



UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA
CENTRO DE CIÊNCIAS FÍSICAS E MATEMÁTICAS
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

Leonardo Garibaldi Rigon

FASE NEMÁTICA NO MODELO J1-J2

Florianópolis
2020

Leonardo Garibaldi Rigon

FASE NEMÁTICA NO MODELO J1-J2

Dissertação submetida ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal de Santa Catarina para a obtenção do título de Mestre em Física.

Orientador: Prof. Lucas Nicolao, Dr.

Florianópolis
2020

Ficha de identificação da obra elaborada pelo autor,
através do Programa de Geração Automática da Biblioteca Universitária da UFSC.

Rigon, Leonardo Garibaldi
Fase nemática no modelo J1-J2 / Leonardo Garibaldi
Rigon ; orientador, Lucas Nicolao, 2020.
69 p.

Dissertação (mestrado) - Universidade Federal de Santa
Catarina, Centro de Ciências Físicas e Matemáticas,
Programa de Pós-Graduação em Física, Florianópolis, 2020.

Inclui referências.

1. Física. 2. Fase nemática. 3. Modelo J1-J2. 4. Monte
Carlo. 5. Transição de fase. I. Nicolao, Lucas. II.
Universidade Federal de Santa Catarina. Programa de Pós
Graduação em Física. III. Título.

Leonardo Garibaldi Rigon

FASE NEMÁTICA NO MODELO J1-J2

O presente trabalho em nível de mestrado foi avaliado e aprovado por banca examinadora composta pelos seguintes membros:

Prof. Daniel Adrián Stariolo, Dr.
Universidade Federal Fluminense

Prof. Alejandro Mendoza-Coto, Dr.
Universidade Federal de Santa Catarina

Certificamos que esta é a **versão original e final** do trabalho de conclusão que foi julgado adequado para obtenção do título de Mestre em Física.

Prof. Ivan Helmuth Bechtold, Dr.
Coordenador do Programa

Prof. Lucas Nicolao, Dr.
Orientador

Florianópolis, 19 de Fevereiro de 2020.

Dedico este trabalho à todos que o lerem

AGRADECIMENTOS

Agradeço ao meu orientador, professor Lucas, pelos ensinamentos profissionais e pessoais, pela atenção e esforços dedicados a mim e a este projeto. Aos meus pais, Henrique e Rosilene, por todo o amor e atenção; aos meus irmãos, Vinícius e Fernanda, pelo companheirismo nestes dois últimos anos. Aos meus amigos da física, Matheus_M, Matheus_G, Eduardo e Rômulo, por todo apoio matemático e pessoal, por serem um respiro das dificuldades acadêmicas no meu dia-a-dia. Ao professor Alejandro, pelo seu entusiasmo em física e por ser um exemplo de pesquisador. Aos meus amigos Luis, Thiago, Mateus, Gilberto e João, que foram, e são, partes importantes da estrela família IA10 que me guia nos momentos difíceis.

O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES).

“어디든 가치가 있는 곳으로 가려면 지름길은 없다.”
“*Não há atalhos para qualquer lugar que valha a pena.*”
Provérbio coreano

RESUMO

Neste projeto, estudamos através de simulações de Monte Carlo o modelo J1-J2 numa rede quadrada bidimensional com variáveis de Ising na presença de campo magnético externo. Neste modelo, a interação entre primeiros vizinhos (J1) favorece o alinhamento ferromagnético dos spins, enquanto os segundos vizinhos (J2) favorecem estados anti-alinhados. A frustração proveniente destas interações competitivas permite a formação de padrões modulares, como a fase de faixas (superferromagnética), com ambas ordens translacional e orientacional, e a fase nemática, com ordem orientacional apenas. Utilizando métodos como *Parallel Tempering* e *Multispin Coding* na implementação do algoritmo de Metrópolis, aumentamos em até de 3.4 vezes a velocidade de nossas simulações e investigamos a fase nemática e suas transições de fase para $k = |J2|/J1 = 1.0$. O diagrama campo-temperatura foi obtido para este caso. A natureza das fases foi investigada, assim como as transições de fase entre elas. As fases de faixas e paramagnética possuem ordem de longo e curto alcance, respectivamente. A fase nemática possui ordem de longo alcance e domínios anisotrópicos, maiores na direção das faixas. A transição faixas-nemática apresenta várias características de uma transição descontínua, porém como este modelo é conhecido por apresentar comportamentos de pseudo-transição de primeira ordem não foi possível determinar com certeza a natureza desta transição. Já a transição nemática-paramagnética foi estabelecida como contínua com expoentes críticos estimados $\nu = 1.07 \pm 0.06$ e $\gamma/\nu = 1.67 \pm 0.03$, obtidos através da análise de escalonamento finito e muito próximos dos expoentes da criticalidade de Ising.

Palavras-chaves: Modelo J1-J2. Interações competitivas. Fase nemática. Transição de fase. Simulações de Monte Carlo.

ABSTRACT

In this project, we studied through Monte Carlo simulations the J1-J2 square-lattice Ising model in the presence of external magnetic fields. In this model, the interaction between first neighbors (J_1) favors the ferromagnetic alignment of the spins, while the second neighbors (J_2) favor anti-aligned states. The frustration arising from these competitive interactions allows the formation of modular patterns, such as the stripes (superferromagnetic) phase, with both translational and orientational order, and nematic phase, with only orientational order. Using methods such as the Parallel Tempering and Multispin Coding in the implementation of the Metropolis algorithm, we increased the speed of our simulations by up to 3.4 times and investigated the nematic phase and its phase transitions for $k = |J_2|/J_1 = 1.0$. The field-temperature diagram was obtained for this case. The nature of the phases was investigated, as well as the phase transitions between them. The stripes and paramagnetic phases possess long and short range order, respectively. The nematic phase has long range order and anisotropic domains, larger in the direction of the stripes. The stripes-nematic transition has several characteristics of a discontinuous transition, however, as this model is known for presenting first-order pseudo-transition behaviors, it was not possible to determine with certainty the nature of this transition. The nematic-paramagnetic transition was established as continuous with critical exponents estimated as $\nu = 1.07 \pm 0.06$ and $\gamma/\nu = 1.67 \pm 0.03$, obtained through finite size scaling analysis and very close to the exponents of Ising's criticality.

Key-words: J1-J2 Model. Competitive interactions. Nematic phase. Phase transitions. Monte Carlo simulations.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – Diagrama de fases do modelo J1-J2 a campo externo nulo obtido através do método de campo médio variacional da matriz densidade.	17
Figura 2 – Diagrama de fases do modelo J1-J2 para $k= J_2 /J_1=1$ obtido através do método de campo médio variacional da matriz densidade.	18
Figura 3 – Diagrama de fases do modelo J1-J2 em uma rede quadrada obtido através da teoria de campo médio em aglomerados de tamanho 2×2 (linha superior) e 4×4 pontos (linha inferior). As linhas tracejadas representam transições contínuas e as linhas contínuas transições de primeira ordem. Fonte: Jin et. al.	20
Figura 4 – Diagrama de fases do modelo J1-J2 em um campo magnético para $k=1$. As linhas sólidas correspondem a transições de segunda ordem e as tracejadas a transições de primeira ordem. Fonte: Duymovic[12]	21
Figura 5 – Distribuição de temperaturas para o modelo J1-J2 com $L=64$, $h=1.90$ e $k= J_2 /J_1=1.0$. As temperaturas se concentram próximas à temperatura crítica.	29
Figura 6 – Comparação entre os algoritmos com e sem a implementação do <i>Parallel Tempering</i> . Simulações realizadas para $L = 32$, $h = 1.93$ e $T = 0.7$. Temperaturas de equilíbrio individuais podem ser vistas na Tabela 2. . .	34
Figura 7 – Parâmetros de ordem vs temperatura para $k=1.0$, $B=1.97$ e $L=512$. Fase nemática encontra-se em $0.7 \lesssim T \lesssim 0.75$	37
Figura 8 – Susceptibilidades em função da temperatura reduzida para 3 diferentes tamanhos lineares de rede com $B=1.97$ e $k=1.0$. Observa-se a tendência ao comportamento não-analítico com o aumento de L	38
Figura 9 – Cumulantes de Binder em função da temperatura reduzida para 3 diferentes tamanhos lineares de rede com $B=1.97$ e $k=1.0$	39
Figura 10 – Comportamentos típicos de uma transição contínua. Cumulante de Binder com comportamento monotônico e ausência de múltiplos picos na distribuição do parâmetro de ordem. Figuras obtidas com $h=1.97$. . .	42
Figura 11 – Comportamentos típicos de uma transição descontínua. Cumulante de Binder com valores negativos e presença de coexistência de dois estados na distribuição do parâmetro de ordem para $T=0.702$. Figuras obtidas com $h=1.97$	43
Figura 12 – Calor específico versus temperatura para diferentes redes $L \times L$ num campo externo $h=1.97$. Observa-se a estrutura de duplo pico para $L > 256$. . .	43
Figura 13 – Susceptibilidades em função da temperatura para diferentes tamanhos lineares de rede com $h=1.97$ e $k=1.0$. Observa-se a tendência ao comportamento não-analítico com o aumento de L	44

Figura 14 – Diagrama de fases para o caso $k = J_2 /J_1 = 1.0$. Temperaturas de transição obtidas a partir do pico das susceptibilidades para $L=256$. . .	45
Figura 15 – Parâmetros de ordem em função da temperatura reduzida para 4 diferentes tamanhos lineares de rede com $B=2.0$ e $k=1.0$. (a) Observa-se a tendência à ausência de ordem posicional com o aumento de L . (b) Ordem orientacional é preservada a temperaturas abaixo de $T < T_c$ 0.52.	45
Figura 16 – Parâmetros de ordem em função da temperatura reduzida para 4 diferentes tamanhos lineares de rede com $B=2.002$ e $k=1.0$. Observa-se a tendência à total ausência de ordem com o aumento de L	46
Figura 17 – Decaimento da função de correlação spin-spin para $L=512$, $h=1.97$, $T=0.774194$	47
Figura 18 – Função de correlação orientacional. Decaimento exponencial com dois regimes distintos. As duas retas mostram o melhor fit exponencial para cada um dos casos.	48
Figura 19 – Decaimento das funções de correlação para $L=512$, $h=1.97$, $T=0.651584$.	48
Figura 20 – Decaimento das funções de correlação conectada para $L=512$, $h=1.97$, $T=0.651584$. As retas mostram o melhor fit para cada um dos casos. .	49
Figura 21 – Decaimento das funções de correlação para $L=512$, $h=1.97$, $T=0.727273$ nas direções paralela e perpendicular as faixas.	49
Figura 22 – Decaimento das funções de correlação spin-spin conectada para $L=512$, $h=1.97$, $T=0.727273$ nas direções paralela e perpendicular as faixas. . .	50
Figura 23 – Decaimento das funções de correlação orientacional conectada para $L=512$, $h=1.97$, $T=0.727273$ nas direções paralela e perpendicular as faixas.	50
Figura 24 – Susceptibilidade posicional para diferentes sistemas $L \times L$ num campo externo $h=1.97$	51
Figura 25 – Escalonamento de quantidades relacionadas com a susceptibilidade posicional. Dados obtidos a partir da Figura 24.	52
Figura 26 – Susceptibilidade orientacional para diferentes sistemas $L \times L$ num campo externo $h=1.97$	52
Figura 27 – Escalonamento de quantidades relacionadas com a susceptibilidade orientacional. Dados obtidos a partir da Figura 26.	53
Figura 28 – Colapso das susceptibilidades (orientacional) de tamanhos diferentes. Os dados foram reescalados usando os valores dos expoentes encontrados na análise de escalonamento finito e $T_c = 0.7399$	53
Figura 29 – Comprimento de correlação em função da temperatura para $h=1.97$. Os diferentes tamanhos de sistema se cruzam em $T_c = 0.740$	55
Figura 30 – Quociente do comprimento de correlação para $h=1.97$. As curvas representam a função de escala F_ξ para os diferentes tamanhos de sistema. .	55

Figura 31 – Método do quociente utilizando o comprimento de correlação. Da Figura (a) extraímos o expoente γ e de (b) obtemos ν	56
Figura 32 – Quociente do comprimento de correlação para $h=1.97$. As curvas representam a função de escala F_ξ para os diferentes tamanhos de sistema.	56
Figura 33 – Método do quociente utilizando o comprimento de correlação. Da Figura (a) extraímos o expoente γ e de (b) obtemos ν	57
Figura 34 – Subredes de diferentes magnetizações na fase de faixas	65

SUMÁRIO

	Lista de figuras	9
1	INTRODUÇÃO	14
2	MODELO J1-J2	16
2.1	Aproximação de campo médio	16
2.2	Campo externo nulo e universalidade	18
2.3	Campo externo aplicado	20
3	MÉTODOS COMPUTACIONAIS	23
3.1	Simulações de Monte Carlo	23
3.1.1	Algoritmo de Metrópolis	24
3.2	Parallel Tempering	25
3.2.1	Parallel tempering nas simulações de Monte Carlo	27
3.2.2	Determinando o conjunto de temperaturas	27
3.3	Multispin Coding	29
3.3.1	Algoritmo de Metrópolis: Ising 2D	30
3.3.2	Algoritmo de Metrópolis: J1-J2	31
3.3.2.1	Exemplo prático, $k = -1$	32
3.4	Comparação	33
4	RESULTADOS	36
4.1	Análise de escalonamento finito e expoentes críticos	39
4.1.1	A hipótese do escalonamento de tamanho finito	40
4.2	Natureza das transições de fase	41
4.3	Diagrama de fases	43
4.3.1	Ausência de reentrância	44
4.4	Função de correlação	46
4.4.1	Fase paramagnética saturada	47
4.4.2	Fase de faixas	48
4.4.3	Fase nemática	49
4.5	Expoentes críticos	50
4.5.1	Análise de escalonamento finito	51
4.5.1.1	Máximo da susceptibilidade	51
4.5.1.2	Método do quociente	54
5	CONCLUSÃO	58

	REFERÊNCIAS	60
	APÊNDICE A – FUNCIONAIS DE CAMPO MÉDIO	64
A.1	Campo médio variacional do modelo J1-J2	64
A.1.1	Fase ferromagnética	65
A.1.2	Fase de faixas	65
A.1.3	Fase paramagnética	66
	APÊNDICE B – EXPRESSÕES LÓGICAS	67

1 INTRODUÇÃO

Interações ferromagnéticas e antiferromagnéticas conflitantes estão presentes em vários sistemas da matéria condensada, como vidros de spin e filmes magnéticos ultrafinos. Modelos de Ising com interações competitivas entre primeiros (J_1) e segundos (J_2) vizinhos podem servir como modelos canônicos no estudo de efeitos provenientes da presença de frustração nesta classe de sistemas magnéticos. Estas interações frustradas enriquecem o diagrama de fases dos modelos e os tornam mais interessantes, porém mais desafiadores, de serem estudados.

O modelo J_1 - J_2 com spins de Ising, por exemplo, mesmo sendo o mais simples destes modelos já demonstra uma gama de fenômenos interessantes, como formação de padrões modulares e comportamento crítico com universalidade fraca. Por não possuir solução exata, o estudo deste modelo já foi abordado por diversos métodos diferentes, como grupo de renormalização [1], séries de alta temperatura [2], teorias de campo médio [3–5] e simulações de Monte Carlo [6–12].

Pouco tempo atrás, o modelo na rede quadrada voltou a receber a atenção de diversos pesquisadores. No caso sem campos externos, esse interesse deu-se devido aos resultados controversos [3, 10] ligados ao diagrama de fases e a natureza de suas transições [4]. Já na presença de campos magnéticos, resultados teóricos recentes [11, 12] obtidos através do Método Variacional de Aglomerados apontaram para um novo tipo de ordem. A nova fase descoberta, chamada de nemática em analogia a fase de mesmo nome em cristais líquidos, apresenta ordem orientacional com ausência de ordem posicional e abriu uma nova oportunidade para estudar este modelo.

A fase nemática é uma fase intermediária, encontrada entre as conhecidas fases de faixas (superferromagnética) e paramagnética saturada quando temos um campo magnético aplicado. Detectar e estudar tais fases não é uma tarefa simples, pois a detecção de tais configurações envolvem o cálculo de correlações em diferentes direções espaciais. Assim, aproximações que não levam em conta correlações entre spins, como a aproximação de campo médio, falham em detectar a fase nemática.

Por isso, neste trabalho iremos abordar o estudo da fase nemática através de simulações de Monte Carlo, de forma a considerar todas as correlações possíveis para esse modelo. Isto nos permitirá obter resultados quantitativos mais precisos e que refletem melhor o comportamento real do sistema. Porém, como o método de Monte Carlo consiste em simular a evolução temporal de um sistema finito através das flutuações térmicas, dependendo do tamanho da rede e das interações presentes, teremos tempos de equilíbrio muito grandes, gerando assim a necessidade de um grande esforço computacional.

No modelo J_1 - J_2 , em especial, a presença de frustração torna o modelo desafiador de ser abordado em simulações de Monte Carlo. Sistemas em baixas temperaturas correm o risco de ficarem presos em estados metaestáveis por tempos muito longos. Isso acontece

pois muitas vezes, nesse regime de temperatura, as flutuações térmicas não permitem o sistema explorar o espaço de fases em busca do equilíbrio. Além disso, caracterizar ordem orientacional em sistemas bidimensionais pode ser uma tarefa difícil, e sistemas de tamanhos muito grandes são necessários para descobrir a verdadeira natureza das fases de baixa temperatura.

No intuito de aprofundar a discussão sobre o modelo J1-J2, o primeiro capítulo desta dissertação (Modelo J1-J2) serve como uma recapitulação do modelo e suas principais características. No caso sem campos externos, uma pequena revisão bibliográfica, desde os primeiros estudos feitos por Nightingale[1], em 1977, até os resultados mais recentes [5] será feita. Os principais trabalhos com campos aplicados são revisados em seguida, em especial o estudo de Guerrero, Stariolo e Almarza[11], que foi pioneiro no estudo da fase nemática neste modelo.

O primeiro objetivo desta pesquisa será desenvolver um algoritmo otimizado o suficiente para minimizar as dificuldades encontradas com os tempos de relaxação ao equilíbrio e possibilitar a realização das simulações. Com um código bem otimizado será possível termalizar sistemas grandes o suficientes ($L > 128$) para uma estimativa real do comportamento do modelo no limite termodinâmico. Algumas das técnicas que serão utilizadas para esse propósito serão: *Multispin Coding* [13,14], possibilitando o trabalho com operações binárias, que são computadas mais rapidamente que operações aritméticas pelo processador; e *Parallel Tempering* [15], que ajuda a contornar problemas com a termalização do sistema em baixas temperaturas. O capítulo 3 (Métodos computacionais) será dedicado a explicar em detalhes estas implementações.

Por fim, como o principal objetivo deste projeto de mestrado é estudar esta nova fase intermediária, o capítulo 4 (Resultados) é destinado a este propósito. Nele detectamos a mesma fase encontrada em resultados utilizando o Método Variacional de Aglomerados, mas numa região menor do diagrama de fases, e construímos o diagrama de fases de Monte Carlo para o caso $k = 1$ para comparar com os resultados presentes na literatura. A transição nemática paramagnética é contínua com expoentes críticos $\nu = 1.07 \pm 0.06$ e $\gamma/\nu = 1.67 \pm 0.03$, estimados via análise de escalonamento finito e muito próximos aos expoentes da criticalidade de Ising. Já a transição faixas-nemática apresenta diversas características de uma transição de primeira ordem, porém como este modelo é famoso por apresentar comportamentos de pseudo-primeira ordem e tamanhos grandes de sistema se mostram necessários para revelar o verdadeiro comportamento desta transição, não foi possível nomear esta transição.

2 MODELO J1-J2

O modelo J1-J2 é uma extensão do modelo de Ising para um ferromagneto. Nele os momentos dipolares do material magnético são tratados como pontos de uma rede - que para este trabalho será bidimensional e quadrada - e podem apenas assumir valores $+1$ ou -1 , *spin up* ou *spin down*. Spins do tipo Ising são possíveis sempre que anisotropias de superfície preferenciam orientações perpendiculares ao plano da rede.

A interação entre os spins é governada pela hamiltoniana dada pela equação (2.1), onde $\langle i, j \rangle$ indica a soma entre primeiros vizinhos e $\langle\langle i, j \rangle\rangle$ a de segundos vizinhos. Os valores das constantes de acoplamento, $J1$ e $J2$, nos dizem qual a natureza e intensidade de suas respectivas interações. Neste trabalho, estudamos o caso onde $J1 > 0$ e $J2 < 0$, de forma que primeiros vizinhos sintam interações ferromagnéticas enquanto os vizinhos das diagonais tenham estados anti-alinhados favorecidos. A interação com campos magnéticos externos é introduzida através de h .

$$H = -J1 \sum_{\langle i, j \rangle} s_i s_j - J2 \sum_{\langle\langle i, j \rangle\rangle} s_i s_j - h \sum_i s_i. \quad (2.1)$$

A presença de interações competitivas possibilita o surgimento de outras duas fases, em adição das conhecidas fases ferromagnética e paramagnética (presentes no modelo de Ising): as fases de faixas (ou superferromagnética) e nemática. A campo zero, quando a interação com segundos vizinhos é fraca ($k = |J2|/J1 < 0.5$), a configuração ferromagnética é o estado de menor energia. Já para valores de k maiores que 0.5, a competição entre as diferentes interações faz um padrão de faixas de magnetização alternada surgir como estado fundamental do sistema. O ponto $k = 0.5$ é um ponto bicrítico, onde coexistem as fases ferromagnética e de faixas.

2.1 APROXIMAÇÃO DE CAMPO MÉDIO

Sabendo as possíveis fases do modelo a campo nulo podemos aplicar algum método de campo médio para capturar qualitativamente as transições do modelo. Usando o método de campo médio variacional da matriz densidade (Apêndice A), conseguimos encontrar o funcional de energia livre do modelo J1-J2,

$$\begin{aligned} \tilde{F} = & - \sum_{\langle i, j \rangle} m_i m_j + k \sum_{\langle\langle i, j \rangle\rangle} m_i m_j - h \sum_i m_i \\ & + T \sum_i \left\{ \left(\frac{1 + m_i}{2} \right) \ln \left(\frac{1 + m_i}{2} \right) + \left(\frac{1 - m_i}{2} \right) \ln \left(\frac{1 - m_i}{2} \right) \right\}, \end{aligned} \quad (2.2)$$

que quando minimizado para m_i condizentes com cada uma das fases, nos permite construir o diagrama de fases de campo médio do modelo (Figura 1). A partir de agora a energia e campo serão medidos em unidades de $J1$; a temperatura será medida em unidades de

$J1/k_B$. A construção deste funcional e dos funcionais individuais para cada uma das fases pode ser encontrado no Apêndice A.

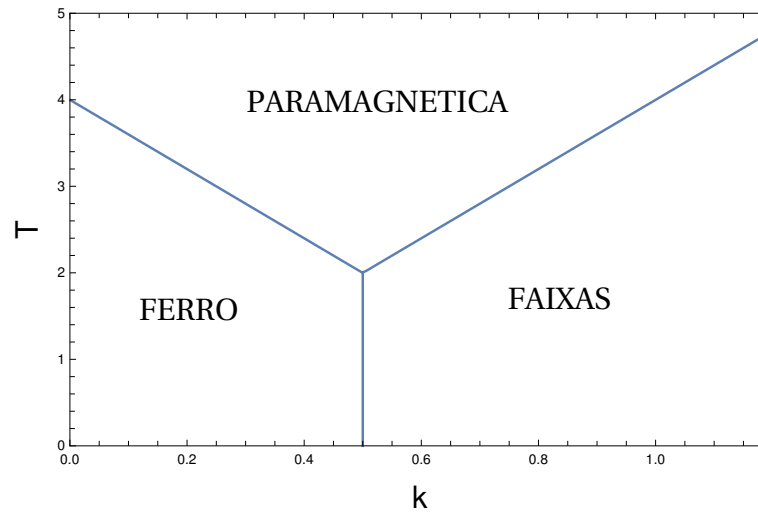


Figura 1 – Diagrama de fases do modelo J1-J2 a campo externo nulo obtido através do método de campo médio variacional da matriz densidade.

O método de campo médio também pode ser aplicado no caso com $h \neq 0$, porém será incapaz de detectar a fase nemática, uma vez que não é possível construir um funcional de energia livre para esta fase a partir da equação (2.2). Todavia, podemos ainda assim estimar qualitativamente a região que cada uma das outras duas fases ocupa no diagrama de fases da Figura 2. E como sabemos que a fase nemática deve ser uma fase intermediária, encontrada entre a fase totalmente ordenada e a paramagnética, conseguimos também ter um chute inicial de onde devemos procurá-la em estudos mais acurados.

Vemos então que detectar e estudar a fase nemática não é uma tarefa simples, pois uma vez que a detecção de tais configurações envolvem o cálculo de correlações em diferentes direções espaciais, não conseguimos detectá-la nesta primeira aproximação. Além disso, campo médio em duas dimensões é uma aproximação muito forte, pois está longe da dimensão crítica superior ($d=4$) e sobre a dimensão crítica inferior, onde as flutuações são particularmente fortes.

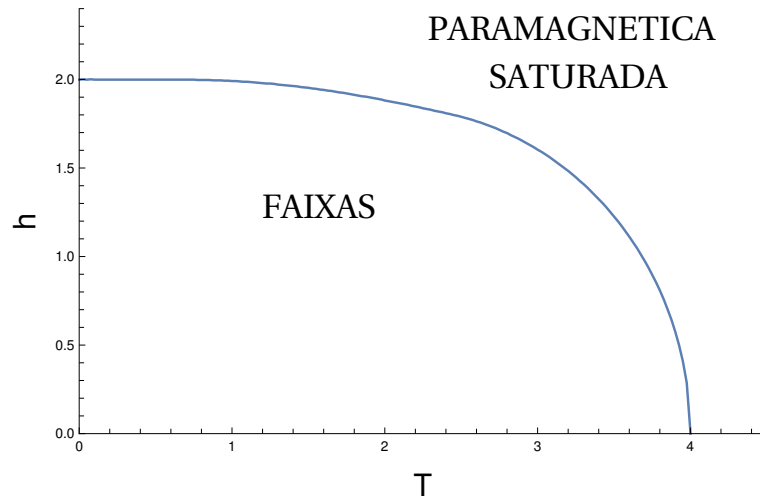


Figura 2 – Diagrama de fases do modelo J1-J2 para $k=J2/J1=1$ obtido através do método de campo médio variacional da matriz densidade.

2.2 CAMPO EXTERNO NULO E UNIVERSALIDADE

Os estudos em transições de fase no início dos anos 70 causaram grande impacto no desenvolvimento da física de fenômenos críticos. Entre os grandes avanços conquistados nesta época, destaca-se aqui a criação do conceito de universalidade. Introduzida por Kadanoff [16], esta hipótese tentava explicar evidências experimentais (observadas desde 1945 [17]) onde sistemas aparentemente diferentes possuíam incríveis semelhanças em suas transições de fase contínuas.

Estas evidências levaram Kadanoff, e outros autores, a sugerir que o comportamento crítico de um sistema deve depender somente de alguns parâmetros - como dimensionalidade, simetrias da fase ordenada e alcance das interações -, de forma que detalhes microscópicos do sistema sejam irrelevantes. Um melhor entendimento de quais características de um sistema são relevantes na determinação de sua classe de universalidade foi possível com a introdução do grupo de renormalização por Wilson [18], também no início dos anos 70.

Porém, mesmo com o sucesso em explicar o comportamento crítico de diversos sistemas, alguns contraexemplos foram encontrados para esta universalidade ordinária. Um desses sistemas foi o *eight-vertex model* [19], que possui expoentes críticos que variam continuamente com mudanças nas intensidades das interações.

Desta forma, o interesse no modelo $J1 - J2$ surgiu quando Nightingale [1], estudando um modelo de spins de Ising generalizado (2.3), descobriu evidências que o caso mais simples do modelo de Ising com interações entre primeiros e segundos vizinhos apresentava comportamento não universal. Em sua abordagem via grupo de renormalização, os expoentes críticos para o caso $K = 0$ variavam continuamente.

$$\mathcal{H} = -J1 \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j - J2 \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} s_i s_j - K \sum_{\langle i,j,k,l \rangle} s_i s_j s_k s_l - h \sum_i s_i. \quad (2.3)$$

Este estudo determinou, então, a direção que trabalhos subsequentes tomariam. O objetivo agora seria determinar em quais regiões esse comportamento não-ordinário acontece, qual a natureza das transições ferro-paramagneto e faixas-paramagneto, e construir um diagrama de fases completo para o modelo.

No início da década de 80, Oitmma [2] investigou essa não universalidade através de séries de alta temperatura e determinou que a universalidade no $J_1 - J_2$ é quebrada para $k = |J_2|/J_1 > 0.5$. Na mesma época, diversos trabalhos com simulações de Monte Carlo, feitos por Swendsen e Krinsky [6] e Landau [7] e Binder [8,9], corroboraram as descobertas de Nightingale e Oitmma. As simulações indicaram um comportamento do tipo Ising para $k < 0.5$, dependência dos expoentes críticos em k (para $k > 0.5$), e comportamento crítico do Ising 2D para grandes valores de k .

Uma possível causa para o não comportamento crítico de Ising nessa região $k \gtrsim 0.5$ foi encontrada por Morán-López et. al [3] em 1993. Usando uma aproximação de aglomerados de nove pontos (*nine-point-cluster approximation*) encontraram que a transição da fase de faixas para o estado paramagnético era de primeira ordem para $0.5 < k < k^* = 1.144$.

Um importante passo em direção ao completo entendimento do modelo foi dado por Kalz et. al [10] em um estudo de 2011 que combinava resultados de Monte Carlo e teorias perturbativas. Neste trabalho foi mostrado que para altos valores de k , a criticalidade do modelo $J_1 - J_2$ é do tipo Ashkin-Teller (AT) [20]. Este resultado sugeria a criticalidade AT como a melhor candidata para $k > k^*$, porém ainda não era possível generalizar esse comportamento para toda a variedade de valores de acoplamentos.

Foram os resultados obtidos por Jin et. al [4,5], em 2012 e 2013, que possibilitaram definir com precisão a natureza das transições de fase e a universalidade nas diferentes regiões de k . Em sua pesquisa, estabeleceram o correto valor de k^* : o modelo $J_1 - J_2$ possui transição de primeira ordem fraca para $0.5 < k < k^* = 0.67$. Para $k > k^*$ a transição é contínua e pertence a criticalidade do modelo de Ashkin-Teller. Os expoentes críticos variam continuamente à partir de k^* , onde corresponde ao modelo de Potts de 4 estados [21], até $k \rightarrow \infty$, onde possui a universalidade de Ising. Esta descoberta explicou também o porquê de vários artigos anteriores superestimarem o valor de k^* : o modelo de Potts de 4 estados exibe comportamento de pseudo-primeira ordem - que é refletido no modelo J_1 - J_2 em $k^* < k \lesssim 1$. O diagrama de fases em uma aproximação de campo médio para o caso sem campos magnéticos externos encontra-se na Figura 3.

A criticalidade AT é um exemplo da chamada universalidade fraca, um conceito introduzido por Suzuki [22] em 1974 a fim de explicar o comportamento crítico de contraexemplos da universalidade ordinária. Nesta abordagem, dimensionalidade e simetrias do parâmetro de ordem não são suficientes para fixar a universalidade do sistema. Como observado no modelo J_1 - J_2 , os expoentes críticos da transição de fase podem variar com algum parâmetro do sistema (a razão das constantes de acoplamento no caso deste modelo).

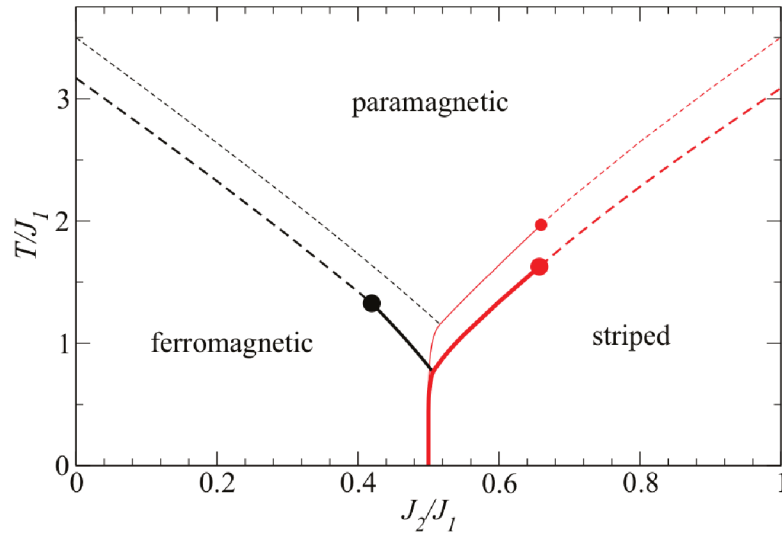


Figura 3 – Diagrama de fases do modelo J1-J2 em uma rede quadrada obtido através da teoria de campo médio em aglomerados de tamanho 2×2 (linha superior) e 4×4 pontos (linha inferior). As linhas tracejadas representam transições contínuas e as linhas contínuas transições de primeira ordem. Fonte: Jin et. al.

Dessa forma, o que define esta nova forma de universalidade são algumas razões entre certos expoentes críticos, uma vez que estas quantidades permanecem fixas.

Estas razões, também chamadas de expoentes críticos reduzidos, surgem naturalmente quando definimos os expoentes críticos através do comprimento de correlação inverso (*inverse correlation length*) ao invés da diferença de temperaturas $T - T_c$. Vale notar então que expoentes como η e δ , definidos apenas em T_c devem ser universais assim como na velha universalidade, uma vez que não dependem da variável temperatura.

2.3 CAMPO EXTERNO APLICADO

Como vimos na seção anterior, este modelo, à campo nulo, apesar de bem simples já apresenta uma série de características interessantes: a criticalidade depende das constantes de acoplamento J_1 e J_2 ; a formação de padrões de faixas; e o comportamento de pseudo-primeira ordem para algumas regiões do modelo. Porém o valor do estudo do modelo J1-J2 cresce ainda mais com a adição de um termo de interação com um campo magnético externo. Novas fases emergem devido a presença do campo externo e influenciam no comportamento do diagrama de fases, geralmente introduzindo reentrâncias.

Porém, em contrapartida ao modelo J1-J2 na ausência de campos externos que foi intensamente estudado desde a década de 70, poucos foram os casos onde este modelo foi investigado com campos externo aplicados [11, 12, 23–26]. Na década de 80, para o caso onde ambas interações são antiferromagnéticas, foi encontrado, em estudos de matriz de transferência [23, 24], comportamento reentrante na fase de faixas. Essa característica foi posteriormente confirmada para o caso $k = J_2/J_1 = 1$ em simulações de Monte Carlo [25]

e matriz de transferência juntamente com escalonamento de tamanho finito e invariância conforme [26].

Neste caso, onde $J_1 < 0$ e $J_2 < 0$, o diagrama de fases para $k = 1$, obtido por Yin e Landau[25], tem como estado fundamental faixas para campos externos pequenos ($h < 4$) e a chamada fase *row-shifted* (filas de spins com ordenamento alternante ferromagnético e antiferromagnético) na região $4 < h < 8$. O comportamento reentrante foi atribuído aos aglomerados *row-shifted* que começam a surgir com o aumento do campo e ajudam a sustentar o ordenamento das faixas. Todas as transições de fase observadas foram caracterizadas como transições contínuas pertencentes a um cenário de universalidade fraca, com expoentes críticos ligeiramente diferentes dos valores padrão do modelo Ising. Estes resultados estão de acordo com os de Queiroz[26], que também encontrou comportamento crítico condizente com a universalidade de Suzuki.

Já para o caso que estamos interessados, onde $J_1 > 0$ e $J_2 < 0$, Guerrero, Stariolo e Almarza[11] investigaram através do Método do Aglomerado Variacional e simulações de Monte Carlo a possível existência de uma fase intermediária entre as fases de faixas e paramagnética saturada; a qual foi encontrada e estudada para os casos $k = 0.6$ e $k = 1$, ambos na presença de campos externos. O Método do Aglomerado Variacional é uma generalização da teoria de campo médio que permite incluir a interação entre alguns spins da rede. Neste estudo, foi utilizado a aproximação que incorpora, exatamente, a interação entre quatro spins. Dessa maneira, foi possível detectar a fase nemática, uma fase em que as faixas estão todas orientadas na mesma direção, porém não possuem a periodicidade encontrada na fase de faixas. O nome nemática foi cunhado a esta fase em analogia a mesma fase encontrada em cristais líquidos. Neste estudo não foram encontrados indícios de uma fase nemática à campo externo nulo.

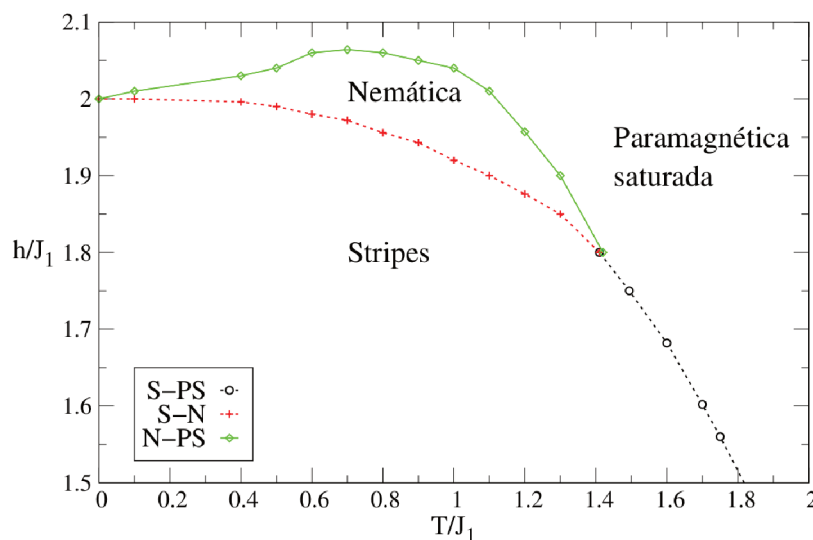


Figura 4 – Diagrama de fases do modelo J1-J2 em um campo magnético para $k=1$. As linhas sólidas correspondem a transições de segunda ordem e as tracejadas a transições de primeira ordem. Fonte: Duymovic[12]

A Figura 4 apresenta o diagrama de fases campo-temperatura encontrado para $k = 1$. A transição nemática-paramagnética é contínua nos resultados do Método do Aglomerado Variacional e concorda com as simulações de Monte Carlo feitas no mesmo trabalho. Estes resultados de Monte Carlo apontam comportamento crítico de Ising para esta transição. Já a transição faixas-nemática que é de primeira ordem no estudo de Guerrero, Stariolo e Almarza[11] não pôde ser assegurada pelas simulações realizadas. É importante perceber o comportamento reentrante da fase nemática, uma característica interessante que será tópico de discussão no capítulo de resultados de Monte Carlo (Seção 4.3.1).

Recentemente, no modelo J1-J2, também foi investigado [27] o efeito da existência de impurezas (sem spin) na rede. As simulações de Monte Carlo indicaram que a presença dessas impurezas pode quebrar localmente a simetria entre de faixas verticais e horizontais, e dessa maneira pode também destruir a fase de faixas - através da formação de domínios de faixas de orientação oposta. Os autores deste trabalho não encontraram assinaturas de uma fase intermediária nemática.

3 MÉTODOS COMPUTACIONAIS

Apesar da formulação da mecânica estatística, em especial a de equilíbrio, ser muito elegante, os processos para se obter as propriedades dos modelos estudados são geralmente muito confusos e exigentes. Usualmente, gostaríamos de, a partir da hamiltoniana do sistema, computar a função partição \mathcal{Z} , uma vez que quantidades termodinâmicas como magnetização e calor específico seriam diretamente obtidas a partir de \mathcal{Z} . Porém, para a maioria dos modelos, nossas expectativas são frustradas rapidamente devido ao grande número de estados possíveis para todas as N variáveis. Para os modelos de spins do tipo Ising, por exemplo, serão 2^N configurações possíveis, o que torna o cálculo de \mathcal{Z} inviável até mesmo para estudos longe do limite termodinâmico.

Portanto, com a exceção de raros modelos que possuem solução exata (sendo o modelo de Ising em duas dimensões [28] o mais famoso entre eles), precisamos de outras técnicas para encontrar as propriedades interessantes desses modelos. Na falta de soluções analíticas exatas, o método escolhido para estudar um determinado modelo fornecerá apenas aproximações numéricas aos valores verdadeiros das quantidades termodinâmicas, o que, por consequência, deve influenciar significativamente na qualidade final dos resultados.

Neste trabalho, escolhemos abordar o estudo do modelo $J1 - J2$ através do método computacional de Monte Carlo. Dessa maneira, este capítulo é então dedicado à apresentação dos métodos e ferramentas utilizados para a implementação do algoritmo usado para a obtenção dos resultados do próximo capítulo.

3.1 SIMULAÇÕES DE MONTE CARLO

Quando queremos encontrar resultados quantitativos fiéis aos reais, simulações de Monte Carlo são nossa melhor opção. Esta abordagem consiste em simular a evolução temporal de um sistema real através das flutuações térmicas presentes no sistema. Enquanto no cálculo da função partição precisaríamos analisar todas as configurações possíveis, neste método apenas os estados que o sistema visita naturalmente são necessários para estimar os observáveis do sistema. Esta é a principal vantagem e desvantagem do método, pois ao mesmo tempo que possibilita calcular as quantidades físicas do sistema, introduz erros estatísticos nos cálculos devido a ausência de várias configurações.

Para que as simulações tenham sentido físico, a regra de troca de um estado para outro durante a simulação deve ser escolhida de modo que as probabilidades do sistema estar numa determinada configuração sejam compatíveis com as probabilidade reais dessas mesmas configurações. Isto pode ser obtido escolhendo as taxas de transições entre os diferentes estados de tal maneira que no equilíbrio as probabilidades de observar uma configuração obedeçam a distribuição de Boltzmann. Existem várias maneiras de se fazer isso, uma delas sendo através do algoritmo de Metrópolis.

3.1.1 Algoritmo de Metrópolis

O algoritmo de Metrópolis [29] é o método de Monte Carlo mais utilizado na física. A ideia geral desse algoritmo é escolher aleatoriamente um novo estado ν para o sistema e aceitar (ou não) essa troca de acordo com a aceitação probabilística $A(\mu \rightarrow \nu)$ (onde μ é o estado atual do sistema) relacionada a esta transição.

Para encontrarmos a regra que rege a dinâmica do sistema, devemos impor que distribuição de Boltzmann seja a solução da equação mestra no equilíbrio. Esta equação descreve a evolução temporal de um sistema através das probabilidades de transição para e do estado atual. Assim, nesta exigência para a equação mestra, a condição de balanço detalhado assume a forma:

$$\frac{P(\mu \rightarrow \nu)}{P(\nu \rightarrow \mu)} = e^{-\beta(E_\nu - E_\mu)}, \quad (3.1)$$

onde $P(\mu \rightarrow \nu)$ é a probabilidade de um estado μ transicionar para um outra configuração ν , estados estes com energias E_μ e E_ν , respectivamente.

Esta probabilidade $P(\mu \rightarrow \nu)$ depende não só da taxa de aceitação $A(\mu \rightarrow \nu)$ mas também de ν ser escolhido como possível novo estado entre as $2^N - 1$, para o caso particular de modelos de Ising, diferentes configurações possíveis. Dessa maneira, $P(\mu \rightarrow \nu)$ pode ser escrito como:

$$P(\mu \rightarrow \nu) = g(\mu \rightarrow \nu)A(\mu \rightarrow \nu), \quad (3.2)$$

onde $g(\mu \rightarrow \nu)$ é a probabilidade de seleção de ν estando numa configuração μ . Impondo que qualquer estado pode ser escolhido com mesma probabilidade, a equação (3.1) fica:

$$\frac{A(\mu \rightarrow \nu)}{A(\nu \rightarrow \mu)} = e^{-\beta(E_\nu - E_\mu)}. \quad (3.3)$$

A partir da equação (3.3), várias definições para as taxas de aceitação A são possíveis, porém queremos que a taxa de trocas seja grande o suficiente para que a dinâmica do sistema não seja lenta demais. A definição de $A(\mu \rightarrow \nu)$ que maximiza o número de trocas aceitas é dada por:

$$A(\mu \rightarrow \nu) = \begin{cases} e^{-\beta(E_\nu - E_\mu)} & \text{se } E_\nu > E_\mu \\ 1 & \text{para outros casos} \end{cases}. \quad (3.4)$$

Com esta definição para a taxa de aceitação, o sistema sempre aceita trocas que diminuam sua energia interna, porém ainda permite que flutuações térmicas aumentem a sua entropia.

Vale notar que, como a taxa de aceitação depende da diferença de energias, propor a inversão de vários spins simultaneamente muitas vezes é uma opção ruim, pois o estado proposto pode ter uma energia muito diferente do atual. Um jeito simples de garantir que ν tenha uma energia próxima a μ é propor a inversão de apenas um spin da rede.

Claro que nem sempre a inversão de um único spin é a maneira mais rápida de se atingir o equilíbrio. De fato, vários algoritmos utilizam técnicas que permitem minimizar a energia do sistema muito mais rapidamente através da inversão de regiões inteiras do sistema [30,31]. Porém, para o $J1 - J2$, nenhum método supera a inversão de um único spin, pois a presença da fase de faixas torna a inversão de aglomerados de spins pouco realizável em termos energéticos.

Com a falta de um algoritmo de atualização de ilhas para o modelo $J1 - J2$, surge a necessidade de otimizar o código através de outros métodos, uma vez que precisamos compensar os grandes tempos de simulação necessários para a termalização do sistema. Estes problemas que surgem devido a presença da competição entre as diferentes interações do modelo serão amenizados com a implementação dos métodos de *Parallel Tempering* e *Multispin Coding*, apresentados em detalhes nas próximas seções.

3.2 PARALLEL TEMPERING

Sistemas em baixas temperaturas, especialmente em modelos frustrados, correm o risco de ficarem presos em estados metaestáveis por tempos muito longos. Isso acontece pois muitas vezes, nesse regime de temperatura, as flutuações térmicas não permitem ao sistema explorar o espaço de fases em busca do equilíbrio. Temperaturas mais altas, ao contrário, já conseguem proporcionar uma liberdade maior no espaço de configurações do sistema.

O *Parallel Tempering* [15] é um método que possibilita que réplicas presas em mínimos locais de energia livre visitem temperaturas mais altas e, nesse passeio pelas diferentes temperaturas, vençam as barreiras energéticas para assim atingir mínimos globais de energia. Para isso, o método requer que sejam simuladas, paralelamente, M cópias ou réplicas de um sistema (cada uma em uma temperatura diferente), e que sejam propostas trocas de temperaturas entre essas réplicas.

Inicialmente, as aplicações dessa estratégia estavam limitadas a problemas dentro do escopo da física estatística. Porém, devido ao caráter genérico de toda a construção do método (que ficará explícito no decorrer desta seção), é possível encontrar estudos utilizando *Parallel Tempering* em diversas outras disciplinas como química [32], biologia [33,34] e ciência de materiais [35].

Formalmente, cada subsistema encontra-se em uma configuração X_m com uma temperatura inversa dada por β_m . O sistema como um todo é especificado pela configuração individual de cada réplica, $\{X\} = \{X_1, X_2, \dots, X_M\}$, e suas temperaturas, $\{\beta\} = \{\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_M\}$. Sua função de partição é simplesmente dada por

$$\mathcal{Z} = Tr_{\{X\}} \exp \left(- \sum_{m=1}^M \beta_m \mathcal{H}(X_m) \right) = \prod_{m=1}^M \mathcal{Z}_1(\beta_m), \quad (3.5)$$

onde cada subsistema obedece à hamiltoniana comum $\mathcal{H}(X)$.

Como nesse método cada réplica é independente das demais, sabemos que para um dado $\{\beta\}$ a probabilidade que o sistema tenha configuração $\{X\}$, $P(\{X, \beta\})$, será apenas o produto de todas probabilidades individuais, $p(X_m, \beta_m)$, de cada cópia. Isto é:

$$P(\{X, \beta\}) = p(X_1, \beta_1)p(X_2, \beta_2) \cdots p(X_M, \beta_M) = \prod_{m=1}^M p(X_m, \beta_m). \quad (3.6)$$

Para encontrarmos a expressão para $p(X, \beta)$, equação (3.7), devemos construir e maximizar o funcional para a entropia do sistema, utilizando vínculos relacionados com a conservação de energia e com o fato de que cada subsistema encontra-se em um dos estados $p(X, \beta)$, i.e. $\sum_X p(X, \beta) = 1$.

$$p(X, \beta) = \frac{1}{\mathcal{Z}_1(\beta)} e^{-\beta E(X)}. \quad (3.7)$$

Como a intenção do *Parallel Tempering* é propor trocas de temperatura entre os subsistemas, podemos definir a matriz de transição $T(X, \beta_m | X', \beta_n)$, que representa a probabilidade de aceitação de uma troca entre duas configurações, X e X' , em temperaturas β_m e β_n , respectivamente.

Para garantir que o sistema permaneça em equilíbrio, “é suficiente impor a condição de balanço detalhado (equação 3.8) para a matriz de transição” (Hukushima e Nemoto[15], tradução nossa).

$$\begin{aligned} T(X, \beta_m | X', \beta_n) P(\cdots; X, \beta_m; \cdots; X', \beta_n; \cdots) = \\ T(X, \beta_n | X', \beta_m) P(\cdots; X, \beta_n; \cdots; X', \beta_m; \cdots). \end{aligned} \quad (3.8)$$

Usando o balanço detalhado (3.8) e a fatorização em probabilidades individuais (equação 3.6), conseguimos simplificar o resultado para

$$\begin{aligned} T(X, \beta_m | X', \beta_n) p(X, \beta_m) p(X', \beta_n) = \\ T(X, \beta_n | X', \beta_m) p(X, \beta_n) p(X', \beta_m). \end{aligned} \quad (3.9)$$

Podemos então utilizar a definição dos $p(X, \beta)$ para chegarmos em

$$\begin{aligned} T(X, \beta_m | X', \beta_n) \exp(-\beta_m E(X)) \exp(-\beta_n E(X')) = \\ T(X, \beta_n | X', \beta_m) \exp(-\beta_n E(X)) \exp(-\beta_m E(X')), \end{aligned} \quad (3.10)$$

ou de outra maneira

$$\frac{T(X, \beta_m | X', \beta_n)}{T(X, \beta_n | X', \beta_m)} = \exp\left((\beta_m - \beta_n)(E(X) - E(X'))\right) = \exp(\Delta), \quad (3.11)$$

onde $\Delta = (\beta_m - \beta_n)(E(X) - E(X'))$.

Assim, se utilizarmos o algoritmo de Metrópolis (seção 3.1.1) para as propostas de troca entre réplicas, obtemos que a probabilidade de transição entre os m -ésimo e n -ésimo subsistemas é

$$T(X, \beta_m | X', \beta_n) = \begin{cases} \exp(\Delta) & \text{se } \Delta < 0 \\ 1 & \text{para outros casos} \end{cases}. \quad (3.12)$$

Esse mecanismo de troca será o responsável por promover uma termalização mais rápida dos subsistemas (especialmente os com menores temperaturas).

3.2.1 Parallel tempering nas simulações de Monte Carlo

O primeiro procedimento a ser feito, ainda antes das simulações com *Parallel Tempering*, é determinar o nosso conjunto de temperaturas $\{\beta\}$. Este item é tão importante - tanto para a qualidade dos resultados, quanto para garantir um uso óptimo do tempo de simulação - que será discutido em mais profundidade na próxima subseção.

Uma vez definido nosso conjunto $\{\beta\}$, simulamos simultaneamente todas as M cópias do nosso sistema por t_{MCS} passos de Monte Carlo, e então tentaremos as trocas entre os subsistemas. Na verdade, não é necessário propor a troca entre todas as réplicas, mas apenas entre as que possuem temperaturas próximas (vizinhas). Isso é possível pois a taxa de aceitação é praticamente zero para os demais casos.

Usando a equação (3.12), calculamos a probabilidade de transição entre réplicas de “temperaturas vizinhas” $T(X, \beta_m | X', \beta_{m+1})$ - uma vez que temos computadas as energias de ambos os sistemas. A troca será aceita caso $\Delta = (\beta_m - \beta_{m+1})(E(X) - E(X'))$ seja positivo (ou igual a zero), ou se $\exp(\Delta)$ for maior que um número aleatório entre 0 e 1.

Efetivamente, as etapas do algoritmo são:

1. Simular, simultaneamente e independentemente, os M subsistemas durante t_{MCS} passos de Monte Carlo;
2. Calcular a energia de cada subsistema;
3. Propor a troca entre os sistemas com β_1 e β_2 :
 - a) Computar Δ - aceitar ou não a troca de temperaturas de acordo com a probabilidade $T(X_1, \beta_1 | X_2, \beta_2)$.
4. Propor a troca entre os sistemas com β_2 e β_3 ;
- ...
- M+1. Propor a troca entre os sistemas com β_{M-1} e β_M ;
- M+2. Repetir.

3.2.2 Determinando o conjunto de temperaturas

Diversos métodos para a obtenção do conjunto de temperaturas $\{\beta\}$ foram propostos na literatura. $\{\beta\}$ deve ser escolhido de tal forma que todas M réplicas consigam transitar entre as diferentes temperaturas disponíveis, ou seja é necessário haver sobreposição das distribuições de energia $P_\beta(E)$ de temperaturas vizinhas, uma vez que a regra para troca

de réplicas depende da diferença de suas energias. Para que o processo seja mais eficaz, $\{\beta\}$ também deve conter tanto temperaturas altas (maiores que T_c) quanto baixas.

A maneira mais simples de computar $\{\beta\}$ é pegando intervalos contantes em β ($\beta_{m+1} = \beta_m + \delta$). Este método, para o J1-J2, não nos leva à distribuição mais eficiente, mas permite decidir $\{\beta\}$ sem nenhuma rotina complicada. Se conseguirmos fazer δ pequeno o suficiente (aumentando o número de réplicas, por exemplo) podemos utilizá-lo sem problemas.

Já em Hukushima e Nemoto[15] a proposta é partir de um conjunto $\{\beta\}$ inicial e iterativamente melhorar a distribuição através de uma rotina que envolve a taxa de aceitação das trocas p_{acc} . Esse método infelizmente não se adequou as nossas necessidades, pois para o modelo J1-J2, principalmente para tamanhos grandes, sua convergência para o conjunto ideal de temperaturas é lenta. Ele também não preserva a temperatura mínima inicial do sistema, onde a única temperatura (inversa) fixa é β_1 .

Inicialmente, o método escolhido foi um meio termo entre os dois outros citados, uma variação do trabalho de Rathore, Chopra e Pablo[36] que se baseia em encontrar uma distribuição de temperaturas que proporciona uma igual taxa de aceitação das trocas entre os subsistemas. Nele fixamos T_1 , T_{max} , e uma taxa de aceitação alvo $p_{acc|tar} (\pm\sigma)$. Tipicamente $p_{acc|tar}$ é escolhida próxima a 0.25, pois no próprio trabalho de Rathore, Chopra e Pablo[36], bem como em Kone e Kofke[37], é mostrado que existe uma taxa de aceitação ótima entre 20% e 23% a partir da qual as simulações não tem aumento em suas performances.

Neste método, tendo a temperatura da primeira cópia T_1 , propõe-se uma temperatura T_2 para a segunda cópia. Esses dois sistemas são então simulados através do algoritmo de Metrópolis com *Parallel Tempering* e trocas das temperaturas T_1 e T_2 são tentadas a cada t_{MCS} passos de Monte Carlo. A partir destas tentativas é possível definir uma taxa de aceitação experimental, $p_{acc|med}(T_1, T_2)$, que contém a informação de qual a porcentagem média de trocas aceitas entre T_1 e T_2 .

Compara-se então $p_{acc|med}(T_1, T_2)$ com $p_{acc|tar} \pm \sigma$. Caso a taxa de aceitação entre T_1 e T_2 esteja no intervalo alvo, T_2 é salva em $\{\beta\}$. Se estiver fora dos limites uma nova T_2 é proposta e repete-se o cálculo de $p_{acc|med}(T_1, T_2)$ até que T_2 seja boa. Esse algoritmo deve ser repetido até o ponto em que $T_M > T_{max}$. Dessa maneira, T_M será nossa maior e última temperatura em $\{\beta\}$. Teremos assim, um total de M réplicas.

A Figura 5 é um exemplo de distribuição obtida a partir do método descrito para o modelo J1-J2. Percebemos que existe uma concentração maior de réplicas com temperaturas próximas a temperatura crítica. Essa distribuição geralmente é muito boa, pois como estamos interessados em estudar os fenômenos críticos do modelo, já temos um bom arranjo de temperaturas para medir quantidades como susceptibilidades e cumulantes. Porém como devemos fazer uma análise de escalonamento finito para estudar outras propriedades do modelo, o ideal é que as medidas feitas em diferentes tamanhos de sistema

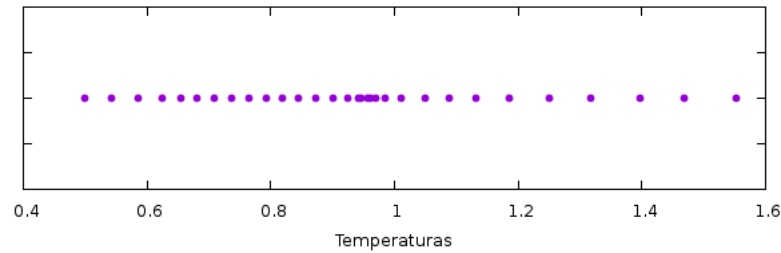


Figura 5 – Distribuição de temperaturas para o modelo J1-J2 com $L=64$, $h=1.90$ e $k=|J2|/J1=1.0$. As temperaturas se concentram próximas à temperatura crítica.

tenham $\{\beta\}$ s que coincidam.

Portanto, com o avanço do projeto, foi necessário abandonar o método com $p_{acc|tar}$, pois as temperaturas não coincidem para diferentes tamanhos de sistemas. Mas como nesse ponto as otimizações na implementação do modelo já nos possibilitavam trabalhar com um grande número de subsistemas, utilizar a distribuição $\{\beta\}$ que pega intervalos constantes em β voltou a ser uma opção extremamente viável - uma vez que δ era suficientemente pequeno até para sistemas de tamanho grande ($L \geq 512$). Esse aumento no desempenho do algoritmo deu-se devido a implementação do método do *Multispin Coding*, uma técnica de paralelismo que se encaixa perfeitamente na presença do *Parallel Tempering*.

3.3 MULTISPIN CODING

O propósito desta seção é introduzir a técnica de processamento paralela conhecida como Multispin Coding, cuja implementação permite acelerar consideravelmente simulações de Monte Carlo (ou outros tipos de programas). Esse ganho é possível pois nessa técnica usaremos operações Booleanas (E, OU, XOU e NEGAÇÃO - Tabela 1), ao invés de operações aritméticas (+, -, *, /), para evoluir o sistema. Logo, para que o algoritmo seja eficiente, o Multispin Coding geralmente é implementado em modelos de sistemas onde a informação das partes que o constituem são binárias (como a orientação de spins de Ising). Essa técnica, porém, também pode ser implementada em modelos que possuam componentes com mais de dois estados possíveis, como é o caso do trabalho de Kikuchi e Okabe[38] no modelo de Potts de 3 estados.

Segundo Newman e Barkema[13], a ideia básica por trás do *Multispin Coding* é guardar os estados de várias variáveis, como spins no modelo de Ising por exemplo, nos bits de uma única palavra no computador. Eles definem uma “palavra” como “o número de bits de informação que a CPU do computador consegue processar de uma vez, que usualmente é 32 ou 64 bits”. Portanto, se utilizarmos as operações presentes na Tabela 1, será possível processar partes distintas de um sistema simultaneamente, aumentando a eficiência do nosso algoritmo.

As duas implementações mais comuns do *Multispin Coding* são os algoritmos de

Tabela 1 – Tabela verdade

E(\wedge)	OU(\vee)	XOU(\oplus)	NEGAÇÃO(\neg)
$0 \wedge 0 = 0$	$0 \vee 0 = 0$	$0 \oplus 0 = 0$	
$1 \wedge 0 = 0$	$1 \vee 0 = 1$	$1 \oplus 0 = 1$	$\neg 0 = 1$
$0 \wedge 1 = 0$	$0 \vee 1 = 1$	$0 \oplus 1 = 1$	$\neg 1 = 0$
$1 \wedge 1 = 1$	$1 \vee 1 = 1$	$1 \oplus 1 = 0$	

atualização síncrona e assíncrona. No caso síncrono, a “palavra” guarda informação das partes de uma mesma rede - dessa maneira, uma operação Booleana atualiza uma grande parte dos sítios, de um único sistema, de uma vez só. Já na atualização assíncrona, cada bit da “palavra” possui o estado atual de sítios em redes diferentes - fazendo com que operações bit-a-bit atualizem, simultaneamente, os spins (sítios) dos vários sistemas simulados. O fato da atualização assíncrona permitir simular múltiplos subsistemas (redes) independentes simultaneamente faz desse algoritmo a escolha mais adequada para a implementação do método do *Parallel Tempering*, descrito na seção anterior.

3.3.1 Algoritmo de Metrópolis: Ising 2D

A implementação do *Multispin Coding* no modelo J1-J2 pode ser um pouco dura demais se introduzida diretamente. Para ilustrar a técnica e preparar o ambiente para as mudanças no algoritmo de Metrópolis no J1-J2, iremos discutir inicialmente a sua implementação no modelo de Ising bidimensional sem a presença de campos magnéticos externos (3.13).

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j. \quad (3.13)$$

Para que seja possível utilizar operações binárias para atualizar o estado dos spins, precisaremos usar uma forma menos usual, porém equivalente a original, para o cálculo da diferença de energia entre os dois estados (atual, S_i , e proposto, $S'_i = -S_i$) das diversas cópias do sistema:

$$\Delta E = -2J * S'_i * (S_{\leftarrow} + S_{\downarrow} + S_{\rightarrow} + S_{\uparrow}), \quad (3.14)$$

onde os subíndices de S fazem referência aos spins vizinhos de S_i - neste caso aos 4 primeiros vizinhos.

Introduzindo a variável N_{anti} , que representa o número de primeiros vizinhos anti-alinhados (em relação a S_i), conseguimos escrever (3.14) como:

$$\Delta E = 4J * (2 - N_{anti}). \quad (3.15)$$

Aceitaremos diretamente a inversão se $\Delta E \leq 0$, ou, equivalentemente, caso $N_{anti} \geq 2$. Nos casos onde N_{anti} for 0 ou 1, a inversão ainda pode acontecer com probabilidades

$\exp(-8\beta J)$ e $\exp(-4\beta J)$, respectivamente. Com essas informações, não será tão difícil ver que a nova equação de evolução para dos spins é a dada por:

$$\sigma' = \sigma \oplus [R_{\geq 2} \vee (R_1 \wedge r_1) \vee (R_0 \wedge r_0)], \quad (3.16)$$

onde a “palavra” σ guarda a informação das variáveis S em seus bits. R_0 , R_1 e $R_{\geq 2}$ são expressões lógicas que possuem valor 1 se “0”, “1” ou “2+” spins vizinhos estiverem anti-alinhados, respectivamente. As expressões r_0 e r_1 são bits aleatórios e possuem valor 1 com probabilidade $\exp(-8\beta J)$ e $\exp(-4\beta J)$, respectivamente.

Para encontrarmos as dependências de R_0 , R_1 e $R_{\geq 2}$ em relação a σ iremos definir 4 variáveis auxiliares a_1 , a_2 , a_3 e a_4 (3.17), que assumirão valor 1 apenas se os pares correspondentes estiverem anti-alinhados.

$$\begin{aligned} a_1 &= \sigma_i \oplus \sigma_{\leftarrow}, & a_3 &= \sigma_i \oplus \sigma_{\rightarrow}, \\ a_2 &= \sigma_i \oplus \sigma_{\downarrow}, & a_4 &= \sigma_i \oplus \sigma_{\uparrow}. \end{aligned} \quad (3.17)$$

Dessa maneira, obtemos:

$$\begin{aligned} R_{\geq 2} &= [(a_1 \vee a_2) \wedge (a_3 \vee a_4)] \vee [(a_1 \wedge a_2) \vee (a_3 \wedge a_4)], \\ R_1 &= [a_1 \vee a_2 \vee a_3 \vee a_4] \oplus R_{\geq 2}, \\ R_0 &= \neg[a_1 \vee a_2 \vee a_3 \vee a_4]. \end{aligned} \quad (3.18)$$

Combinando as equações (3.16) e (3.18) temos nosso algoritmo completo. De fato, existem maneiras de aprimorar essa implementação (como descrito em Newman e Barkema[13], seção 15.1.2), porém deste jeito conseguimos mostrar de uma forma simples a implementação do paralelismo assíncrono.

3.3.2 Algoritmo de Metrópolis: J1-J2

Embora os cálculos fiquem consideravelmente mais difíceis com a introdução de novas interações, seguir os passos da implementação do modelo de Ising da seção anterior deve nos levar a equação mestra para a atualização dos spins no modelo J1-J2,

$$H = -J1 \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j - J2 \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} s_i s_j - h \sum_i s_i. \quad (3.19)$$

Assim, começamos calculando a diferença de energia da troca proposta, ainda na representação de S :

$$\Delta E = -2 * S'_i * (S_{\leftarrow} + S_{\downarrow} + S_{\rightarrow} + S_{\uparrow} + k(S_{\swarrow} + S_{\searrow} + S_{\nearrow} + S_{\nwarrow}) + h), \quad (3.20)$$

onde $k = J2/J1$, h é o campo magnético externo aplicado ao sistema e ΔE e h são medidos em unidades de $J1$.

É interessante definir então $N_{ali}^{(i)}$ e $N_{anti}^{(i)}$, onde $i = 1, 2$ serão, respectivamente, o número de 1ºs e 2ºs vizinhos alinhados e anti-alinhados. Usando essa notação conseguimos escrever (3.20) como:

$$\Delta E = 2 * (N_{ali}^{(1)} - N_{anti}^{(1)} + k(N_{ali}^{(2)} - N_{anti}^{(2)}) + h * S_i). \quad (3.21)$$

Percebendo também que tanto o número de primeiros quanto segundos vizinhos é igual a 4, chegamos em:

$$\begin{aligned} \Delta E &= 2 * (4 - 2N_{anti}^{(1)} + k(2N_{ali}^{(2)} - 4) + h * S_i) \\ &= 4 * (2(1 - k) - \tilde{N} + \frac{h}{2}S_i), \end{aligned} \quad (3.22)$$

onde $\tilde{N} = N_{anti}^{(1)} - kN_{ali}^{(2)}$.

Dependendo do valor de \tilde{N} aceitaremos ou não a inversão de S_i . De maneira análoga aos resultados encontrados para o modelo de Ising 2D, aceitaremos diretamente a inversão se a equação (3.23) for satisfeita. Os valores de \tilde{N} que não satisfazem a equação 3.23 são as configurações que precisam de chutes térmicos para que a mudança de S_i ocorra.

$$\tilde{N} \geq 2(1 - k) + \frac{h}{2}S_i. \quad (3.23)$$

Note que com o acréscimo das novas interações, em relação a seção anterior, algumas dificuldades surgiram: \tilde{N} não é necessariamente um número inteiro; $N_{ali}^{(2)}$ e $N_{anti}^{(1)}$ não possuem mesmo peso no cálculo de \tilde{N} ; e o termo proporcional ao campo externo não pode ser computado de forma binária. Essas novas características fazem com que seja necessário desenvolver algoritmos particulares para diferentes valores de (k, h) .

3.3.2.1 Exemplo prático, $k = -1$

A escolha de $k = -1$ simplifica bastante as equações anteriores, pois introduz uma simetria entre $N_{ali}^{(2)}$ e $N_{anti}^{(1)}$. A equação (3.23), por exemplo, fica apenas:

$$\tilde{N} \geq 4 + \frac{h}{2}S_i, \quad (3.24)$$

com $\tilde{N} = N_{anti}^{(1)} + N_{ali}^{(2)}$, o que implica que primeiros e segundos vizinhos tem o mesmo peso na construção de ΔE .

Portanto, a campo externo nulo, as propostas de inversão de spin serão sempre aceitas quando $\tilde{N} \geq 4$. Para os demais valores de \tilde{N} , a troca será aceita com probabilidade $\exp(4 * (4 - \tilde{N})\beta)$.

Se incluirmos o campo externo, devemos ter cuidado com os valores de h que podem fazer o limite de \tilde{N} aumentar. Por exemplo, se $h \in [0, 2)$, serão aceitas diretamente

configurações com $\tilde{N} \geq 5$. Portanto, para o caso em que $h \in [0, 2)$ e $k = -1$, a equação mestra é:

$$\sigma' = \sigma \oplus [R_{\geq 5} \vee (R_4 \wedge r_4) \vee (R_3 \wedge r_3) \vee (R_2 \wedge r_2) \vee (R_1 \wedge r_1) \vee (R_0 \wedge r_0)], \quad (3.25)$$

onde a forma explícita das expressões lógicas R'_i s pode ser encontrada no Apêndice B e as expressões aleatórias r'_i s são computadas com as respectivas probabilidades a elas associadas.

3.4 COMPARAÇÃO

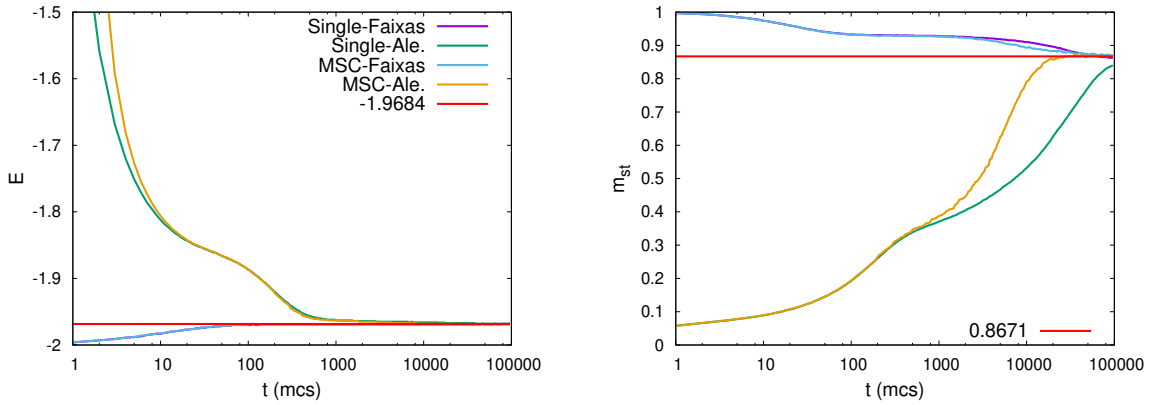
Para colocar as novas implementações à prova fizemos dois testes: um para avaliar a eficiência do *Parallel Tempering* e outro para comparar o desempenho dos algoritmos com e sem *Multispin Coding*. Para isso, simulamos um sistema de tamanho 32×32 num campo externo $h = 1.93$, utilizando o algoritmo completo (*Parallel Tempering* e *Multispin Coding*) e o algoritmo básico (otimizado) do modelo J1-J2.

A Figura 6 mostra a evolução temporal da energia interna (Figura 6a) e parâmetros de ordem (Figuras 6b e 6c) para os dois algoritmos, cada um com duas condições iniciais distintas (aleatória e faixas). Em todos os casos a temperatura escolhida foi $T = 0.7$, uma temperatura no regime de faixas (baixa temperatura). O tempo de equilíbrio para cada uma das curvas pode ser encontrado na Tabela 2.

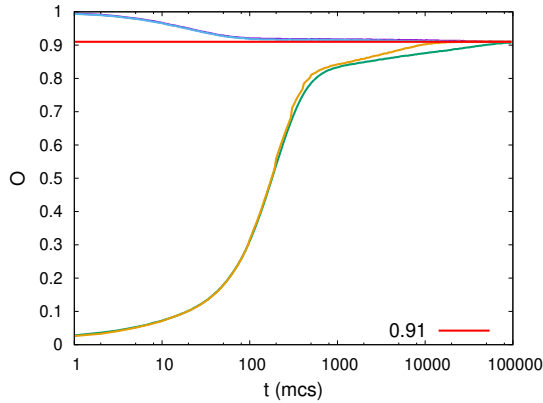
Tabela 2 – Comparação Parallel Tempering (PT)

	Algoritmo (C.I.)	Tempo de equilíbrio (t_{mcs})
Energia	Sem PT (Faixas)	136
	Sem PT (Aleatório)	38800
	Com PT (Faixas)	100
	Com PT (Aleatório)	8700
Magnetização	Sem PT (Faixas)	67600
	Sem PT (Aleatório)	>100000
	Com PT (Faixas)	67600
	Com PT (Aleatório)	26500
Orientacional	Sem PT (Faixas)	46500
	Sem PT (Aleatório)	>100000
	Com PT (Faixas)	17000
	Com PT (Aleatório)	22400

É importante lembrar que para o algoritmo com *Parallel Tempering* foram simuladas 64 temperaturas no intervalo $0.7 < T < 1.2$, o que faz essa comparação não ser totalmente justa, afinal o tempo de simulação de um passo de Monte Carlo é muito mais rápido quando simulamos apenas um sistema (em relação aos 64 subsistemas do *Parallel Tempering*). Portanto, para chegarmos mais perto da verdadeira eficiência do novo algoritmo precisamos



(a) Evolução temporal da energia para diferentes simulações. Energia de equilíbrio: $E_{eq} = -1.9684$. (b) Evolução temporal da magnetização staggered para diferentes simulações. Magnetização de equilíbrio: $m_{eq} = 0.8671$.



(c) Evolução temporal do parâmetro de ordem orientacional para diferentes simulações. Parâmetro de ordem orientacional de equilíbrio: $O_{eq} = 0.910$.

Figura 6 – Comparação entre os algoritmos com e sem a implementação do *Parallel Tempering*. Simulações realizadas para $L = 32$, $h = 1.93$ e $T = 0.7$. Temperaturas de equilíbrio individuais podem ser vistas na Tabela 2.

descobrir também quanto tempo é necessário para cada algoritmo fazer a atualização de um único spin.

Essa comparação (Tabela 3) foi feita tanto no cluster de computadores do grupo de Mecânica Estatística da Universidade Federal de Santa Catarina quanto num computador pessoal, os dois principais recursos utilizados para obtenção dos dados dessa dissertação. Vemos que em ambos os casos o *Multispin Coding* requer um tempo menor para inverter um único spin da rede (no caso do *Multispin Coding*, entende-se que a inversão de uma “palavra” corresponde a M *spinflips*, onde M é o número de bits que formam esta “palavra”), sendo até 3.4 vezes mais rápido nas simulações feitas no cluster de computadores.

A conclusão final é que se estamos interessados em estudar propriedades numa temperatura específica (como a função de correlação, por exemplo), nossa melhor escolha ainda é simular um único sistema, pois os tempos de equilíbrio elevados são compensados pelo grande número de atualizações que o algoritmo consegue efetuar. Todavia, quando é

Tabela 3 – Comparação Multispin Coding

	Algoritmo	ns/spinflip	t_{trad}/t_{mc}
Cluster	Tradicional	22.(3)	3.40 ± 0.03
	Multispin Coding	6.4(6)	
PC	Tradicional	21.(3)	2.98 ± 0.03
	Multispin Coding	7.2(2)	

interessante varrer uma região de temperaturas, as melhorias apresentadas se mostram de extrema importância para uma mais rápida obtenção de resultados de equilíbrio.

4 RESULTADOS

Como vimos na seção anterior, a fase nemática pode ser caracterizada em termos da presença e ausência de certos ordens no sistema. Assim, para medirmos esses graus de ordem precisamos definir os parâmetros de ordem adequados para este modelo. O parâmetro de ordem posicional [5, 11], relacionado com a existência de periodicidade nas direções $\hat{\alpha} = \hat{x}, \hat{y}$ pode ser calculado através das quantidades

$$m_{\alpha} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (-1)^{\alpha_i} s_i, \quad (4.1)$$

onde N é o número total de spins na rede e $\alpha_i = x_i, y_i$ são as coordenadas do i -ésimo spin, s_i . O parâmetro de ordem posicional global, também conhecido como magnetização staggered, é então definido como:

$$m_{st} = \sqrt{m_x^2 + m_y^2}. \quad (4.2)$$

Para detecção da fase nemática também se faz necessário definir um parâmetro de ordem orientacional. Várias opções apresentadas na literatura de modelos com fases moduladas foram testadas como parâmetro de ordem orientacional [11, 39, 40], porém a definição da equação (4.3) (Ref. [11]) foi a escolhida para as simulações definitivas. Suas principais vantagens em relação as demais definições são: a possibilidade da definição de uma ordem local de orientação (útil para o cálculo da função de correlação); sua definição depende só das duas direções principais $\hat{\alpha} = \hat{x}, \hat{y}$ (no modelo J1-J2 isto é mais interessante que definições mais gerais que utilizam o vetor diretor para determinação da orientação das faixas, uma vez que as faixas neste modelo só podem ser encontradas na vertical ou horizontal).

$$O = \frac{1}{2N} \sum_{i=1}^N s(\mathbf{r}_i) [s(\mathbf{r}_i + \hat{x}) - s(\mathbf{r}_i + \hat{y})]. \quad (4.3)$$

Uma observação importante é que na análise estatística não nos interessa qual a direção preferencial das faixas (vertical ou horizontal), uma vez que queremos apenas saber se existe ordem orientacional ou não no sistema. Dessa forma, as médias estatísticas do parâmetro de ordem orientacional serão em relação ao seu valor absoluto, i.e. $\langle |O| \rangle$.

A Figura 7 ilustra o comportamento dos dois parâmetros de ordem numa região onde é possível ver a presença da fase nemática. Para este caso, onde $k = 1.0$ e $B = 1.97$, a magnetização staggered vai a zero antes do parâmetro de ordem orientacional. Porém, não fica claro em quais temperaturas ocorrem as transições de fase. Assim, apesar da definição formal da fase nemática ser em termos das ordens presentes no sistema, usar diretamente os parâmetros de ordem obtidos nas simulações para detecção de transições de fase geralmente não é o caminho recomendado. Quantidades como susceptibilidade, calor específico e cumulante de Binder [41, 42] serão melhores indicadores de uma transição.

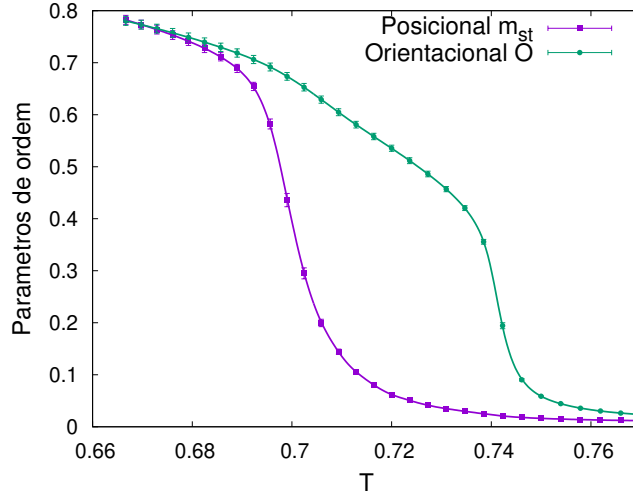


Figura 7 – Parâmetros de ordem vs temperatura para $k=1.0$, $B=1.97$ e $L=512$. Fase nemática encontra-se em $0.7 \lesssim T \lesssim 0.75$.

A susceptibilidade, uma medida de como um tipo de ordem do sistema responde a presença de um campo conjugado, é definida como

$$\chi_{\sigma} = \frac{\partial \sigma}{\partial h} = \frac{N}{T} [\langle \sigma^2 \rangle - \langle \sigma \rangle^2], \quad (4.4)$$

onde σ é um dos parâmetros de ordem do sistema - como no caso do J1-J2 temos dois parâmetros de ordem, teremos duas susceptibilidades: a posicional $\chi_{m_{st}}$ e a orientacional χ_{O} . As susceptibilidades são quantidades interessantes por possuírem não-analiticidades na temperatura crítica, divergindo em transições contínuas e sendo descontínua nas de primeira ordem. O comportamento singular durante a transição de fase também poderá ser observado no calor específico (4.5).

$$C_V = \frac{\partial E}{\partial T} = \frac{N}{T^2} [\langle e^2 \rangle - \langle e \rangle^2], \quad (4.5)$$

Porém, se olharmos os resultados da Figura 8 logo percebemos que estas medidas não divergem (assim como os parâmetros de ordem da Figura 7 não vão a zero como esperado, principalmente nas proximidades da transição de fase). Este resultado não deveria ser uma surpresa, afinal nas simulações de Monte Carlo estamos muito longe do limite termodinâmico. Na verdade, pelo comportamento analítico da função de partição \mathcal{Z} , uma transição de fase só poderia ocorrer num sistema com um número infinito de graus de liberdade (a fim de introduzir as não-analiticidades de uma transição). Dessa forma, por maior que fosse o tamanho linear L do sistema simulado ainda veríamos picos ao invés de divergências.

Então, num primeiro momento, efeitos de tamanho finito podem parecer um empecilho para a análise de dados. Porém mostraremos que eles carregam tanta informação quanto as divergências de volume infinito. A maioria (se não todas) das informações relevantes podem ser extraídas da evolução do comportamento termodinâmico com o

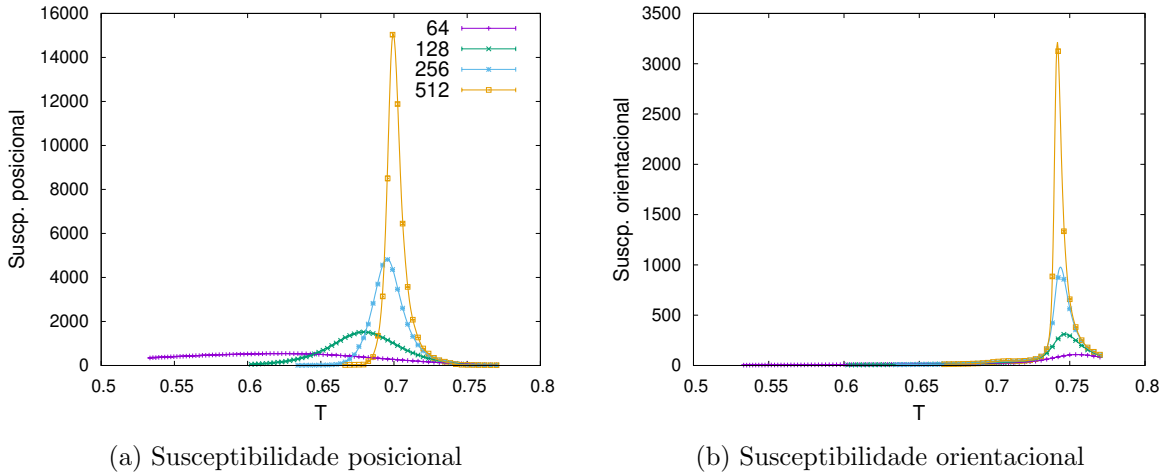


Figura 8 – Susceptibilidades em função da temperatura reduzida para 3 diferentes tamanhos lineares de rede com $B=1.97$ e $k=1.0$. Observa-se a tendência ao comportamento não-analítico com o aumento de L .

tamanho da rede. Se compararmos os resultados de simulações com diferentes volumes conseguimos observar alguma tendência no comportamento das quantidades à medida que nos aproximamos do limite termodinâmico, onde estaria presente o comportamento verdadeiro da transição de fase do modelo. Esta dependência no tamanho do sistema será elaborada matematicamente mais adiante neste capítulo.

Todavia, existem algumas quantidades universais que, em T_c , não dependem do tamanho do sistema. Estas quantidades, como o cumulante de Binder, U , e a razão ξ/L (onde ξ é o comprimento de correlação característico do sistema), são úteis para determinar os valores de T_c . O cumulante de Binder, por exemplo, é definido a partir da razão de Binder

$$R_2(\sigma) = \frac{\langle \sigma^4 \rangle}{\langle \sigma^2 \rangle^2}, \quad (4.6)$$

onde σ geralmente é um dos parâmetros de ordem do sistema. Para transições contínuas, esta razão é independente do tamanho do sistema em T_c (a menos de correções de tamanho finito subdominantes). Portanto, gráficos R_2 versus T para diferentes tamanhos de sistema apresentam curvas que se cruzam nas proximidades de T_c .

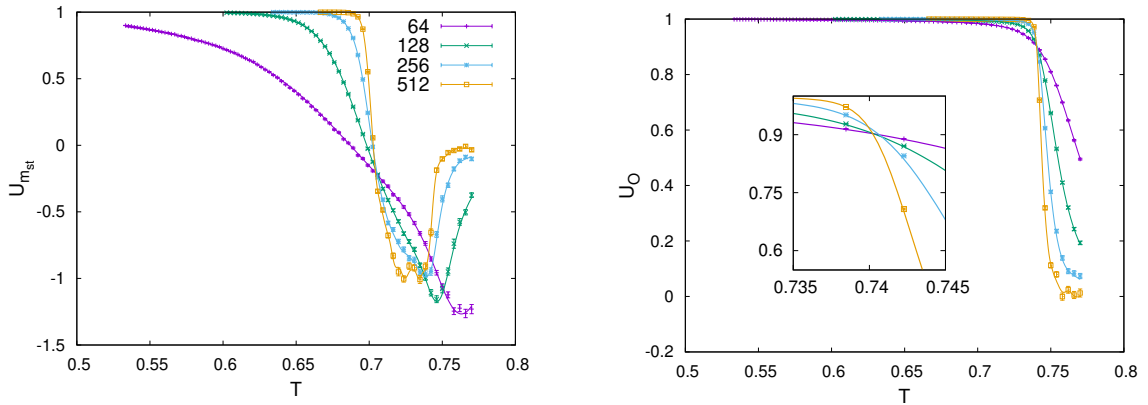
O cumulante de Binder em si é definido de tal maneira que: num estado ordenado $U \rightarrow 1$; e $U \rightarrow 0$ na fase mais simétrica. Com estes vínculos teremos que para a transição marcada pela magnetização staggered

$$U_m = 2 \left(1 - \frac{1}{2} R_2(m_{st}) \right), \quad (4.7)$$

enquanto para o parâmetro de ordem orientacional

$$U_O = \frac{3}{2} \left(1 - \frac{1}{3} R_2(O) \right). \quad (4.8)$$

Da mesma maneira que numa transição contínua R_2 é universal em T_c , U também assume o mesmo valor para diferentes tamanhos de rede. Neste tipo de transição o



(a) Cumulante posicional. Presença de um mínimo que se desloca em direção a T_c . (b) Cumulante orientacional. Cruzamento das curvas em T_c .

Figura 9 – Cumulantes de Binder em função da temperatura reduzida para 3 diferentes tamanhos lineares de rede com $B=1.97$ e $k=1.0$.

cumulante decresce monotonicamente com o aumento da temperatura (Figura 9b). Já para transições de primeira ordem, a presença de coexistência de fases faz U apresentar um comportamento não monotônico [43], desenvolvendo um pico negativo que se aproxima de T_c e se estreita conforme o tamanho do sistema é aumentado (Figura 9a). Estas características tornam o cumulante de Binder um bom estimador de T_c em transições contínuas e um importante indicador de transições descontínuas.

4.1 ANÁLISE DE ESCALONAMENTO FINITO E EXPOENTES CRÍTICOS

Na seção anterior, vimos que nossas simulações apresentaram um comportamento diferente por estarmos longe do limite termodinâmico. Para discutirmos o escalonamento de tamanho finito nas proximidades do ponto crítico em mais detalhe, primeiro devemos revisar alguns aspectos básicos de fenômenos críticos já no limite termodinâmico. Esta seção apresenta apenas alguns destes resultados e definições, portanto recomenda-se ao leitor interessado consultar algum dos livros padrões de fenômenos críticos (boas recomendações são os livros do Kardar [44], Stanley [45] e Cardy [46]) para uma abordagem mais completa.

Apesar de alguns resultados desta seção poderem ser aplicados a transições de primeira ordem (como indicadores deste tipo de transição), nosso foco neste capítulo são as transições contínuas, onde os expoentes críticos são bem definidos e universais. Neste caso, o comportamento crítico de algumas quantidades pode ser descrito, nas proximidades da transição de fase, pelos chamados expoentes críticos. Na universalidade ordinária esses expoentes críticos são tidos como universais e dependem apenas de algumas características gerais do sistema.

Mesmo antes do surgimento do grupo de renormalização já eram conhecidas relações

entre esses expoentes, de forma que estes não sejam todos independentes. Assim, podemos apresentar aqui apenas os mais importantes para a análise via simulações de Monte Carlo,

$$\begin{aligned}\xi &\sim |T - T_c|^{-\nu}, \\ \chi &\sim |T - T_c|^{-\gamma}, \\ C_v &\sim |T - T_c|^{-\alpha}, \\ m &\sim |T - T_c|^\beta,\end{aligned}\tag{4.9}$$

sendo que os demais podem ser obtidos através de algumas das diversas relações entre expoentes. Nas relações (4.9), ν , γ , α e β são os expoentes críticos relacionados com o comprimento de correlação, susceptibilidade, calor específico e magnetização (ou parâmetro de ordem), respectivamente.

4.1.1 A hipótese do escalonamento de tamanho finito

A premissa básica da teoria de escalonamento de tamanho finito [47] é a de que o comportamento de um sistema de tamanho linear L será consideravelmente diferente dos resultados de tamanho infinito somente quando o valor do comprimento de correlação ξ (do sistema infinito) é comparável com L . Assim, quando $L \gg \xi$, o comportamento observado deve ser igual ao de tamanho infinito, tornando o fato de termos um sistema finito irrelevante. Já para o caso $L \ll \xi$, é evidente que ξ não é mais o comprimento mais importante do sistema, mas sim L .

Para entender melhor a relação entre estes comprimentos característicos e as transições de fase podemos descrever o comportamento singular das quantidades (4.9) em termos do comprimento de correlação, invertendo a primeira das relações:

$$|T - T_c| \sim \xi^{-1/\nu}.\tag{4.10}$$

Então, de maneira direta, obtemos

$$\begin{aligned}\chi &\sim \xi^{\gamma/\nu}, \\ C_v &\sim \xi^{\alpha/\nu}, \\ m &\sim \xi^{-\beta/\nu}.\end{aligned}\tag{4.11}$$

Como dito anteriormente, se ξ é de fato o comprimento mais importante do sistema, as relações (4.10) e (4.11) continuam válidas. Porém, a partir do momento que o tamanho do sistema se torna comparável com ξ , as divergências das susceptibilidades e calor específico não podem mais existir em um sistema de tamanho finito. Assim, os picos que vemos nessas quantidades devem ser obtidos quando trocamos $\xi \rightarrow L$ nas relações (4.11),

$$\begin{aligned}\chi_{max} &\sim L^{\gamma/\nu}, \\ C_{v(max)} &\sim L^{\alpha/\nu}.\end{aligned}\tag{4.12}$$

Nesta mesma direção, podemos usar a equação (4.10) para descobrir qual a tendência da pseudo temperatura de transição $T_c(L)$, com L :

$$|T_c(L) - T_c(\infty)| \sim L^{-1/\nu}. \quad (4.13)$$

Estes resultados seguem de uma hipótese mais geral, a hipótese de escalonamento de tamanho finito [47]. Nela, um observável que é singular em T_c (não necessariamente divergente) deve ter a forma

$$Q(t, L) = L^{\sigma/\nu} f(\xi/L), \quad (4.14)$$

ou, equivalentemente,

$$Q(t, L) = L^{\sigma/\nu} g(tL^{1/\nu}), \quad (4.15)$$

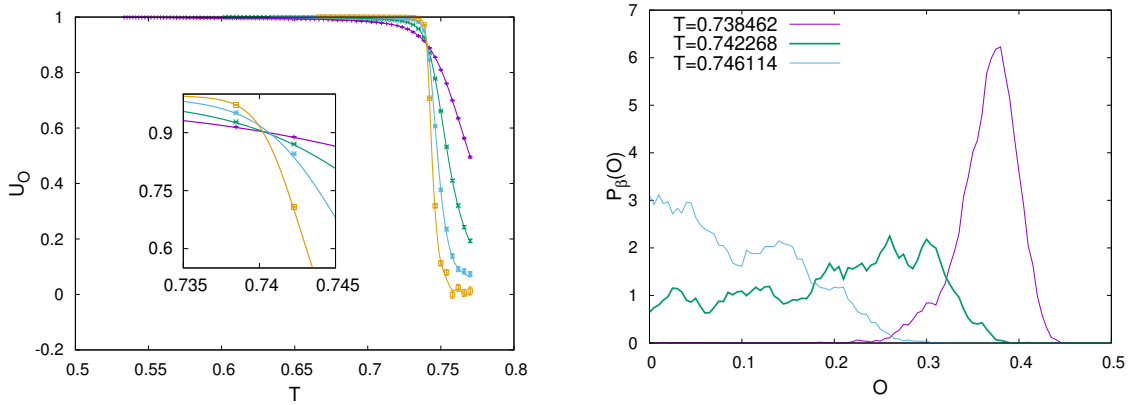
onde $t = T - T_c$ e σ é o expoente crítico relacionado com a quantidade Q .

4.2 NATUREZA DAS TRANSIÇÕES DE FASE

Como vimos recentemente, efeitos interessantes acontecem na temperatura de transição, como por exemplo a responsividade infinita a perturbações de um campo externo. Porém, dependendo do tipo de transição que ocorre no sistema, outras características importantes podem surgir. Nas transições de primeira ordem, por exemplo, vemos pulos descontínuos no parâmetro de ordem, bem como em outras quantidades, e a presença de coexistência das fases na região próxima a transição. Já nas transições contínuas outros detalhes chamam nossa atenção. Nesses casos, o comprimento de correlação diverge e as divergências que ocorrem obedecem leis de potência na região próxima à T_c . Portanto, tão importante quanto detectar as transições de fase de um modelo é identificar qual a natureza dessas transições, a fim de estabelecer quais serão os comportamentos interessantes de serem estudados em cada um dos casos.

Nas simulações de Monte Carlo, uma das mais importantes características das transições de primeira ordem, a coexistência entre fases, se manifesta através da geração de dois tipos de configurações, correspondentes às duas fases distintas existentes logo acima e abaixo da temperatura de transição. Portanto, a presença de múltiplos picos na distribuição de energia e parâmetros de ordem é um forte indicador de uma transição de primeira ordem.

Pelo mesmo motivo, os cumulantes de Binder (equações (4.7) e (4.8)) também são bons indicadores da natureza de uma transição de fase. Quando mais de um pico existe na distribuição do parâmetro de ordem o cumulante assume valores negativos, implicando que neste tipo de transição U tenha um mínimo negativo que se aproxima de T_c com o aumento do tamanho do sistema. Embora a distribuição do parâmetro de ordem contenha mais informação sobre a transição, localizar uma região onde o cumulante de Binder seja



(a) Cumulante de Binder orientacional.

(b) Distribuição do parâmetro de ordem orientacional para $L=512$.

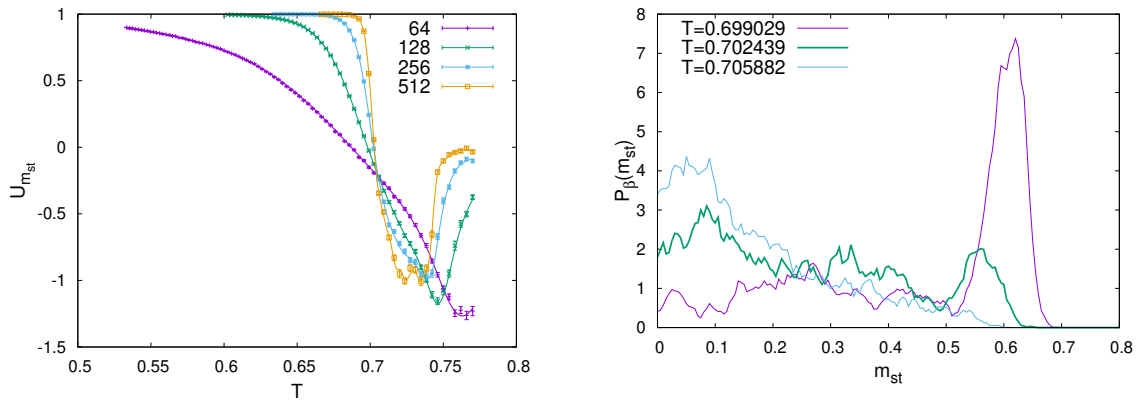
Figura 10 – Comportamentos típicos de uma transição contínua. Cumulante de Binder com comportamento monotônico e ausência de múltiplos picos na distribuição do parâmetro de ordem. Figuras obtidas com $h=1.97$.

negativo é um boa maneira prática de analisar esta transição. Assim, ambos indicadores serão importantes na caracterização de uma transição de fase.

A Figura 10 mostra o cumulante de Binder e histograma do parâmetro de ordem para a transição nemática-paramagnética. Apenas um pico é observado em 10b e os cumulantes em sistemas de tamanhos diferentes se cruzam em T_c . Este resultado é compatível com o encontrado na aproximações de aglomerados, que previa uma transição contínua para a fase paramagnética saturada. A mesma análise para a transição faixas-paramagnética (Figura 11) nos faz acreditar que esta transição seja de primeira ordem. Porém estas duas medidas não serão suficientes para garantir uma transição descontínua. Isto porque alguns modelos, como o Potts de 4 estados [21], Ashkin-Teller [20] e inclusive o J1-J2 [4], apresentam comportamento de pseudo primeira ordem, de forma que algumas de suas transições aparentam ser de primeira ordem quando na verdade são transições contínuas [48]. Dessa maneira, devemos ter cuidado para que comportamentos de pseudo-primeira ordem não sejam interpretados como transições de primeira ordem de fato. Para isso, vamos mostrar um novo indicador, mais forte, de transições descontínuas.

As descontinuidades de uma transição de primeira ordem desenvolvem-se no limite de tamanho infinito, geralmente de acordo com leis de potência que também podem ser estudadas pelas ferramentas do escalonamento de tamanho finito. Os expoentes associados com essas leis de potência, no geral, são trivialmente relacionados com a dimensionalidade do sistema [49, 50]. Por exemplo, o calor específico diverge como L^d numa transição de primeira ordem. Já o deslocamento da pseudo temperatura crítica escala com L^{-d} , ao invés de $L^{-1/\nu}$ como numa transição contínua.

A transição faixas-nemática, embora demonstre alguns comportamentos de transições de primeira ordem, não pode ser estudada pelo escalonamento do calor específico. Como vemos na Figura 12, o segundo pico do calor específico começa a aparecer apenas para



(a) Cumulante de Binder posicional.

(b) Distribuição do parâmetro de ordem posicional para $L=512$.

Figura 11 – Comportamentos típicos de uma transição descontínua. Cumulante de Binder com valores negativos e presença de coexistência de dois estados na distribuição do parâmetro de ordem para $T=0.702$. Figuras obtidas com $h=1.97$.

tamanhos maiores que 256, de modo que seja necessário ir para tamanhos ainda maiores para extrair o comportamento deste novo máximo.

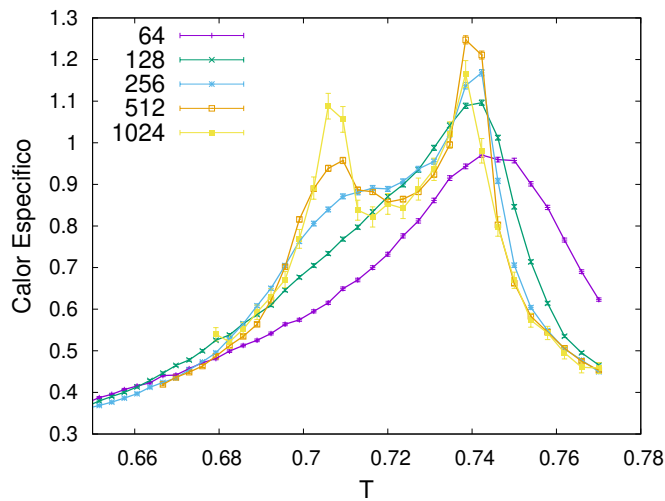


Figura 12 – Calor específico versus temperatura para diferentes redes $L \times L$ num campo externo $h=1.97$. Observa-se a estrutura de duplo pico para $L > 256$.

4.3 DIAGRAMA DE FASES

Na aproximação de aglomerados, a fase nemática foi encontrada apenas quando campos externos estavam presentes. Portanto, nossa investigação tem como objetivo procurar e estudar esta nova fase na região prevista pelos resultados de Guerrero, Stariolo e Almarza[11]. No trabalho original a fase nemática foi estudada para $k = |J_2|/J_1 = 0.6$ e $k = 1.0$, mas por motivos de otimização computacional (Seção 3.3.2.1) apenas o caso $k = 1.0$ foi estudado nestas simulações.

Como estabelecido anteriormente, utilizar diretamente os parâmetros de ordem para um estudo quantitativo da fase nemática geralmente não é a melhor abordagem. Ao invés disto, usaremos os picos das susceptibilidades como estimativas das temperaturas críticas. Como o processo para extrair os valores “exatos” do limite termodinâmico pode ser, e neste caso é, muito dependente de tempo computacional, ao invés de fazermos uma análise de escalonamento finito, iremos aproximar os valores verdadeiros de T_c como o valores das temperaturas dos picos das susceptibilidades para redes 256×256 .

Porém, mesmo sem fazer uma análise precisa dos valores de T_c , é importante observar que a região da fase nemática se estreita com o aumento do tamanho da rede. Esta tendência é vista através do comportamento das susceptibilidades (Figura 13), que tem seus picos deslocando-se em direções opostas.

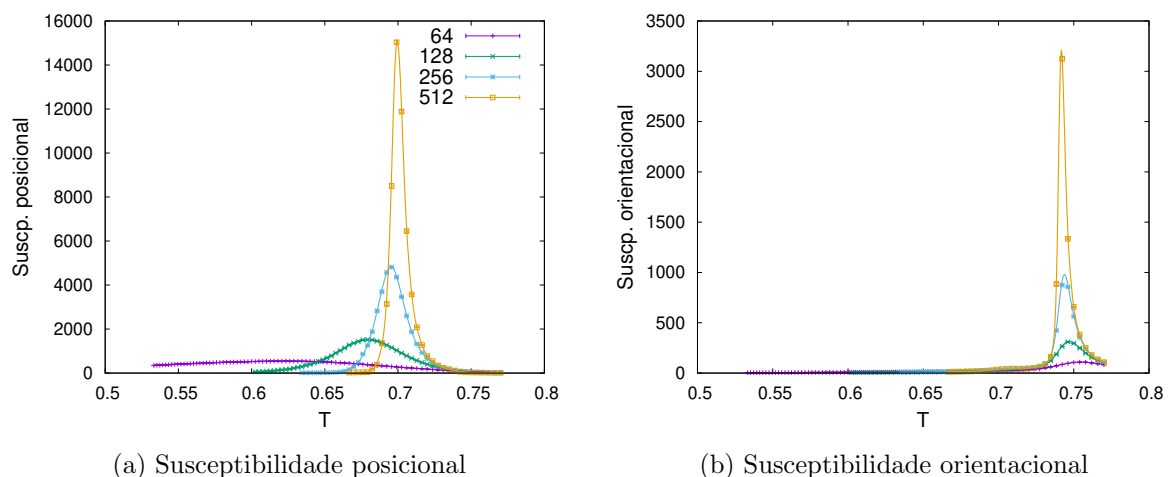


Figura 13 – Susceptibilidades em função da temperatura para diferentes tamanhos lineares de rede com $h=1.97$ e $k=1.0$. Observa-se a tendência ao comportamento não-analítico com o aumento de L .

Assim, o diagrama de fases da Figura 14, obtido fixando $k = 1.0$ e varrendo os parâmetros campo e temperatura em busca de transições de fase, na verdade apresenta uma região de fase nemática levemente maior do que a do limite termodinâmico.

4.3.1 Ausência de reentrância

Uma interessante característica da fase nemática encontrada através do método do aglomerado variacional é a presença de comportamento reentrante. Como vimos na Figura 4, para certos valores do campo externo h ($h \in (2.0, 2.1)$), podemos fazer um resfriamento de uma fase desordenada para uma fase com ordem orientacional e ainda voltar a fase desordenada, se diminuirmos ainda mais a temperatura. Esse comportamento é encontrado em vários modelos, inclusive no modelo J1-J2 com ambas interações antiferromagnéticas. Todavia, na abordagem de simulações de Monte Carlo não observamos a existência de uma fase nemática para valores maiores que o campo crítico h_c .

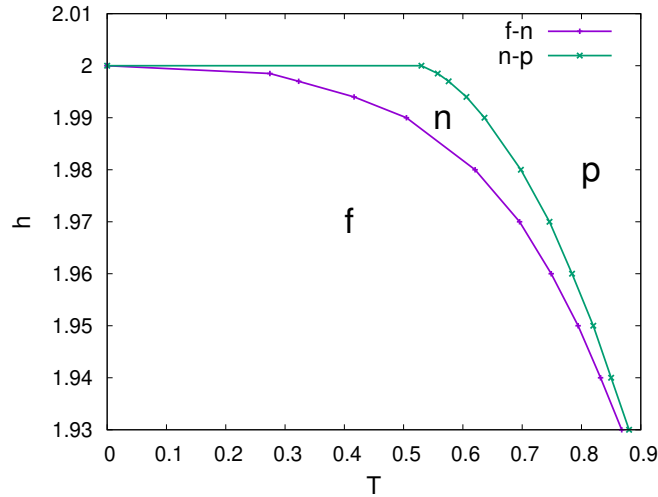


Figura 14 – Diagrama de fases para o caso $k = |J_2|/J_1 = 1.0$. Temperaturas de transição obtidas a partir do pico das susceptibilidades para $L=256$.

No caso $k = 1.0$ a fase nemática sobrevive às tendências de escalonamento de tamanho finito até $h_c = 2.0$, onde existe numa região $T \in [0, 0.52]$. A Figura 15 demonstra o comportamento dos parâmetros de ordem para diferentes tamanhos de rede. Como esperado, nesta região a magnetização staggerred vai a zero com $N^{-0.5}$ enquanto o parâmetro de ordem orientacional vai a zero para $T > T_c$ 0.52 e mantém-se com valor finito nas temperaturas abaixo de T_c .

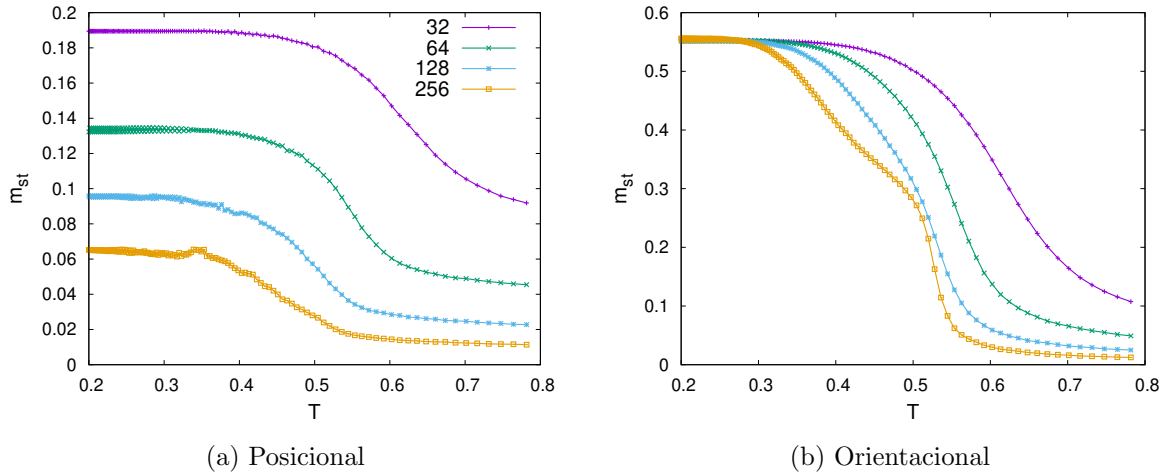


Figura 15 – Parâmetros de ordem em função da temperatura reduzida para 4 diferentes tamanhos lineares de rede com $B=2.0$ e $k=1.0$. (a) Observa-se a tendência à ausência de ordem posicional com o aumento de L . (b) Ordem orientacional é preservada a temperaturas abaixo de $T < T_c$ 0.52.

A presença da fase nemática até $h = h_c$, juntamente com os resultados do aglomerado variacional, nos levariam a acreditar que para campos maiores, e suficientemente próximos de h_c , encontraríamos a fase com ordem orientacional. Porém, se pegarmos o caso $h = 2.002$, as simulações de Monte Carlo mostram total falta de ordem no sistema. Na Figura 16

vemos que ambos parâmetros de ordem diminuem com o aumento do tamanho.

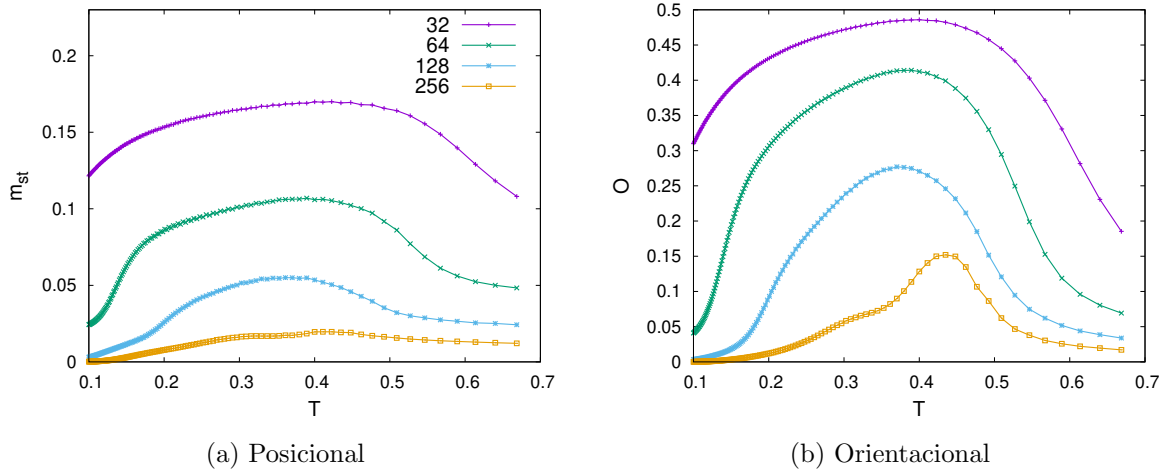


Figura 16 – Parâmetros de ordem em função da temperatura reduzida para 4 diferentes tamanhos lineares de rede com $B=2.002$ e $k=1.0$. Observa-se a tendência à total ausência de ordem com o aumento de L .

Apesar do modelo, a tamanho finito, parecer ter um comportamento reentrante, afinal o parâmetro de ordem orientacional é significativamente diferente de zero para alguns valores de L , a organização do sistema não é forte o suficiente para chamarmos o estado do sistema de fase nemática. A presença de ordem orientacional, neste caso, pode ser comparada as ilhas de magnetização no modelo de Ising, de forma que a fase observada ainda seja um paramagneto saturado (porém agora com algumas ilhas de spins organizados em uma direção preferencial).

4.4 FUNÇÃO DE CORRELAÇÃO

Para entendermos um pouco melhor a estrutura espacial das fases do modelo J1-J2, em especial a fase nemática, utilizaremos a função de correlação espacial,

$$C_q(\mathbf{r}) = \langle q(\mathbf{r})q(0) \rangle, \quad (4.16)$$

onde $\mathbf{r} = r\hat{\alpha}$, com $\alpha = x, y$, e q é a quantidade a ser estudada. Como a função de correlação espacial é uma medida de ordem do sistema, vamos analisar duas funções de correlação: a spin-spin, $C_S(\mathbf{r})$, para averiguar a ordem posicional, e a do parâmetro de ordem orientacional, $C_O(\mathbf{r})$.

Iremos também determinar a funcionalidade do decaimento dessas quantidades, e para isso utilizaremos a função de correlação conectada,

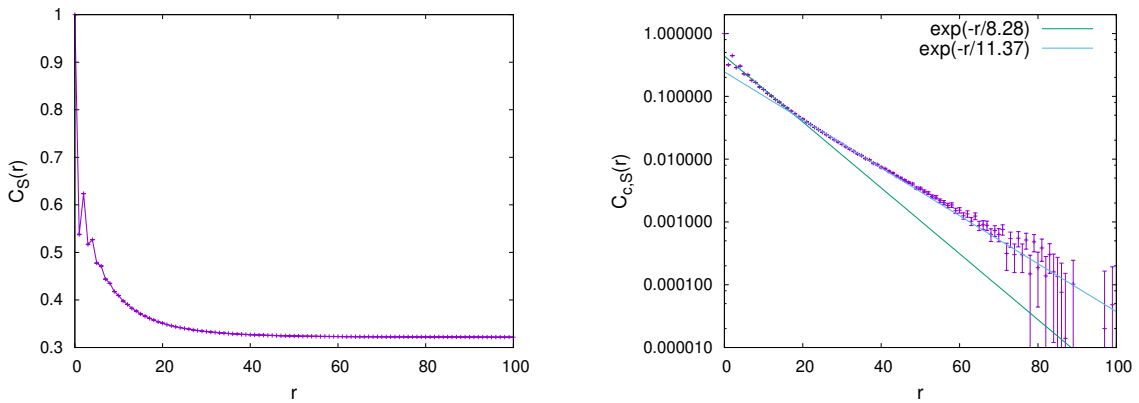
$$\begin{aligned} C_{c,q}(\mathbf{r}) &= \langle (q(\mathbf{r}) - \langle q(\mathbf{r}) \rangle) (q(0) - \langle q(0) \rangle) \rangle \\ &= \langle q(\mathbf{r})q(0) \rangle - \langle q(0) \rangle^2 \end{aligned} \quad (4.17)$$

a qual mede a correlação não entre as quantidades q mas entre suas flutuações.

As próximas subseções mostram os resultados obtidos para o decaimento dessas funções nas configurações paramagnética e de faixas e dentro da fase nemática.

4.4.1 Fase paramagnética saturada

Como em altas temperaturas o sistema não possui qualquer ordem esperamos ver um decaimento rápido de suas funções de correlação. A Figura 17a, porém, nos mostra que a correlação spin-spin não decai a zero, mas sim a um valor constante. Todavia, esta magnetização aparente apenas reflete a presença de um campo magnético externo, responsável por quebrar a simetria do sistema e preferenciar a orientação dos spins numa certa direção, tornando o sistema levemente magnetizado. Esse decaimento, como visto na Figura 17b, acontece de acordo com duas exponenciais, uma em cada regime de distâncias.



(a) Função de correlação spin-spin. Decaimento para uma constante proveniente da presença de um campo externo. A ordem para este caso ainda é de curto alcance. (b) Função de correlação spin-spin conectada. Decaimento exponencial com dois regimes distintos. As duas retas mostram o melhor fit exponencial para cada um dos casos.

Figura 17 – Decaimento da função de correlação spin-spin para $L=512$, $h=1.97$, $T=0.774194$.

Para a função de correlação orientacional, vemos na Figura 18 que seu decaimento é de fato exponencial, possuindo também dois regimes de exponenciais. Um da parte dominante da função de correlação, entre $0 < r \lesssim 20$, e a cauda, para $r > 20$. Vale notar também, que as duas direções principais do modelo são equivalentes na fase desordenada, por isso não se faz distinção entre elas nas Figuras 17 e 18.

Portanto, apesar da correlação spin-spin acusar uma pequena magnetização, a fase paramagnética saturada possui ordem de curto alcance com dois regimes de decaimento exponencial aparentes.

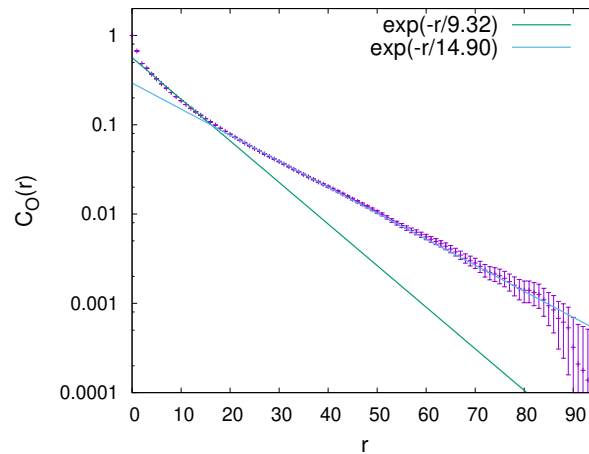
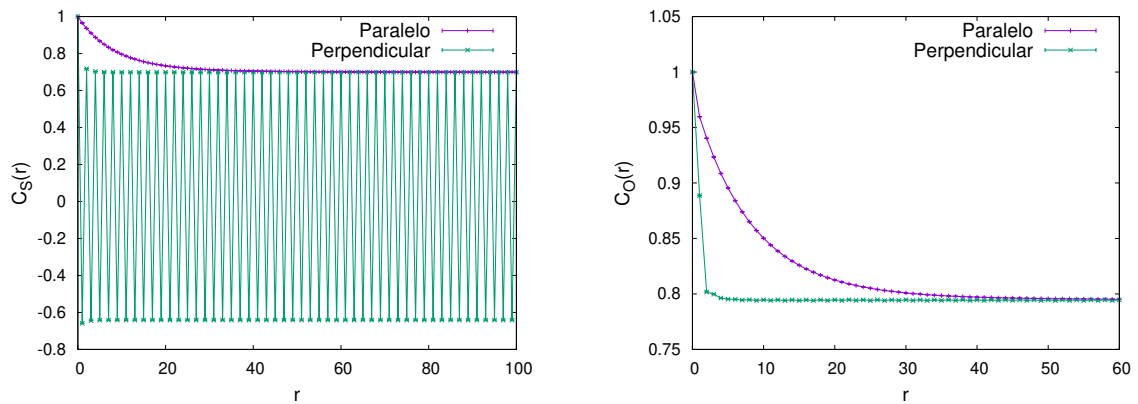


Figura 18 – Função de correlação orientacional. Decaimento exponencial com dois regimes distintos. As duas retas mostram o melhor fit exponencial para cada um dos casos.

4.4.2 Fase de faixas

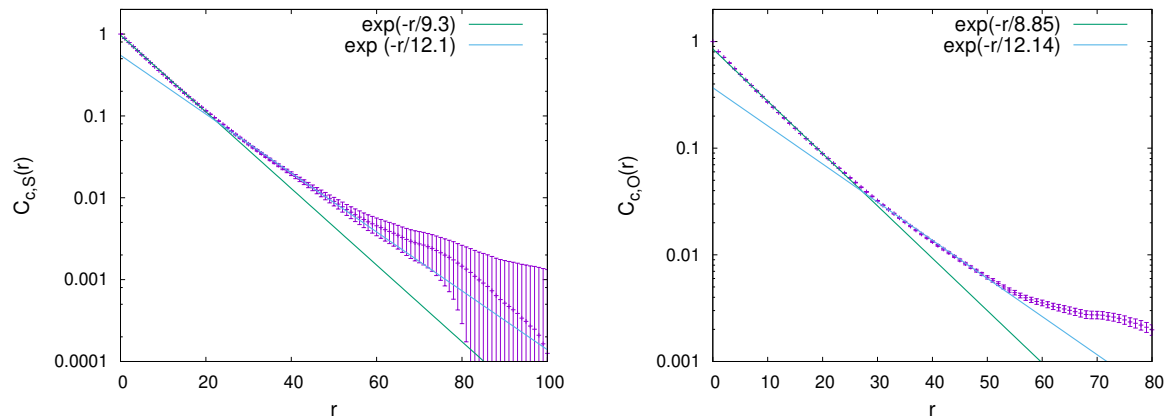
A fase de faixas, sendo a fase mais ordenada do nosso modelo, reflete sua ordem através da Figura 19, onde todas as suas correlações decaem para um valor constante. Isto indica que temos uma ordem de longo alcance nesta fase.



(a) Função de correlação spin-spin. Decaimento para uma constante nas duas direções principais (na direção perpendicular as faixas existe uma oscilação devido a presença de colunas com magnetização alternada). (b) Função de correlação orientacional. Decaimento para uma constante nas duas direções principais.

Figura 19 – Decaimento das funções de correlação para $L=512$, $h=1.97$, $T=0.651584$.

A Figura 20 apresenta o decaimento das funções correlação no regime de baixas temperaturas na direção paralela as faixas. Ambas correlações apresentaram decaimento exponencial. Os decaimentos na direção perpendicular as faixas são rápidos demais para serem analisados.

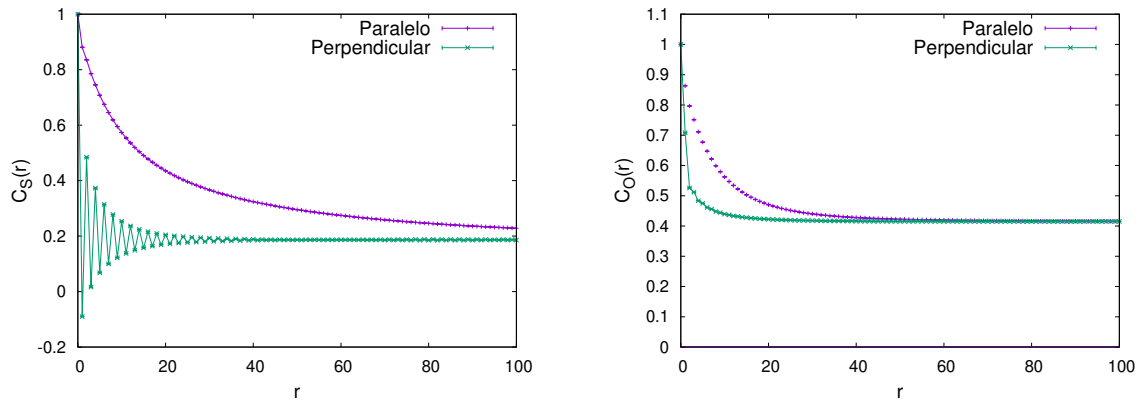


(a) Função de correlação spin-spin conectada. Decai- (b) Função de correlação orientacional conectada. De-
 mento exponencial com dois regimes distintos. caimento exponencial com dois regimes distintos.

Figura 20 – Decaimento das funções de correlação conectada para $L=512$, $h=1.97$, $T=0.651584$.
 As retas mostram o melhor fit para cada um dos casos.

4.4.3 Fase nemática

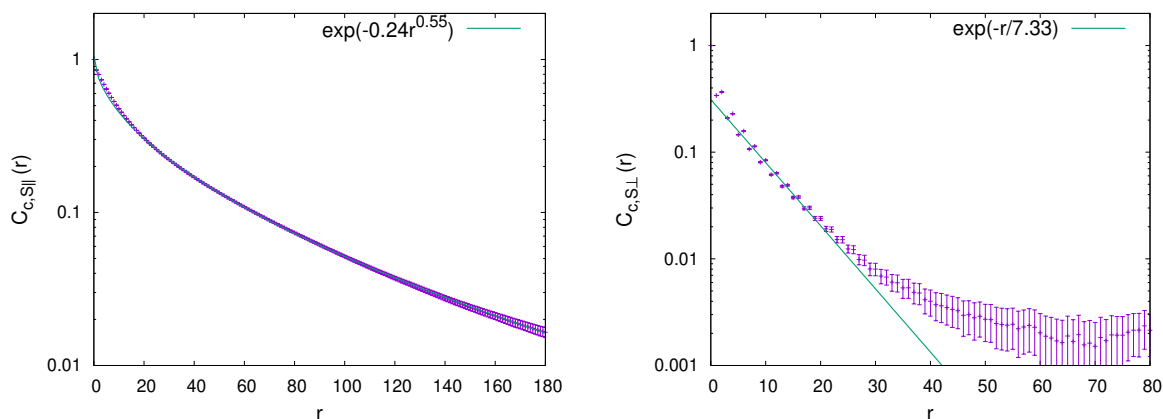
Como esperado, dentro da fase nemática temos um decaimento para uma constante (Figura 21b) na correlação orientacional. O decaimento da correlação spin-spin (Figura 21a), assim como em altas temperaturas, sofre uma forte interferência proveniente da existência de um campo externo. Assim, fica claro que a fase nemática possui ordem orientacional de longo alcance e ordem posicional de curto alcance.



(a) Função de correlação spin-spin. Decaimento para (b) Função de correlação orientacional. Decaimento
 uma constante proveniente da presença de um para uma constante nas duas direções principais.
 campo externo. A ordem para este caso ainda é
 de curto alcance.

Figura 21 – Decaimento das funções de correlação para $L=512$, $h=1.97$, $T=0.727273$ nas direções
 paralela e perpendicular as faixas.

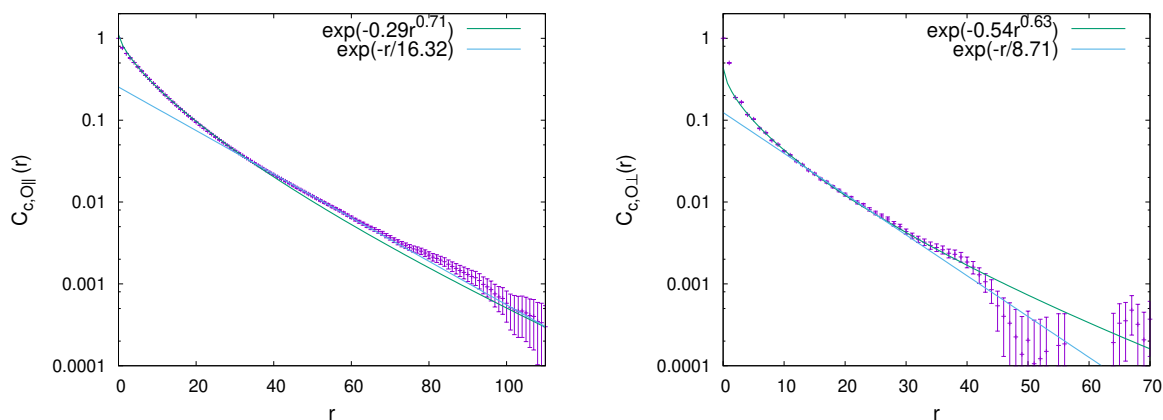
Analisando agora as funções conectadas, o decaimento da Figura 22a é mais lento do que o decaimento presente na figura 22b, revelando a presença de domínios anisotrópicos na fase nemática, os quais são maiores na direção das faixas.



(a) Função de correlação spin-spin conectada na direção paralela as faixas. Decaimento segundo uma *stretched exponential*.
 (b) Função de correlação spin-spin conectada na direção perpendicular as faixas. Decaimento exponencial representado pelo fit.

Figura 22 – Decaimento das funções de correlação spin-spin conectada para $L=512$, $h=1.97$, $T=0.727273$ nas direções paralela e perpendicular as faixas.

Para o caso das flutuações do parâmetro de ordem orientacional percebemos novamente a existência de domínios anisotrópicos na fase nemática. Na Figura 23 vemos que o sistema se descorrelaciona mais rapidamente na direção perpendicular as faixas.



(a) Função de correlação orientacional conectada na direção paralela as faixas. As curvas representam os melhores fits para os dados.
 (b) Função de correlação orientacional conectada na direção perpendicular as faixas. As curvas representam os melhores fits para os dados.

Figura 23 – Decaimento das funções de correlação orientacional conectada para $L=512$, $h=1.97$, $T=0.727273$ nas direções paralela e perpendicular as faixas.

4.5 EXPOENTES CRÍTICOS

Na seção 4.1.1 vimos que é possível descrever matematicamente a tendência singular que os sistemas sofrendo uma transição de fase apresentam quando se aproximam do limite termodinâmico. Naquele momento estávamos interessados apenas em encontrar uma maneira formal de explicar as evidências de nossas simulações. Mas como citado na mesma

seção, das relações que encontramos conseguimos extrair os chamados expoentes críticos, importantes para definirmos a qual classe de universalidade o sistema pertence.

Dentro de cada classe, todas as transições de fase tem comportamento idêntico na região crítica, apenas o nome das variáveis são diferentes. Dessa forma, é muito mais conveniente estudar modelos do tipo Ising do que uma hamiltoniana complicada. Portanto, para determinar qual a classe de universalidade do modelo J1-J2 com campo externo aplicado, vamos tentar encontrar alguns de seus expoentes críticos a seguir.

4.5.1 Análise de escalonamento finito

4.5.1.1 Máximo da susceptibilidade

O método do máximo das susceptibilidades é um dos mais tradicionais meios de encontrar expoentes críticos. Ele segue diretamente da observações feitas na seção 4.1.1, de onde utilizaremos as equações (4.12) e (4.13) para investigar os expoentes ν e γ (o expoente α também poderia, a princípio, ser encontrado diretamente por essa metodologia, porém como α sempre é um valor pequeno, tamanhos maiores são necessários para ver o verdadeiro comportamento assintótico).

A Figura 24 apresenta o escalonamento da susceptibilidade posicional. Utilizando o método dos múltiplos histogramas conseguimos ter uma razoável estimativa de onde encontram-se os máximos das curvas dos diferentes tamanhos de sistema.

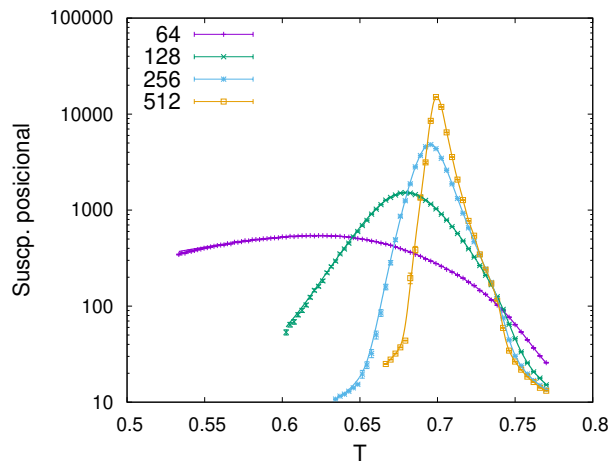
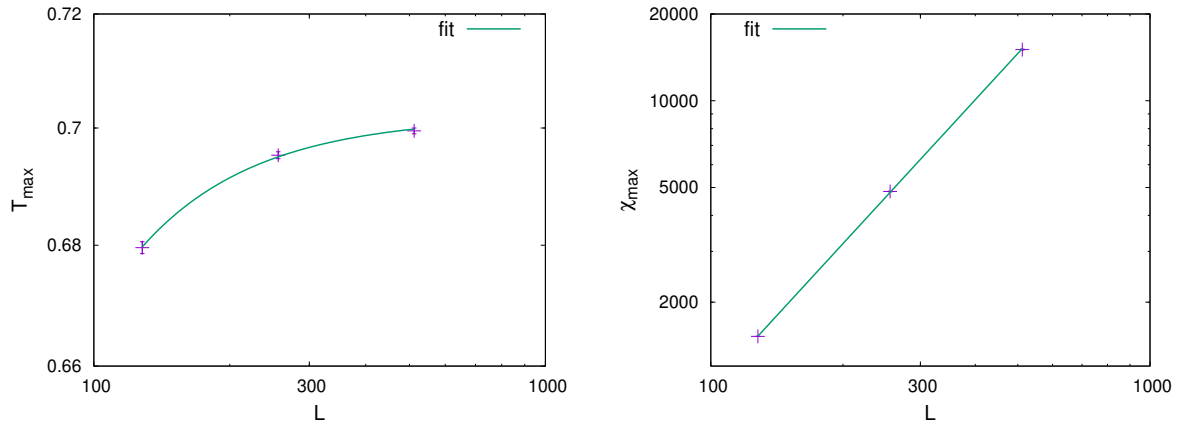


Figura 24 – Susceptibilidade posicional para diferentes sistemas $L \times L$ num campo externo $h=1.97$.

Assim, com os valores da temperatura na qual ocorre o pico (T_{max}) e o valor da susceptibilidade máxima (χ_{max}), é possível fitar tais pontos de acordo com as equações (4.13) e (4.12), respectivamente. O resultado de tais fits encontram-se na Figura 25. Do fit presente na Figura 25a, encontramos que $T_{max} = 0.7399 + aL^{-1.67 \pm 0.09}$. Este resultado é interessante pois o expoente, apesar de próximo, não igual a $d = 2$, o resultado esperado caso a transição fosse descontínua. Porém como vimos no calor específico da Figura 12, o

comportamento crítico da transição faixas-nemática parece se tornar mais aparente para tamanhos de sistema maiores. Portanto, talvez com dado de tamanhos maiores seja possível encontrar o comportamento L^{-d} esperado para o escalonamento da pseudo temperatura crítica.



(a) Posição do máximo da susceptibilidade posicional em função do tamanho linear do sistema. (b) Valor máximo da susceptibilidade posicional em função do tamanho linear do sistema.

Figura 25 – Escalonamento de quantidades relacionadas com a susceptibilidade posicional. Dados obtidos a partir da Figura 24.

Já o fit dos dados presentes na Figura 25b é $\chi_{max} \sim L^{1.66 \pm 0.01}$. Este é outro resultado interessante, uma vez que ele parece contraditório com a ideia de uma transição descontínua. A susceptibilidade parece divergir no limite termodinâmico, uma característica de transições contínuas. Como no caso de uma transição de primeira ordem o esperado é que a susceptibilidade seja uma cúspide (tenha um máximo finito), talvez os efeitos de tamanho finito sejam realmente forte demais para os tamanhos analisados, de forma que com o aumento do sistema seja possível ver mudar para um regime onde seja possível ver esse $\chi_{max}(L \rightarrow \infty)$.

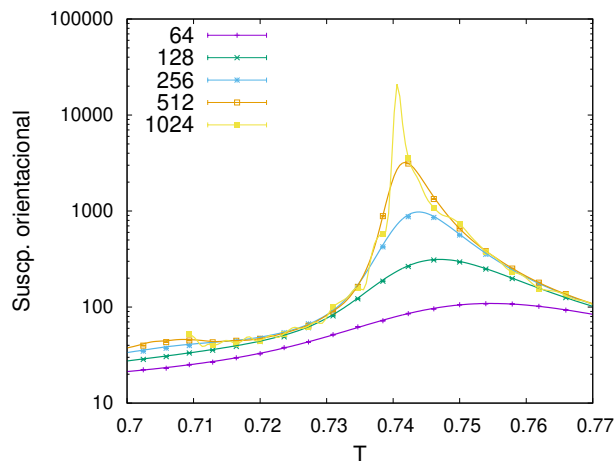
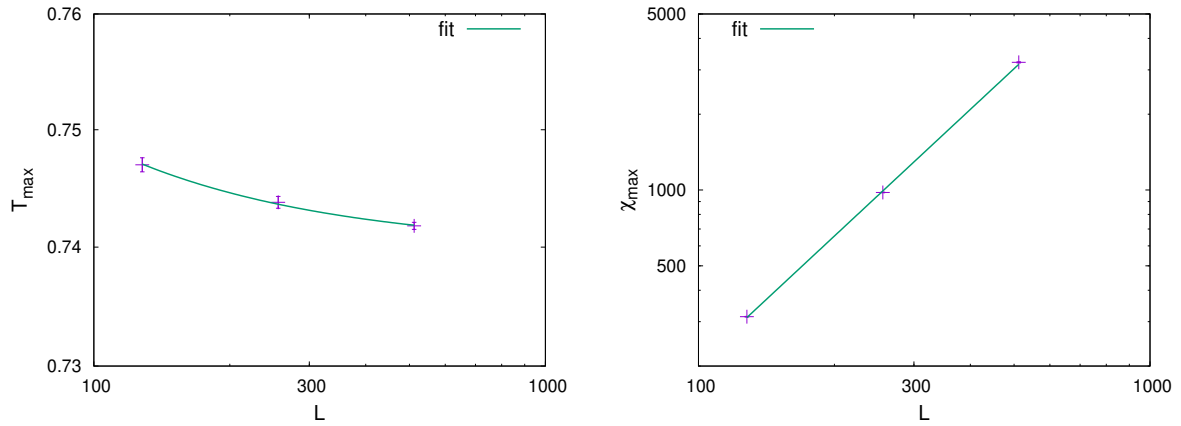


Figura 26 – Susceptibilidade orientacional para diferentes sistemas $L \times L$ num campo externo $h=1.97$.

O mesmo procedimento pode ser feito também com a susceptibilidade orientacional (Figura 26). Dos dados presentes nas figuras 27a e 27b conseguimos extrair os expoentes $1/\nu = 0.93 \pm 0.05$ e $\gamma/\nu = 1.67 \pm 0.03$. Estes expoentes críticos estão muito próximos a universalidade de Ising, onde $1/\nu = 1.0$ e $\gamma/\nu = 1.75$.



(a) Posição do máximo da susceptibilidade orientacional em função do tamanho linear do sistema. (b) Valor máximo da susceptibilidade orientacional em função do tamanho linear do sistema.

Figura 27 – Escalonamento de quantidades relacionadas com a susceptibilidade orientacional. Dados obtidos a partir da Figura 26.

Utilizando então a hipótese de escalonamento de tamanho finito, podemos reescalar a temperatura e susceptibilidade para colapsar as diferentes curvas em uma só. Esse efeito pode ser visto na Figura 28, onde os valores dos expoentes críticos γ e ν são os mesmos encontrados pelo método do máximo das susceptibilidades.

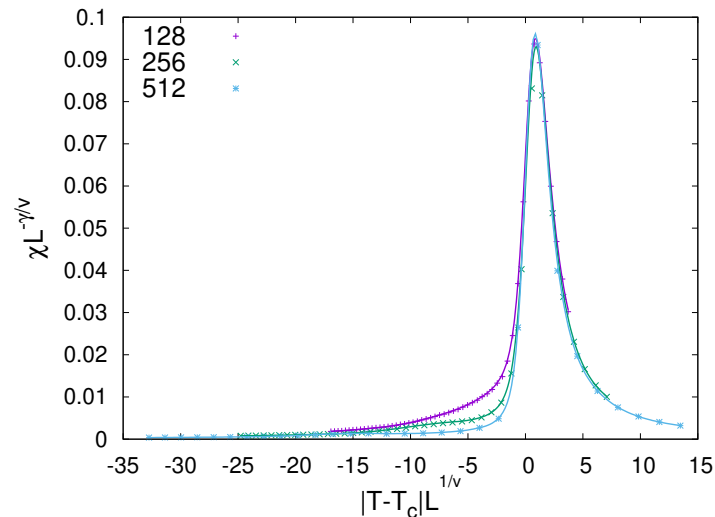


Figura 28 – Colapso das susceptibilidades (orientacional) de tamanhos diferentes. Os dados foram reescalados usando os valores dos expoentes encontrados na análise de escalonamento finito e $T_c = 0.7399$.

4.5.1.2 Método do quociente

Um outro método para se medir expoentes críticos vem diretamente do ansatz da análise de escalonamento finito:

$$O(T, L) = L^{\sigma/\nu} [f(\xi(T, L)/L) + \mathcal{O}(L^{-\omega})], \quad (4.18)$$

de onde o comportamento crítico $t^{-\sigma}$ é esperado da quantidade O e ω é o primeiro expoente de correção de escala.

Como não conhecemos a função de escala $f(\xi/L)$ vamos medir o quociente

$$Q_O = \frac{O(T, sL)}{O(T, L)} = s^{\sigma/\nu} \frac{f(\xi(T, sL)/(sL))}{f(\xi(T, L)/L)} = F_O[\xi(T, L)/L; s], \quad (4.19)$$

onde s é um valor de escala (geralmente igual a 2), na esperança de conseguirmos eliminar essa dependência desconhecida.

Assim, como na transição de fase temos que,

$$\xi(T_c^*, L)/L = \xi(T_c^*, sL)/(sL), \quad (4.20)$$

ou alternativamente,

$$U(T_c^*, L) = U(T_c^*, sL), \quad (4.21)$$

podemos estimar o expoente σ via o quociente de O em tamanhos diferentes, ie.,

$$s^{\sigma/\nu} = \frac{O(T_c^*, sL)}{O(T_c^*, L)} + \mathcal{O}(L^{-\omega}). \quad (4.22)$$

Para encontrarmos os expoentes críticos através deste método, vamos definir o comprimento de correlação como

$$\xi_O(T, L) = \frac{1}{2 \sin(\pi/L)} \sqrt{\frac{\hat{O}(\mathbf{K})}{\hat{O}(\mathbf{K}_1)} - 1}, \quad (4.23)$$

onde \hat{O} é a transformada de Fourier da função de correlação não conectada do parâmetro de ordem orientacional. Para este caso, temos $\mathbf{K} = (0, 0)$, que é o vetor de onda dominante da correlação. O vetor \mathbf{K}_1 representa os vetores de onda mais próximos de \mathbf{K} , isto é, $\mathbf{K}_1 = (2\pi/L, 0), (0, 2\pi/L)$.

Na Figura 29 conseguimos ver o caráter universal da razão ξ_O/L na transição de fase. Para esta transição $T_c = 0.740$ e $\xi_O(T_c, L) = 1.00$.

Voltando ao método do quociente, podemos começar encontrando a função escala de tamanho finito F_ξ . A Figura 30 mostra o que deveria ser esta função de escala, porém percebemos que as curvas de diferentes tamanhos não colapsam em uma única curva. De fato, dados provenientes de $L = 64$ já se mostraram ruins para a análise de escalonamento finito, portanto tamanhos maiores serão necessários para uma boa estimativa dos expoentes.

Ainda assim, na tentativa de estimar os expoentes γ e ν e ilustrar o método, a Figura 31 mostra como foram obtidos os valores destes expoentes críticos. Como podemos

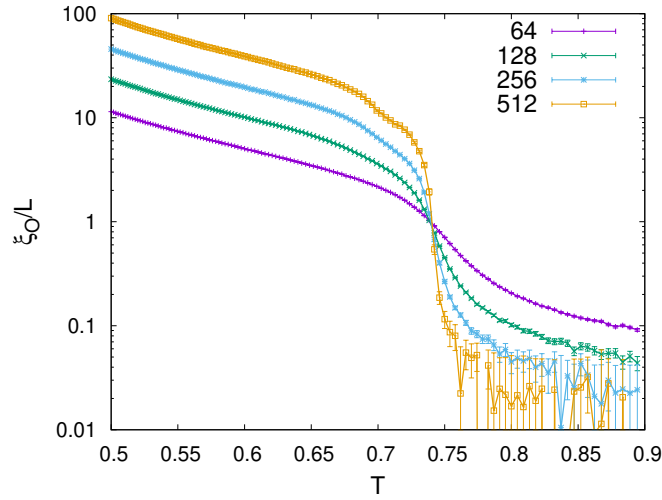


Figura 29 – Comprimento de correlação em função da temperatura para $h=1.97$. Os diferentes tamanhos de sistema se cruzam em $T_c = 0.740$.

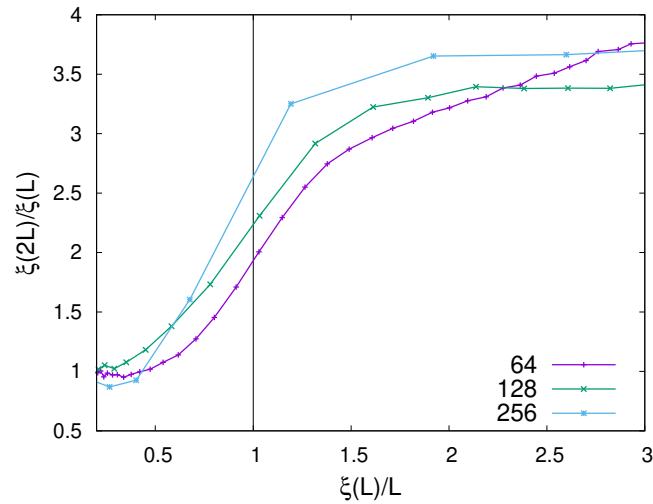


Figura 30 – Quociente do comprimento de correlação para $h=1.97$. As curvas representam a função de escala F_ξ para os diferentes tamanhos de sistema.

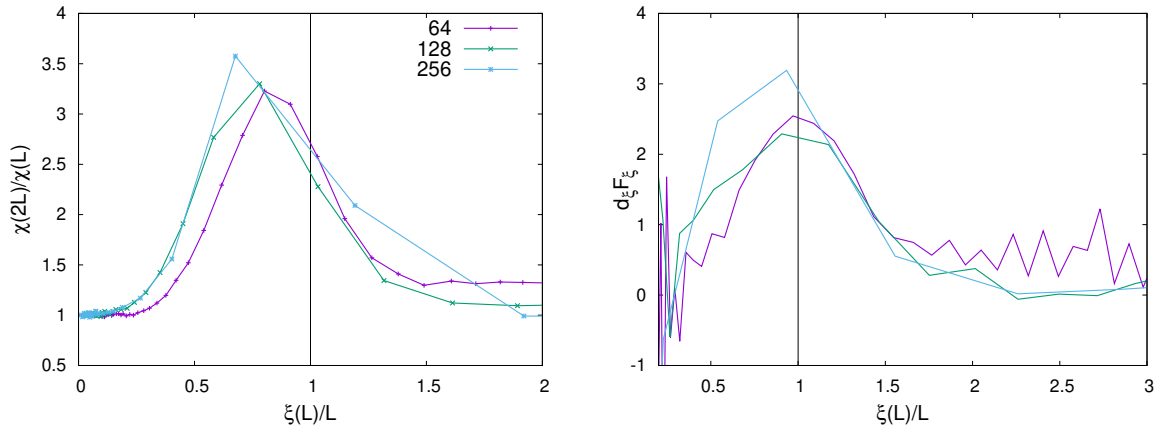
ver, apesar das diferentes curvas terem comportamentos parecidos, elas não colapsam verdadeiramente, portanto o erro no expoente crítico medido é enorme. Porém, analisando a região nas quais encontram-se as curvas, obtemos $1.26 \lesssim \gamma \lesssim 1.44$ e $0.77 \lesssim \nu \lesssim 0.92$.

O expoente ν foi obtido através da seguinte relação (que pode ser obtida a partir do ansatz da hipótese do escalonamento finito [51]):

$$s^{1/\nu} = 1 + \frac{x^*}{s} \partial_x F_\xi(x, s)|_{x=x^*} + \mathcal{O}(L^{-\omega}), \quad (4.24)$$

com $x = \xi(L, T)/L$ e $x^* = \xi(L, T_c)/L$.

Embora essa abordagem já tenha se mostrado ineficiente para este estudo, a situação fica pior quando comparamos os resultados com os encontrados via método do máximo das susceptibilidades (Figura 27) - os quais colapsaram as susceptibilidades da Figura 28 perfeitamente. Portanto, os resultados apresentados para o comprimento de correlação



(a) Quociente da susceptibilidade para $h=1.97$. As curvas representam a função de escala F_χ para os diferentes tamanhos de sistema. (b) Derivada parcial da função de escala do comprimento de correlação em relação ao próprio comprimento de correlação.

Figura 31 – Método do quociente utilizando o comprimento de correlação. Da Figura (a) extraímos o expoente γ e de (b) obtemos ν .

servem apenas como uma observação do comportamento dos sistemas estudados, mas não devem ser tomados como resultados definitivos.

Uma outra opção seria usar o cumulante de Binder como parâmetro para as funções escala, de modo que os expoentes críticos possam ser obtidos através de

$$\frac{O(T, sL)}{O(T, L)} = s^{\sigma/\nu} \frac{f(U(T, sL))}{f(U(T, L))}. \quad (4.25)$$

Os cumulantes de Binder orientacional de diferentes tamanhos (Figura 9b) se cruzam em $T_c = 0.7399$, quando assume valor $U(T_c) = 0.9025$.

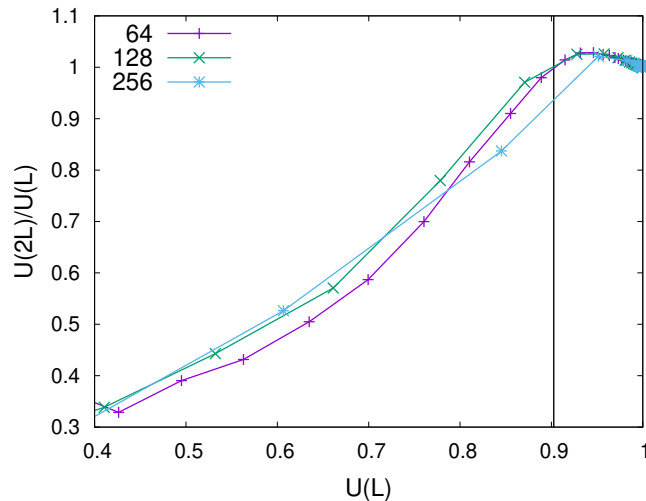


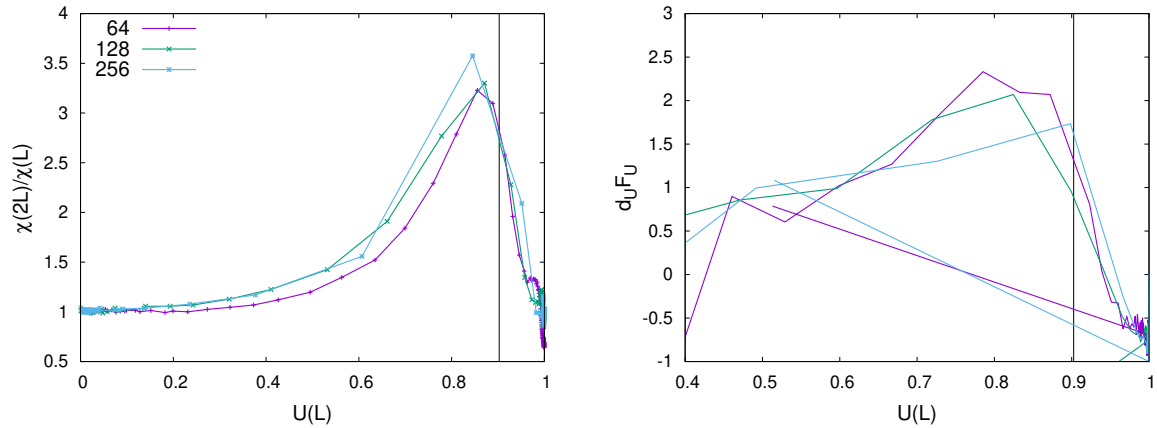
Figura 32 – Quociente do comprimento de correlação para $h=1.97$. As curvas representam a função de escala F_ξ para os diferentes tamanhos de sistema.

A Figura 32 mostra a função escala F_U , que parece ter um colapso razoável de seus dados. Infelizmente, embora as curvas pareçam melhores que as encontradas na Figura 30, os resultados não são melhores que os obtidos através do comprimento de correlação.

Embora as barras de erro diminuam, os expoentes críticos encontrados ainda não concordam com os resultados do máximo das susceptibilidades. Da Figura 33 retiramos $\gamma \sim 1.47$ e $0.81 < \nu < 1.08$. Dessa vez o expoente ν foi obtido a partir da equação

$$s^{1/\nu} = 1 + U^* \partial_U F_U(U, s)|_{U=U^*} + \mathcal{O}(L^{-\omega}), \quad (4.26)$$

com $U^* = U(L, T_c)$.



(a) Quociente da susceptibilidade para $h=1.97$. As curvas representam a função de escala F_χ para os diferentes tamanhos de sistema. (b) Derivada parcial da função de escala do comprimento de correlação em relação ao próprio comprimento de correlação.

Figura 33 – Método do quociente utilizando o comprimento de correlação. Da Figura (a) extraímos o expoente γ e de (b) obtemos ν .

Assim, mais razões entre diferentes tamanhos de sistema são necessárias para estudar o comportamento de escala do modelo ao limite termodinâmico. Novamente, as estimativas para os expoentes críticos obtidas através do método do quociente devem ser vistas apenas como uma observação do comportamento do modelo e não como resultados definitivos.

5 CONCLUSÃO

Neste trabalho desenvolvemos um algoritmo mais eficiente para o modelo J1-J2, e estudamos o modelo com campo magnético externo aplicado através de simulações de Monte Carlo, no intuito de encontrar e estudar a nova fase nemática recém descoberta no modelo.

O modelo J1-J2, por ser um sistema frustrado, apresenta altos tempos de equilíbrio, os quais podem ser um empecilho na análise das propriedades críticas no modelo. Dessa forma, para viabilizar este estudo, partimos do algoritmo de Metrópolis usual e implementamos os métodos do *Parallel Tempering* e *Multispin Coding*. Estes dois métodos juntos aumentaram em até 3.4 vezes a velocidade de nossas simulações, tornando possível a termalização de sistemas de tamanhos maiores.

Com o algoritmo pronto, investigamos a região onde a fase nemática havia sido prevista pelo Método do Aglomerado Variacional, encontrando-a de fato para $k = 1.0$. O diagrama campo-temperatura foi obtido para este caso utilizando os picos das susceptibilidades associadas com os parâmetros de ordem correspondentes a cada uma das transições.

Assim como nos resultados de campo médio melhorado, a transição nemática-paramagnética foi encontrada como de segunda ordem. Já para a transição faixas-nemática os resultados não estão tão claros ainda, de forma que não foi possível determinar com certeza a natureza da transição. Grandezas como o cumulante de Binder e a distribuição do parâmetro de ordem posicional apontam, para $L \leq 512$, uma transição de primeira ordem, devido a coexistência de uma fase mais ordenada e outra sem ordem translacional. Porém, o mínimo do cumulante de Binder associado com esta transição parece não divergir no limite termodinâmico; e a susceptibilidade parece divergir com o aumento do tamanho do sistema. Como à campo nulo o modelo apresenta uma região de pseudo-transição de primeira ordem, achamos que os resultados listados não são evidências suficientes para classificar esta transição. Como a estrutura de dois picos no calor específico só começa a surgir para tamanhos maiores que $L = 256$, seria necessário uma análise de tamanhos ainda maiores para definir a natureza da transição faixas-nemática.

Todavia, dois resultados em particular se destacam por diferirem dos resultados da literatura. Primeiramente não encontramos comportamento reentrante no nosso diagrama de fases, uma característica marcante dos resultados de Guerrero, Stariolo e Almarza[11]. Para redes de tamanho pequeno ainda é possível ver um resquício do parâmetro de ordem orientacional, o qual some no limite termodinâmico. Porém até mesmo nesses casos não possuímos a fase nemática, uma vez que o sistema ainda está majoritariamente num estado paramagnético saturado. Como segundo resultado importante, a região na qual a fase nemática foi encontrada também é bem menor do que a prevista.

Fizemos também uma análise de escalonamento finito para tentar determinar a

classe de universalidade da transição nemática-paramagnética. Usando o método do máximo da susceptibilidade encontramos $\nu = 1.07 \pm 0.06$ e $\gamma/\nu = 1.67 \pm 0.03$. Estes expoentes críticos estão bem próximos da universalidade de Ising, sendo esta a universalidade sugerida também pelos resultados de Guerrero, Stariolo e Almarza[11]. Ainda assim, seria ideal obter estes expoentes para valores diferentes de k , de modo a eliminar a possibilidade de uma universalidade fraca. Isto porque, segundo a teoria de Suzuki[22], a razão γ/ν é universal, de modo a não ser surpresa resultar perto do valor de Ising. Porém ainda existe a possibilidade de que ν varie com k e $k = 1$ seja um valor especial, onde ν se parece bastante com o expoente da criticalidade de Ising. Não foi possível extrair expoentes críticos confiáveis utilizando o método do quociente.

Como trabalho futuro, esperamos conseguir equilibrar tamanhos ainda maiores, para que nossa análise de escalonamento finito fique mais precisa e os comportamentos críticos da transição faixas-nemática fiquem mais evidentes. Para isso as principais mudanças devem ser no código da simulação. Uma das mudanças em vista será trocar o método do *Multispin Coding* por um outro método de paralelização como o OpenMP, o qual já encontra-se implementado.

REFERÊNCIAS

- 1 NIGHTINGALE, M. Non-universality for ising-like spin systems. *Physics Letters A*, v. 59, n. 6, p. 486 – 488, 1977. ISSN 0375-9601. Disponível em: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/037596017790665X>.
- 2 OITMAA, J. The square-lattice ising model with first and second neighbour interactions. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, IOP Publishing, v. 14, n. 5, p. 1159–1168, may 1981.
- 3 MORÁN-LÓPEZ, J. L.; AGUILERA-GRANJA, F.; SANCHEZ, J. M. First-order phase transitions in the ising square lattice with first- and second-neighbor interactions. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 48, p. 3519–3522, Aug 1993. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.48.3519>.
- 4 JIN, S.; SEN, A.; SANDVIK, A. W. Ashkin-teller criticality and pseudo-first-order behavior in a frustrated ising model on the square lattice. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 108, p. 045702, Jan 2012. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.108.045702>.
- 5 JIN, S. et al. Phase transitions in the frustrated ising model on the square lattice. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 87, p. 144406, Apr 2013. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.87.144406>.
- 6 SWENDSEN, R. H.; KRINSKY, S. Monte carlo renormalization group and ising models with $n > \sim 2$. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 43, p. 177–180, Jul 1979. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.43.177>.
- 7 LANDAU, D. P. Phase transitions in the ising square lattice with next-nearest-neighbor interactions. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 21, p. 1285–1297, Feb 1980. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.21.1285>.
- 8 BINDER, K.; LANDAU, D. P. Phase diagrams and critical behavior in ising square lattices with nearest- and next-nearest-neighbor interactions. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 21, p. 1941–1962, Mar 1980. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.21.1941>.
- 9 LANDAU, D. P.; BINDER, K. Phase diagrams and critical behavior of ising square lattices with nearest-, next-nearest-, and third-nearest-neighbor couplings. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 31, p. 5946–5953, May 1985. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.31.5946>.
- 10 KALZ, A.; HONECKER, A.; MOLINER, M. Analysis of the phase transition for the ising model on the frustrated square lattice. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 84, p. 174407, Nov 2011. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.84.174407>.
- 11 GUERRERO, A. I.; STARIOLO, D. A.; ALMARZA, N. G. Nematic phase in the J_1 – J_2 square-lattice ising model in an external field. *Phys. Rev. E*, American Physical Society, v. 91, p. 052123, May 2015. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.91.052123>.

- 12 DUYMOVIC, A. I. G. *Fases orientacionais em sistemas com interações competitivas pelo método do aglomerado variacional*. Tese (Doutorado) — Universidade Federal do Rio Grande do Sul, 2015.
- 13 NEWMAN, M. E. J.; BARKEMA, G. T. *Monte Carlo Methods in Statistical Physics*. [S.l.]: Oxford University Press, 1999.
- 14 OLIVEIRA, P. M. C. de. *Computing Boolean Statistical Models*. [S.l.]: World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., 1991.
- 15 HUKUSHIMA, K.; NEMOTO, K. Exchange monte carlo method and application to spin glass simulations. *Journal of the Physical Society of Japan*, The Physical Society of Japan, v. 65, n. 6, p. 1604–1608, 1996.
- 16 KADANOFF, L. P. Critical behavior universality and scaling. In: GREEN, M. S. (Ed.). *Proceedings of the Int. School of Physics “Enrico Fermi”*. New York: Academic Press, 1971.
- 17 GUGGENHEIM, E. A. The principle of corresponding states. *J. Chem. Phys.*, American Institute of Physics, v. 13, p. 253–261, July 1945. Disponível em: <http://dx.doi.org/10.1063/1.1724033>.
- 18 WILSON, K. G. Renormalization group and critical phenomena. i. renormalization group and the kadanoff scaling picture. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 4, p. 3174–3183, Nov 1971. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.4.3174>.
- 19 BAXTER, R. J. Partition function of the eight-vertex lattice model. *Annals of Physics*, v. 70, n. 1, p. 193 – 228, 1972. ISSN 0003-4916. Disponível em: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0003491672903351>.
- 20 ASHKIN, J.; TELLER, E. Statistics of two-dimensional lattices with four components. *Phys. Rev.*, American Physical Society, v. 64, p. 178–184, Sep 1943. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.64.178>.
- 21 BAXTER, R. J. Potts model at the critical temperature. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, IOP Publishing, v. 6, n. 23, p. L445–L448, nov 1973.
- 22 SUZUKI, M. New universality of critical exponents. *Progress of Theoretical Physics*, v. 51, n. 6, p. 1992–1993, 06 1974. ISSN 0033-068X. Disponível em: <https://doi.org/10.1143/PTP.51.1992>.
- 23 KASKI, K.; KINZEL, W.; GUNTON, J. D. Phase transitions in centered-rectangular- and square-lattice-gas models. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 27, p. 6777–6786, Jun 1983. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.27.6777>.
- 24 AMAR, J.; KASKI, K.; GUNTON, J. D. Square-lattice-gas model with repulsive nearest- and next-nearest-neighbor interactions. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 29, p. 1462–1464, Feb 1984. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.29.1462>.
- 25 YIN, J.; LANDAU, D. P. Phase diagram and critical behavior of the square-lattice ising model with competing nearest-neighbor and next-nearest-neighbor interactions. *Phys. Rev. E*, American Physical Society, v. 80, p. 051117, Nov 2009. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.80.051117>.

- 26 QUEIROZ, S. L. A. de. Scaling behavior of a square-lattice ising model with competing interactions in a uniform field. *Phys. Rev. E*, American Physical Society, v. 84, p. 031132, Sep 2011. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.84.031132>.
- 27 KUNWAR, S. S. et al. Tuning a random-field mechanism in a frustrated magnet. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 98, p. 024206, Jul 2018. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.98.024206>.
- 28 ONSAGER, L. Crystal statistics. i. a two-dimensional model with an order-disorder transition. *Phys. Rev.*, American Physical Society, v. 65, p. 117–149, Feb 1944. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.65.117>.
- 29 METROPOLIS, N. et al. Equation of state calculations by fast computing machines. *The Journal of Chemical Physics*, v. 21, n. 6, p. 1087–1092, 1953. Disponível em: <https://doi.org/10.1063/1.1699114>.
- 30 WOLFF, U. Collective monte carlo updating for spin systems. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 62, p. 361–364, Jan 1989. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.62.361>.
- 31 SWENDSEN, R. H.; WANG, J.-S. Nonuniversal critical dynamics in monte carlo simulations. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 58, p. 86–88, Jan 1987. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.58.86>.
- 32 YAN, Q.; PABLO, J. J. de. Hyperparallel tempering monte carlo simulation of polymeric systems. *The Journal of Chemical Physics*, v. 113, n. 3, p. 1276–1282, 2000. Disponível em: <https://doi.org/10.1063/1.481905>.
- 33 HANSMANN, U. H. E. Parallel tempering algorithm for conformational studies of biological molecules. *Chemical Physics Letters*, v. 281, n. 1, p. 140–150, 1997.
- 34 SUGITA, Y.; OKAMOTO, Y. Replica-exchange molecular dynamics method for protein folding. *Chemical Physics Letters*, v. 314, n. 1, p. 141 – 151, 1999. ISSN 0009-2614. Disponível em: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0009261499011239>.
- 35 FALCIONI, M.; DEEM, M. W. A biased monte carlo scheme for zeolite structure solution. *The Journal of Chemical Physics*, v. 110, n. 3, p. 1754–1766, 1999. Disponível em: <https://doi.org/10.1063/1.477812>.
- 36 RATHORE, N.; CHOPRA, M.; PABLO, J. J. de. Optimal allocation of replicas in parallel tempering simulations. *The Journal of Chemical Physics*, v. 122, n. 2, p. 024111, 2005. Disponível em: <https://doi.org/10.1063/1.1831273>.
- 37 KONE, A.; KOFKE, D. A. Selection of temperature intervals for parallel-tempering simulations. *The Journal of Chemical Physics*, v. 122, n. 20, p. 206101, 2005. Disponível em: <https://doi.org/10.1063/1.1917749>.
- 38 KIKUCHI, M.; OKABE, Y. Multi-spin coding of the monte carlo simulation of the three-state random potts model and the block-spin transformation. *International Journal of Modern Physics C*, v. 06, n. 06, p. 747–763, 1996. Disponível em: <https://doi.org/10.1142/S0129183195000617>.

- 39 CANNAS, S. A. et al. Ising nematic phase in ultrathin magnetic films: A monte carlo study. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 73, p. 184425, May 2006. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.73.184425>.
- 40 NICOLAO, L.; STARIOLO, D. A. Langevin simulations of a model for ultrathin magnetic films. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 76, p. 054453, Aug 2007. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.76.054453>.
- 41 BINDER, K. Critical properties from monte carlo coarse graining and renormalization. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 47, p. 693–696, Aug 1981. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.47.693>.
- 42 BINDER, K.; LANDAU, D. P. Finite-size scaling at first-order phase transitions. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 30, p. 1477–1485, Aug 1984. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.30.1477>.
- 43 VOLLMAYR, K. et al. Finite size effects at thermally-driven first order phase transitions: A phenomenological theory of the order parameter distribution. *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter*, v. 91, n. 1, p. 113–125, Mar 1993. Disponível em: <https://doi.org/10.1007/BF01316713>.
- 44 KARDAR, M. *Statistical Physics of Fields*. [S.l.]: Cambridge University Press, 2007.
- 45 STANLEY, H. *Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena*. [S.l.]: Oxford University Press, 1987. (International series of monographs on physics).
- 46 CARDY, J.; GODDARD, P.; YEOMANS, J. *Scaling and Renormalization in Statistical Physics*. [S.l.]: Cambridge University Press, 1996. (Cambridge Lecture Notes in Physics).
- 47 FISHER, M. E.; BARBER, M. N. Scaling theory for finite-size effects in the critical region. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 28, p. 1516–1519, Jun 1972. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.28.1516>.
- 48 WISEMAN, S.; DOMANY, E. Cluster method for the ashkin-teller model. *Phys. Rev. E*, American Physical Society, v. 48, p. 4080–4090, Nov 1993. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.48.4080>.
- 49 FISHER, M. E.; BERKER, A. N. Scaling for first-order phase transitions in thermodynamic and finite systems. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 26, p. 2507–2513, Sep 1982. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.26.2507>.
- 50 LEE, J.; KOSTERLITZ, J. M. Finite-size scaling and monte carlo simulations of first-order phase transitions. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 43, p. 3265–3277, Feb 1991. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.43.3265>.
- 51 JÖRG, T.; KATZGRABER, H. G. Universality and universal finite-size scaling functions in four-dimensional ising spin glasses. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 77, p. 214426, Jun 2008. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.77.214426>.

APÊNDICE A – FUNCIONAIS DE CAMPO MÉDIO

Vamos procurar um funcional $F[m_i]$ que, quando minimizado, nos dará a energia livre do sistema (na verdade a energia livre que vamos obter será tão boa quanto nossas aproximações).

O primeiro passo será utilizar a definição usual (A.1) do operador matriz densidade

$$\hat{\rho} = \hat{\rho}_1 \otimes \hat{\rho}_2 \otimes \hat{\rho}_2 \cdots \otimes \hat{\rho}_N, \quad (\text{A.1})$$

onde separamos a matriz densidade do sistema nos produtos tensoriais de matrizes densidade de spins independentes, $\hat{\rho}_i$, dadas pela expressão

$$\hat{\rho}_i = a\delta_{s,1} + b\delta_{s,-1}, \quad (\text{A.2})$$

onde as constantes a e b podem ser determinadas através das relações $Tr(\rho) = 1$ e $\langle s_i \rangle \equiv m_i = Tr(s_i \rho_i)$, de forma a chegarmos na seguinte equação para a matriz densidade:

$$\hat{\rho}_i = \frac{1 + m_i}{2} \delta_{s,1} + \frac{1 - m_i}{2} \delta_{s,-1}. \quad (\text{A.3})$$

O funcional que iremos propor possui a forma $F = E - TS$, onde os funcionais de energia e entropia podem ser obtidos através das equações (A.4) e (A.5), respectivamente.

$$E = \langle H \rangle = Tr(H\hat{\rho}). \quad (\text{A.4})$$

$$S = -k_B Tr(\hat{\rho} \ln \hat{\rho}). \quad (\text{A.5})$$

A.1 CAMPO MÉDIO VARIACIONAL DO MODELO J1-J2

Usando os resultados anteriores, para o campo médio variacional da matriz densidade, conseguimos mostrar que, para o modelo J1-J2, o funcional da energia livre é dado pela equação (A.6).

$$\begin{aligned} \tilde{F} = & - \sum_{\langle i,j \rangle} m_i m_j + k \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} m_i m_j - \Gamma \sum_i m_i \\ & + \Theta \sum_i \left\{ \left(\frac{1 + m_i}{2} \right) \ln \left(\frac{1 + m_i}{2} \right) + \left(\frac{1 - m_i}{2} \right) \ln \left(\frac{1 - m_i}{2} \right) \right\}, \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

onde, para deixarmos a equação adimensional, foi necessário escrever F em unidades de J_1 , de tal forma que $\tilde{F} = F/J_1$, $k = J_2/J_1$, $\Gamma = B/J_1$ e $\Theta = k_B T/J_1$.

A.1.1 Fase ferromagnética

Na fase ferromagnética teremos todos os spins com a mesma orientação. Portanto para encontrar a energia livre da fase homogênea basta considerar, na equação (A.6), $m_i = \text{constante} = m$ - lembrando que para uma rede bidimensional teremos 4 primeiros vizinhos e 4 segundos vizinhos.

$$\begin{aligned} \tilde{f}_{ferro} = & -2m^2(1-k) - \Gamma m + \\ & + \Theta \left\{ \left(\frac{1+m}{2} \right) \ln \left(\frac{1+m}{2} \right) + \left(\frac{1-m}{2} \right) \ln \left(\frac{1-m}{2} \right) \right\}. \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

A.1.2 Fase de faixas

Para calcularmos o funcional para a fase de faixas devemos dividir nossa rede em duas subredes (como na Figura 34), com magnetizações m_1 e m_2 . Dessa maneira podemos calcular cada um dos termos presentes em \tilde{f}_{faixas} .

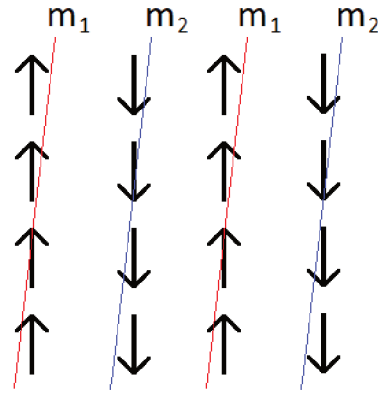


Figura 34 – Subredes de diferentes magnetizações na fase de faixas

$$\begin{aligned} - \sum_{\langle i,j \rangle} m_i m_j &= \frac{1}{2} (-m_1(2m_1 + 2m_2) \frac{N}{2} - m_2(2m_1 + 2m_2) \frac{N}{2}) \\ &= - \frac{N}{2} (m_1 + m_2)^2. \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

$$\begin{aligned} k \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} m_i m_j &= \frac{1}{2} (k m_1(4m_2) \frac{N}{2} + k m_2(4m_1) \frac{N}{2}) \\ &= 2kN m_1 m_2. \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

$$\begin{aligned} S &= -k_B \frac{N}{2} \left\{ \left(\frac{1+m_1}{2} \right) \ln \left(\frac{1+m_1}{2} \right) + \left(\frac{1-m_1}{2} \right) \ln \left(\frac{1-m_1}{2} \right) + \right. \\ & \quad \left. + \left(\frac{1+m_2}{2} \right) \ln \left(\frac{1+m_2}{2} \right) + \left(\frac{1-m_2}{2} \right) \ln \left(\frac{1-m_2}{2} \right) \right\} = \\ &= - \frac{k_B N}{2} (S(m_1) + S(m_2)), \end{aligned} \quad (\text{A.10})$$

onde $S(m) = \left(\frac{1+m}{2}\right)\ln\left(\frac{1+m}{2}\right) + \left(\frac{1-m}{2}\right)\ln\left(\frac{1-m}{2}\right)$.

Utilizando os resultados de (A.8), (A.9) e (A.10), conseguimos chegar em:

$$\tilde{f}_{\text{fixas}} = -\frac{1}{2}(m_1 + m_2)^2 + 2km_1m_2 - \frac{\Gamma}{2}(m_1 + m_2) + \frac{\Theta}{2}(S(m_1) + S(m_2)) \quad (\text{A.11})$$

A.1.3 Fase paramagnética

A fase paramagnética é caracterizada por ser uma fase sem orientação global. Se fizermos $m_i = 0$ todos os termos provenientes da energia desaparecem e chegamos no seguinte funcional de energia livre, que possui contribuição apenas da parte entrópica de F .

$$\begin{aligned} \tilde{f}_{\text{para}} &= \Theta \left\{ \left(\frac{1}{2}\right)\ln\left(\frac{1}{2}\right) + \left(\frac{1}{2}\right)\ln\left(\frac{1}{2}\right) \right\} = \\ &= -\Theta \ln 2 \end{aligned} \quad (\text{A.12})$$

APÊNDICE B – EXPRESSÕES LÓGICAS

Da mesma maneira que fizemos para o modelo de Ising, iremos definir quantidades auxiliares:

$$\begin{aligned}
 a_1 &= \sigma_i \oplus \sigma_{\leftarrow}, \\
 a_3 &= \sigma_i \oplus \sigma_{\rightarrow}, \\
 a_2 &= \sigma_i \oplus \sigma_{\downarrow}, \\
 a_4 &= \sigma_i \oplus \sigma_{\uparrow}.
 \end{aligned} \tag{B.1}$$

Equivalentemente, para introduzir a interação com os spins das diagonais:

$$\begin{aligned}
 a_5 &= \sigma_i \oplus \neg\sigma_{\swarrow}, \\
 a_6 &= \sigma_i \oplus \neg\sigma_{\searrow}, \\
 a_7 &= \sigma_i \oplus \neg\sigma_{\nearrow}, \\
 a_8 &= \sigma_i \oplus \neg\sigma_{\nwarrow}.
 \end{aligned} \tag{B.2}$$

Nosso objetivo então é, a partir de (B.1) e (B.2), encontrar quantos primeiros vizinhos anti-alinhados e segundos vizinhos alinhados o nosso spin possui. Para isso, e seguindo a notação do texto, podemos definir $R_{\geq j}^{(i)}$, onde o índice $i = 1, 2$ nos diz quais vizinhos estaremos interessados (primeiros ou segundos vizinhos), e j pode ser $N_{anti}^{(1)}$ ou $N_{ali}^{(2)}$, dependendo do índice i . A expressão $R_{\geq 2}^{(1)}$, por exemplo, será 1 caso existam 2 ou mais primeiros vizinhos anti-alinhados e 0 caso contrário. Esta definição é equivalente as relações (3.18) do texto.

Assim, a partir de (B.1) encontramos, para $R_{\geq j}^{(1)}$,

$$\begin{aligned}
 R_{\geq 1}^{(1)} &= a_1 \vee a_2 \vee a_3 \vee a_4, \\
 R_{\geq 2}^{(1)} &= [(a_1 \vee a_2) \wedge (a_3 \vee a_4)] \vee [(a_1 \wedge a_2) \vee (a_3 \wedge a_4)], \\
 R_{\geq 3}^{(1)} &= [(a_1 \vee a_2) \wedge (a_3 \vee a_4)] \wedge [(a_1 \wedge a_2) \vee (a_3 \wedge a_4)], \\
 R_{\geq 4}^{(1)} &= a_1 \wedge a_2 \wedge a_3 \wedge a_4.
 \end{aligned} \tag{B.3}$$

Para a interação com segundos vizinhos as relações são as mesmas, apenas utilizamos as relações (B.2) dessa vez:

$$\begin{aligned}
 R_{\geq 1}^{(2)} &= a_5 \vee a_6 \vee a_7 \vee a_8, \\
 R_{\geq 2}^{(2)} &= [(a_5 \vee a_6) \wedge (a_7 \vee a_8)] \vee [(a_5 \wedge a_6) \vee (a_7 \wedge a_8)], \\
 R_{\geq 3}^{(2)} &= [(a_5 \vee a_6) \wedge (a_7 \vee a_8)] \wedge [(a_5 \wedge a_6) \vee (a_7 \wedge a_8)], \\
 R_{\geq 4}^{(2)} &= a_5 \wedge a_6 \wedge a_7 \wedge a_8.
 \end{aligned} \tag{B.4}$$

Como o caso $k = 1.0$ é um caso especial, onde os dois tipos de interação (ou vizinhos) tem o mesmo peso no cálculo da energia, juntar as diferentes interações, que

até agora foram tratadas separadamente, será bem simples. É direto perceber que para $k = 1.0$:

$$\begin{aligned}
 R_{\geq 1} &= R_{\geq 1}^{(1)} \vee R_{\geq 1}^{(2)}, \\
 R_{\geq 2} &= (R_{\geq 1}^{(1)} \wedge R_{\geq 1}^{(2)}) \vee R_{\geq 2}^{(1)} \vee R_{\geq 2}^{(2)}, \\
 R_{\geq 3} &= (R_{\geq 1}^{(1)} \wedge R_{\geq 2}^{(2)}) \vee (R_{\geq 2}^{(1)} \wedge R_{\geq 1}^{(2)}) \vee R_{\geq 3}^{(1)} \vee R_{\geq 3}^{(2)}, \\
 R_{\geq 4} &= (R_{\geq 1}^{(1)} \wedge R_{\geq 3}^{(2)}) \vee (R_{\geq 3}^{(1)} \wedge R_{\geq 1}^{(2)}) \vee (R_{\geq 2}^{(1)} \wedge R_{\geq 2}^{(2)}) \vee R_{\geq 4}^{(1)} \vee R_{\geq 4}^{(2)}, \\
 R_{\geq 5} &= (R_{\geq 1}^{(1)} \wedge R_{\geq 4}^{(2)}) \vee (R_{\geq 4}^{(1)} \wedge R_{\geq 1}^{(2)}) \vee (R_{\geq 3}^{(1)} \wedge R_{\geq 2}^{(2)}) \vee (R_{\geq 2}^{(1)} \wedge R_{\geq 3}^{(2)}),
 \end{aligned} \tag{B.5}$$

onde as quantidades $R_{\geq \tilde{N}}$, com $\tilde{N} = N_{anti}^{(1)} + N_{ali}^{(2)}$, são 1 caso a soma de primeiros vizinhos anti-alinhados e segundos vizinhos alinhados seja maior ou igual a \tilde{N} .

Finalmente, para transformar o “maior ou igual” em apenas igual,

$$\begin{aligned}
 R_0 &= \neg R_{\geq 1}, \\
 R_1 &= R_{\geq 1} \oplus R_{\geq 2}, \\
 R_2 &= R_{\geq 2} \oplus R_{\geq 3}, \\
 R_3 &= R_{\geq 3} \oplus R_{\geq 4}, \\
 R_4 &= R_{\geq 4} \oplus R_{\geq 5}.
 \end{aligned} \tag{B.6}$$

Assim, com as relações (B.6) é possível atualizar o estado dos spins de todas as réplicas através da equação (3.25). Vale lembrar que apenas é necessário calcular as expressões lógicas $R_{\tilde{N}}$ até $\tilde{N} = 4$, uma vez que para valores maiores já é energeticamente favorável para o sistema inverter a orientação do spin.