos valores do campo cristalino, na região de transição de fase de segunda ordem tratada acima, onde

pode ser observado de fato que, no limite termodinâmico, a quantidade $(2/3 - B_{i,min})$ desaparece.

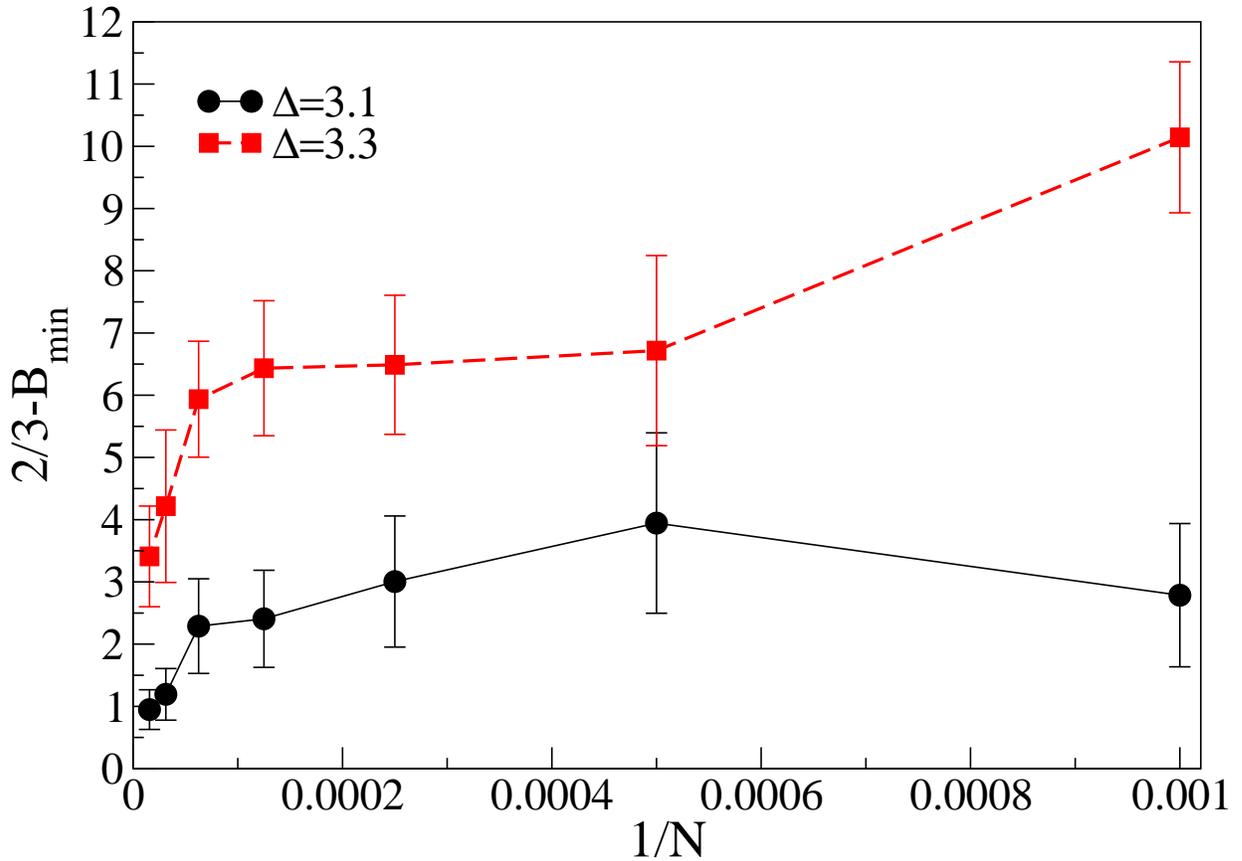


Figura 21 – Gráfico de $2/3 - B_{min}$ em K_c em função do logaritmo de $1/N$ para diversos tamanhos de redes e com valores de $\Delta=3.1$ e 3.3 .

A temperatura de transição de primeira ordem pode ser obtida a partir de uma relação de escala semelhante a que é dada na equação (5.2) para o inverso da temperatura na seguinte forma

$$T_1(L) = T_1 + a'L^{-2} [1 + b'L^{-2}], \quad (5.3)$$

onde $T_1(L)$ é a pseudo temperatura de transição para o tamanho da rede L , T_1 é a temperatura de transição de primeira ordem no limite termodinâmico e a' e b' são constantes. O expoente 2 no argumento do tamanho da rede vem da dimensão da rede, como requerido para uma transição de primeira ordem. A Figura 23 descreve os resultados correspondentes para os valores de $\Delta = 3.1$ e $\Delta = 3.3$ provenientes dos dados a partir do máximo do calor específico equação (4.5) e o máximo da suscetibilidade magnética equação (4.7). Obtemos os seguintes valores $T_1 = 0.604(4)$ para $\Delta = 3.1$ e $T_1 = 0.238(7)$ para $\Delta = 3.3$.

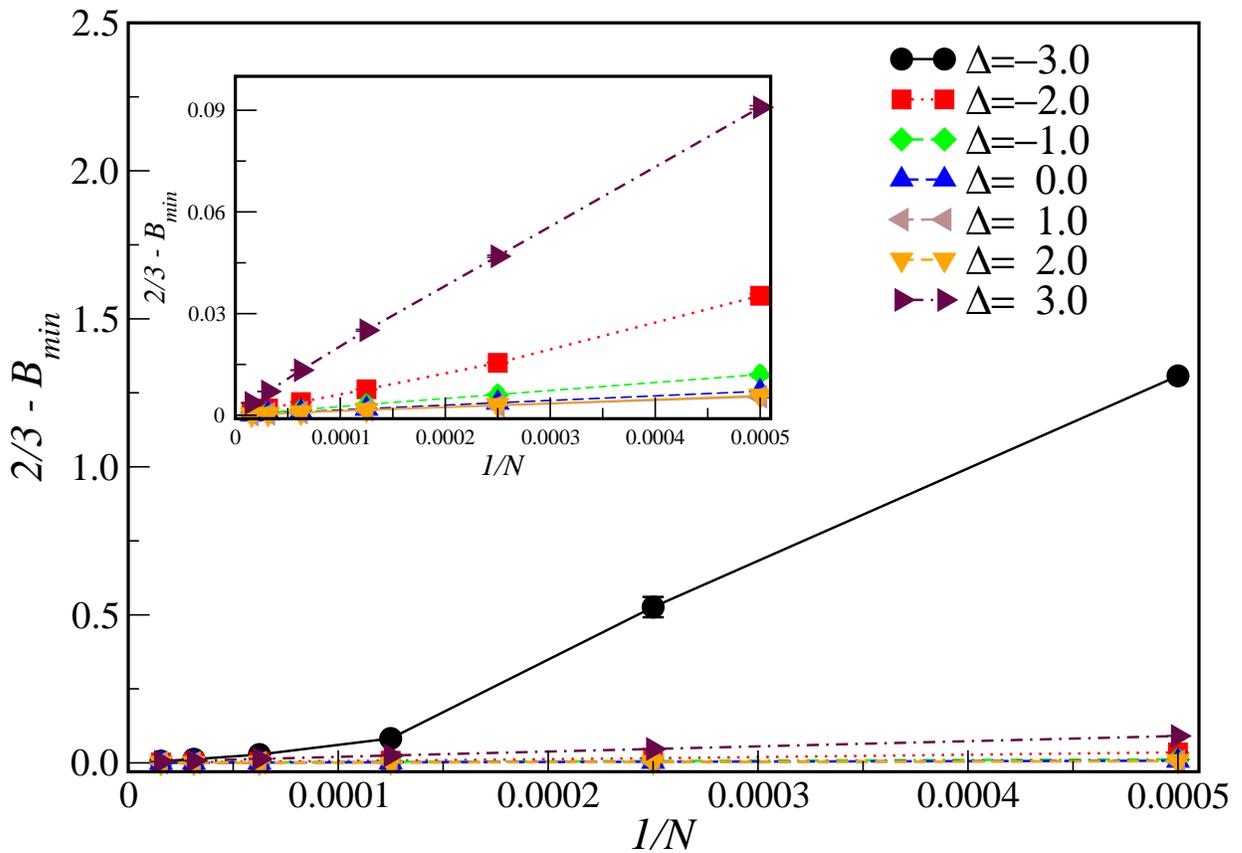


Figura 22 – Gráfico de $2/3 - B_{min}$ em K_c em função do logaritmo de $1/N$ para diversos valores de tamanhos de redes e Δ na região de transição de fase de segunda ordem

A partir dos resultados acima podemos estimar a localização do ponto tricrítico. Como para $\Delta = 3$ ainda se tem um comportamento de segunda ordem e para $\Delta = 3.1$ já acontece uma transição de primeira ordem, poderíamos dizer que o ponto tricrítico está localizado em $\Delta_t = 3.05(4)$. O diagrama de fase global, assim obtido é representado na Figura 24 com a temperatura T em função do campo de cristal Δ no plano. Não temos mais dados para maiores valores do campo de cristal e baixas temperaturas, mas as simulações para $\Delta > 3.4$ não foram capazes de fornecer quaisquer estados ordenados com magnetização não nula. Apenas uma fase ordenada com spins no estado de componente zero é alcançado o que significa que nenhuma transição ocorre nesta região quando se aumenta ainda mais a temperatura.

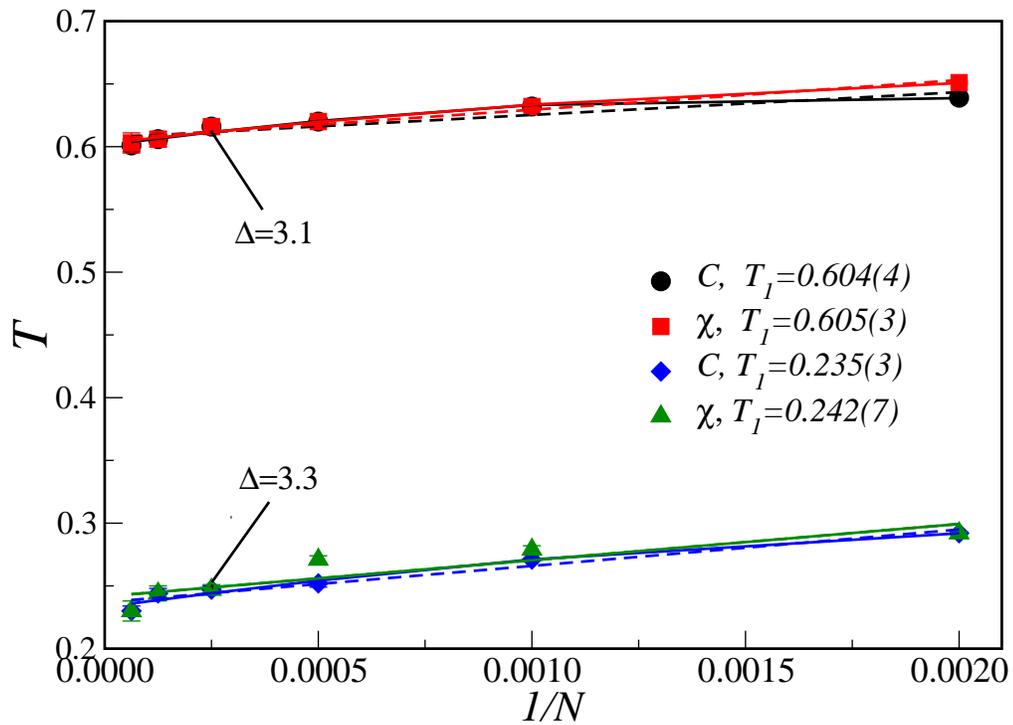


Figura 23 – Pseudo temperatura de transição $T_1(L)$ em função de L^{-2} de acordo com os máximos de calor específico e da susceptibilidade para $\Delta = 3.1$ e $\Delta = 3.3$. As linhas sólidas são os ajustes de acordo com a equação (5.3) e as linhas tracejadas ajustes linear com $b' = 0$

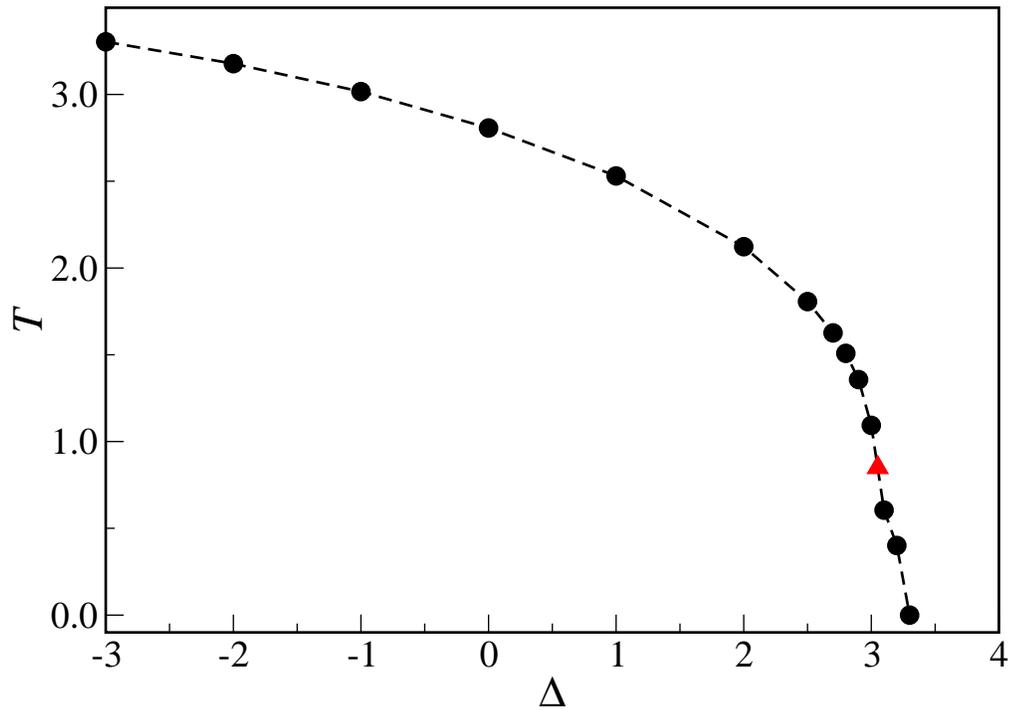


Figura 24 – Diagrama de fase na temperatura T versus o campo cristalino Δ . O triângulo representa o ponto tricrítico e as linhas tracejadas é apenas um guia para os olhos.

6 Conclusão e Perspectivas

Neste trabalho estudou-se o comportamento crítico do modelo Blume-Capel spin-1 bidimensional em redes aleatórias de Voronoi-Delaunay com desordem temperada nas conectividades por meio de simulação de Monte Carlo utilizando o algoritmo de banho térmico, a técnica do histograma e a teoria de escala de tamanho finito. A teoria de escala de tamanho finito foi usada para obter informações referentes a sistemas infinitos usando resultados que foram obtidos de sistemas finitos. Por meio do uso da técnica do histograma foi possível melhorar a precisão dos resultados das simulações e diminuir o tempo computacional. As simulações foram realizadas para muitos valores de Δ e obtemos a temperatura crítica e os expoentes críticos para cada valor de Δ com estes construí-se o diagrama de fase.

A partir dos resultados encontrados concluímos que há uma forte indicação de que o modelo de Blume-Capel spin-1 em redes aleatórias de Voronoi-Delaunay em duas dimensões apresenta dois regimes diferentes de comportamento crítico que dependem do campo de cristal Δ . Para valores do campo de cristal $\Delta \leq 3$ temos uma transição de fase de segunda ordem com relação dos expoentes pertencente à mesma classe de universalidade como a rede regular, ou seja, a classe de universalidade do modelo de Ising bidimensional. Já para valores de $3.1 \leq \Delta < 3.4$ os resultados mostram que ocorre uma transição de fase de primeira ordem. E para valores de $\Delta \geq 3.4$ o sistema está sempre desordenado no sentido de que nenhuma magnetização líquida é obtida. Obtemos o ponto tricrítico em $\Delta_t = 3.05(4)$ e $T_t = 0.85(5)$.

Para trabalho futuro pretende-se utilizar o procedimento de campo misto ao longo da linha de transição de primeira ordem [97] para determinar melhor o ponto tricrítico, bem como a linha de transição de primeira ordem. No entanto, o comportamento geral acima discutido está, de fato de acordo com que é esperado tendo em conta os resultados do modelo de Blume-Capel na rede quadrada. Para a presente rede obtemos um ponto tricrítico, e a linha de transição de primeira ordem correspondente vai a zero em $\Delta \sim 3.4$.

Como a presente rede aleatória não vem de qualquer tipo de topologia Bravais pura não podemos fazer qualquer comparação mais detalhada da presente localização do ponto tricrítico com qualquer outro em redes semelhantes. Um caso, no entanto, possivelmente de interesse como uma questão de comparação. A rede triangular regular é o mais próximo do atual, porque os vizinhos mais próximos são exatamente 6, e apresentar um ponto tricrítico em $\Delta_t = 2.925(8)$ e

$T_t = 1.025(10)$ [81].

Para trabalho futuro pretende-se fazer o estudo do modelo Blume-Capel Spin-3/2 em redes aleatórias de Voronoi-Delaunay através de simulação de Monte utilizando o algoritmo Wang-Landau.

Referências

- 1 YEOMANS, J. M. *Statistical Mechanics of Phase Transitions*. [S.l.]: Oxford University Press, 1992.
- 2 SALINAS, S. R. A. *Introduction to Statistical Physics*. [S.l.]: Springer-Verlag, New York, 2001.
- 3 STANLEY, H. E. *Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena*. [S.l.]: Clarendon Press, 1971.
- 4 FERNANDES, F. P.; LIMA, F. W. S.; PLASCAK, J. A. Blume–capel model on directed and undirected small-world voronoi–delaunay random lattices. *Computer Physics Communications*, v. 181, p. 1218–1223, 2010.
- 5 FERRENBERG, A. M.; LANDAU, D. P. Critical behavior of the three-dimensional ising model: A high-resolution monte carlo study. *Phys. Rev. B*, v. 44, p. 5081, 1991.
- 6 FERRENBERG, A. M.; SWENDSEN, R. H. New monte carlo technique for studying phase transitions. *Phys. Rev. Lett.*, v. 61, p. 2635, 1988.
- 7 LANDAU, D. P.; BINDER, K. *A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics*. Third edition. [S.l.]: Cambridge University Press, 2009.
- 8 BELANGER, D. P. *Braz. J. Phys.*, v. 30, p. 682, 2000.
- 9 HARRIS, A. B. Effect of random defects on the critical behaviour of ising models. *J. Phys. C*, v. 7, p. 1671, 1974.
- 10 IMRY, Y.; WORTIS, M. Influence of quenched impurities on first-order phase transitions. *Phys. Rev. B*, v. 19, p. 3580, 1979.
- 11 UZUNOV, D. I. *Introduction to the Theory of Critical Phenomena: Mean field, fluctuations and renormalization*. [S.l.]: World Scientific, 1992.
- 12 ZINN-JUSTIN, J. *Phase Transitions and Renormalization Group*. [S.l.]: Oxford University Press, Inc., 2007.
- 13 WAALS, J. D. V. der. *Sobre a Continuidade do Estado Líquido e Gasoso*. Tese (Doutorado) — Universidade de Leiden, 1873.
- 14 FISHER, M. E. *in Critical Phenomena*. [S.l.]: Academic Press, London), 1971.
- 15 PRIVMAN, V. *Finite Size Scaling and Numerical Simulation of Statistical Systems*. [S.l.]: World Scientific, Singapore, 1990.
- 16 LANDAU, D. P. Computer simulation studies of critical phenomena. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, v. 205, n. 1–3, p. 41 – 64, 1994.
- 17 BINDER, K. Finite size scaling analysis of ising model block distribution functions. *Z. Phys. B*, v. 43, p. 119, 1981.

- 18 SALAS, J.; SOKAL, A. D. Universal amplitude ratios in the critical two-dimensional ising model on a torus. *J. Stat. Phys.*, v. 98, p. 551, 2000.
- 19 METROPOLIS, N.; ULAM, S. *J. Am. Stat. Assoc.*, v. 44, p. 335–341, 1949.
- 20 NEWMAN, M. E. J.; BARKEMA, G. T. *Monte Carlo Methods in Statistical Physics*. [S.l.]: Oxford University Press Inc., 1999.
- 21 BINDER, K.; HEERMANN, D. W. *Monte Carlo Simulation in Statistical Physics*. [S.l.]: Springer-Verlag, Heidelberg, 2010.
- 22 BLUME, M. *Phys. Rev.*, v. 141, p. 517, 1966.
- 23 CAPEL, H. W. On the possibility of first-order phase transitions in ising systems of triplet ions with zero-field splitting. *Physica A*, v. 32, p. 966, 1966.
- 24 SAUL, D. M.; WORTIS, M.; STAUFFER, D. Tricritical behavior of the blume-capel model. *Phys. Rev. B*, v. 9, p. 4964–4980, 1974.
- 25 BEALE, P. D. *Phys. Rev. B*, v. 33, p. 1717, 1986.
- 26 XAVIER, J. C. et al. *Phys. Rev. B*, v. 57, p. 11575, 1998.
- 27 BERKER, A. N.; WORTIS, M. Blume-emery-griffiths-potts model in two dimensions: Phase diagram and critical properties from a position-space renormalization group. *Phys. Rev. B*, v. 14, p. 4946–4963, 1976.
- 28 JAIN, A. K.; LANDAU, D. P. *Phys Rev B*, v. 22, p. 445, 1980.
- 29 SELKE, W.; YEOMANS, J. J. *Phys. A*, v. 16, p. 2789, 1983.
- 30 WILDING, N. B.; NIELABA, P. *Phys Rev E*, v. 53, p. 926, 1996.
- 31 DESERNO. *Phys Rev E*, v. 56, p. 5204, 1997.
- 32 SILVA, C. J.; CAPARICA, A. A.; PLASCAK, J. A. Wang-landau monte carlo simulation of the blume-capel model. *Phys. Rev. E*, v. 73, p. 036702, 2006.
- 33 MALAKIS, A. et al. Strong violation of critical phenomena universality: Wang-landau study of the two-dimensional blume-capel model under bond randomness. *Phys. Rev. E*, v. 79, p. 011125, 2009.
- 34 BLUME, M.; EMERY, V. J.; GRIFFITHS, R. B. *Phys. Rev. A*, v. 4, p. 1071, 1971.
- 35 LAJZEROWICZ, J.; SIVARDIERE, J. *Phys. Rev. A*, v. 11, p. 2079, 1975.
- 36 NEWMAN, K. E.; DOW, J. D. *Phys. Rev. B*, v. 27, p. 7495, 1983.
- 37 CREUTZ, M. *Phys. Rev. D*, v. 21, p. 2308, 1980.
- 38 OKABE BARRY BOOTS, K. S. A.; CHIU, S. N. *Spatial Tessallations: Concepts and Applications of Voronoi Diagrams*. [S.l.]: Englad: JOHN WILEY & SONS, LTDA, 1995.

- 39 FRIEDBERG; REN, H. C. *Nucl. Phys. B*, v. 235, p. 310, 1984.
- 40 FERRENBURG, A. M.; SWENDSEN, R. H. New monte carlo technique for studying phase transitions. *Phys. Rev. Lett.*, v. 61, p. 2635, 1988.
- 41 STINCHCOMBE, R. B. *Phase Transitions and Critical Phenomena*. [S.l.]: Academic, New York, 1983.
- 42 BINDER, K.; LANDAU, D. P. *A Guide to Monte Carlo Simulations Physics*. [S.l.]: Cambridge University Press, 2009.
- 43 JANKE, W.; WEIGEL, M. Harris-luck criterion for random lattices. *Phys. Rev. B*, v. 69, p. 144208, 2004.
- 44 DOTSENKO, V. S.; DOTSENKO, V. S. Phase transition in the 2d ising model with impurity bonds. *Sov. Phys. JEPT Lett.*, v. 33, p. 37, 1981.
- 45 RODER, J. A. A.; JANKE, W. High-temperature series analysis of 2d random-bond ising ferromagnets. *Phys. Rev. Lett.*, v. 80, p. 4697, 1998.
- 46 REIS, F. D. A. A.; QUEIROZ, S. L. A.; SANTOS, R. R. Universality and logarithmic corrections in two-dimensional random ising ferromagnets. *Phys. Rev. B*, v. 56, p. 6013, 1997.
- 47 BALLESTEROS, H. G. et al. Critical exponents of the three-dimensional diluted ising model. *Phys. Rev. B*, v. 58, p. 2740, 1998.
- 48 SELKE, W.; SHCHUR, L. N.; VASILYEV, O. Specific heat of two-dimensional diluted magnets. *Physica A*, v. 259, p. 388, 1998.
- 49 MAZZEO, G.; KÜHN, R. Critical behavior of the two-dimensional spin-diluted ising model via the equilibrium ensemble approach. *Phys. Rev. E*, v. 60, p. 3823, 1999.
- 50 MARTINS, P. H. L.; PLASCAK, J. A. Probability distribution of the order parameter. *Braz. J. Phys.*, v. 34, p. 433, 2004.
- 51 MARTINS, P. H. L.; PLASCAK, J. A. Universality class of the two-dimensional site-diluted ising model. *Phys. Rev. E*, v. 76, p. 012102, 2007.
- 52 HASENBUSCH, M. et al. Universal dependence on disorder of two-dimensional randomly diluted and random-bond $\pm j$ ising models. *Phys. Rev. E*, v. 78, p. 011110, 2008.
- 53 BARGHATHI, H.; VOJTA, T. Phase transitions on random lattices: How random is topological disorder? *Phys. Rev. Lett.*, v. 113, p. 120602, 2014.
- 54 AIZENMAN, M.; WEHR, J. Rounding of first-order phase transitions in systems with quenched disorder. *Phys. Rev. Lett.*, v. 62, p. 2503, 1989.
- 55 HUI, K.; BERKER, A. N. Random-field mechanism in random-bond multicritical systems. *Phys. Rev. Lett.*, v. 62, p. 2507, 1989.
- 56 FERNANDEZ, L. A. et al. Numerical test of the cardy-jacobsen conjecture in the site-diluted potts model in three dimensions. *Phys. Rev. B*, v. 86, p. 184428, 2012.

- 57 BERKER, A. N. Critical behavior induced by quenched disorder. *Physica A*, v. 194, p. 72, 1993.
- 58 FALICOV, A.; BERKER, A. N. Tricritical and critical end-point phenomena under random bonds. *Phys. Rev. Lett.*, v. 76, p. 4380, 1996.
- 59 CARDY, J.; JACOBSEN, J. L. Critical behavior of random-bond potts models. *Phys. Rev. Lett.*, v. 79, p. 4063, 1997.
- 60 CHATELAIN, C.; BERCHE, B. Finite-size scaling study of the surface and bulk critical behavior in the random-bond eight-state potts model. *Phys. Rev. Lett.*, v. 80, p. 1670, 1998.
- 61 GREENBLATT, R. L.; AIZENMAN, M.; LEBOWITZ, J. L. Rounding of first order transitions in low-dimensional quantum systems with quenched disorder. *Phys. Rev. Lett.*, v. 103, p. 197201, 2009.
- 62 PICCO, M. Numerical results for the two-dimensional random-bond three-state potts model. *Phys. Rev. B*, v. 54, p. 14930, 1996.
- 63 PICCO, M. Weak randomness for large q-state potts models in two dimensions. *Phys. Rev. Lett.*, v. 79, p. 2998, 1997.
- 64 LEWIS, M. A. Higher moments of spin-spin correlation functions for the ferromagnetic random bond potts model. *Europhys. Lett.*, v. 43, p. 189, 1998.
- 65 LEWIS, M. A. Higher moments of spin-spin correlation functions for the ferromagnetic random bond potts model. *Europhys. Lett.*, v. 47, p. 129, 1999.
- 66 OLSON, T.; YOUNG, A. P. Monte carlo study of the critical behavior of random bond potts models. *Phys. Rev. B*, v. 60, p. 3428, 1999.
- 67 V., R. P.; VALBUENA, J. Effects of quenched disorder in the two-dimensional potts model: A monte carlo study. *Phys. Rev. E*, v. 59, p. 6275, 1999.
- 68 CHATELAIN, C.; BERCHE, B. Universality and multifractal behaviour of spin-spin correlation functions in disordered potts models. *Nucl. Phys. B*, v. 572, p. 626, 2000.
- 69 CHATELAIN, C.; BERCHE, B.; SHCHUR, L. N. Quenched bond dilution in two-dimensional potts models. *J. Phys. A*, v. 34, p. 9593, 2001.
- 70 BLUME, M. Theory of the first-order magnetic phase change in UO_2 . *Phys. Rev.*, American Physical Society, v. 141, p. 517, 1966.
- 71 SELKE, W.; OITMAA, J. Monte carlo study of mixed-spin $s = (1/2, 1)$ ising ferrimagnets. *J. Phys.: Cond. Matt.*, v. 22, p. 076004, 2010.
- 72 LAWRIE, I. D.; SARBACH, S. *Phase Transitions Critical Phenomena*. [S.l.]: edited by C. Domb and J. L. Lebowitz Academic London, 1984.
- 73 MALAKIS, A. et al. Multicritical points and crossover mediating the strong violation of universality: Wang-landau determinations in the random-bond $d = 2$ blume-capel model. *Phys. Rev. E*, v. 81, p. 041113, 2010.

- 74 THEODORAKIS, P. E.; FYTAS, N. G. Monte carlo study of the triangular blume-capel model under bond randomness. *Phys. Rev. E*, v. 86, p. 011140, 2012.
- 75 LIMA J. E. MOREIRA, J. S. A. J. F. W. S.; COSTA, U. M. S. The ferromagnetic ising model on a voronoi–delaunay lattice. *Phys. A*, v. 283, p. 100, 2000.
- 76 JANKE, M. K. W.; VILLANOVA, R. Ising model universality for two-dimensional lattices. *Phys. Lett. B*, v. 315, p. 412, 1993.
- 77 BARABÁSI, A.-L.; ALBERT, R. Emergence of scaling in random networks. *Science*, v. 286, p. 509, 1999.
- 78 ALBERT, R.; BARABÁSI, A.-L. Statistical mechanics of complex networks. *Rev. Mod. Phys.*, v. 74, p. 47, 2002.
- 79 BARABÁSI, A.-L. Scale-free networks: A decade and beyond. *Science*, v. 325, p. 412, 2009.
- 80 LIMA, F. W. S.; PLASCAK, J. A. Magnetic models on various topologies. *Journal of Physics: Conference Series*, v. 487, p. 012011, 2014.
- 81 FYTAS, N. Wang-landau study of the triangular blume-capel ferromagnet. *Eur. Phys. J. B*, v. 79, p. 21, 2011.
- 82 CHRIST R. FRIEDBERG, T. L. N. *Nucl. Phys. B*, v. 202, p. 89, 1982.
- 83 CHRIST R. FRIEDBERG, T. L. N. *Nucl. Phys. B*, v. 210, p. 310 – 336, 1982.
- 84 L'ECUYER, P. Efficient and portable combined random number generators. *Commun. ACM*, v. 31, p. 742, 1988.
- 85 CHALLA, M. S. S.; LANDAU, D. P.; BINDER, K. Finite-size effects at temperature-driven first-order transitions. *Phys. Rev. B*, v. 34, p. 1841, 1986.
- 86 JANKE, W. Accurate first-order transition points from finite-size data without power-law corrections. *Phys. Rev. B*, v. 47, p. 14757, 1993.
- 87 BINDER, K.; HEERMANN, D. W. *Monte Carlo Simulation in Statistical Physics*. [S.l.]: Springer-Verlag Berlin, 1988.
- 88 MALAKIS, A.; FYTAS, N. G.; GÜLPINAR, G. Critical binder cumulant and universality: Fortuin-kasteleyn clusters and order-parameter fluctuations. *Phys. Rev. E*, v. 89, p. 042103, 2014.
- 89 JANKE, W.; VILLANOVA, R. Two-dimensional eight-state potts model on random lattices: A monte carlo study. *Phys. Lett. A*, v. 209, p. 179, 1995.
- 90 BERCHE, P. E.; CHATELAIN, C.; BERCHE, B. Aperiodicity-induced second-order phase transition in the 8-state potts model. *Phys. Rev. Lett.*, v. 80, p. 297, 1998.
- 91 BORGS, C.; KOTEEKÝ, R. A rigorous theory of finite-size scaling at first-order phase transitions. *Journal of Statistical Physics*, v. 61, p. 79, 1990.

- 92 BORGES, R. K. C.; MIRACLE-SOLÉ, S. Finite-size scaling for potts models. *Journal of Statistical Physics*, v. 62, p. 529, 1991.
- 93 LANDAU, D. Computer simulation studies of critical phenomena. *Physica A*, v. 205, p. 41, 1994.
- 94 FERDINAND, A. E.; FISHER, M. E. Bounded and inhomogeneous ising models. i. specific-heat anomaly of a finite lattice. *Phys. Rev.*, v. 185, p. 832, 1969.
- 95 HASENBUSCH, M. et al. Critical behavior of the three-dimensional $\pm j$ ising model at the paramagnetic-ferromagnetic transition line. *Phys. Rev. B*, v. 76, p. 094402, 2007.
- 96 SALAS, J.; SOKAL, A. D. Universal amplitude ratios in the critical two-dimensional ising model on a torus. *Journal of Statistical Physics*, v. 98, p. 551, 2000.
- 97 MARTINS, P. H. L.; PLASCAK, J. Probability distribution function of the order parameter: Mixing fields and universality. *Computer Physics Communications*, v. 184, p. 259, 2013.