

PEDRO AUGUSTO DA SILVA

TRANSIÇÕES DE FASE NO MODELO XY GENERALIZADO

Dissertação apresentada à Universidade Federal de Viçosa, como parte das exigências do Programa de Pós-Graduação em Física, para obtenção do título de *Magister Scientiae*.

Orientador: Afrânio Rodrigues Pereira

VIÇOSA - MINAS GERAIS  
2023

**Ficha catalográfica elaborada pela Biblioteca Central da Universidade  
Federal de Viçosa - Campus Viçosa**

T

S586t  
2023  
Silva, Pedro Augusto da, 1991-  
Transições de fase no modelo XY generalizado / Pedro  
Augusto da Silva. – Viçosa, MG, 2023.  
1 dissertação eletrônica (68 f.): il. (algumas color.).

Inclui apêndices.

Orientador: Afrânio Rodrigues Pereira.

Dissertação (mestrado) - Universidade Federal de Viçosa,  
Departamento de Física, 2023.

Referências bibliográficas: f. 60-62.

DOI: <https://doi.org/10.47328/ufvbbt.2023.661>

Modo de acesso: World Wide Web.

1. Transformações de fase (Física estatística). 2. Espaços  
generalizados. 3. Magnetismo. 4. Esferoma. I. Pereira, Afrânio  
Rodrigues, 1963-. II. Universidade Federal de Viçosa.  
Departamento de Física. Programa de Pós-Graduação em Física.  
III. Título.

CDD 22. ed. 530.41

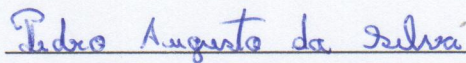
PEDRO AUGUSTO DA SILVA

TRANSIÇÕES DE FASE NO MODELO XY GENERALIZADO

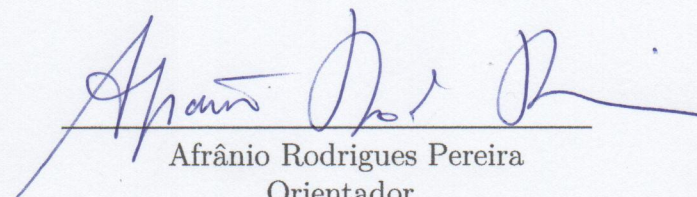
Dissertação apresentada à Universidade Federal de Viçosa, como parte das exigências do Programa de Pós-Graduação em Física, para obtenção do título de *Magister Scientiae*.

APROVADA: 31 de julho de 2023.

Assentimento:



Pedro Augusto da Silva  
Autor



Afrânio Rodrigues Pereira  
Orientador

*Aos meus pais, Mario Lucio da Silva e  
Rita de Cassia Domingos Silva.*

## AGRADECIMENTOS

Ao longo do mestrado, passei por altos e baixos. Antes mesmo de entrar, já discutia se era o caminho que gostaria de seguir, e um sonho pessoal. As dificuldades do dia a dia, o ritmo de estudo que não estava acostumado e o trabalho interminável me fizeram várias vezes pensar se eu seria capaz. Mas com o tempo, graças às pessoas que diretamente e indiretamente me deram suporte durante essa caminhada, os dias que antes eram tortuosos tornaram-se prazerosos, e hoje posso afirmar que amo o que faço. Assim, dedico esta dissertação a estas pessoas, que sem elas não seria possível.

Primeiro gostaria de agradecer aos meus pais Mario e Rita, que com sacrifícios, me proporcionaram a possibilidade de estudar, e confiaram em mim para tomar as minhas próprias decisões. E a minha família, que sempre esteve presente.

A todos meus amigos, presentes e os que já partiram, que me mostraram o verdadeiro sentido da frase "Nenhum homem é um fracasso se tem amigos". Em especial, o Lair pelas bebidas e as discussões filosóficas e de física, o Kairon e o Góes pelos jogos, a Kelly pelos passeios no mercado, e toda a galera das salinhas da pós.

Agradeço ao Professor Afrânio, meu orientador desde a graduação. Que foi de extrema importância na minha formação como pesquisador, não só devido ao seu vasto conhecimento em física, e sua capacidade em me explicar assuntos considerados complexos de forma mais simples, mas também por me deixar livre para me desenvolver no meu ritmo e descobrir o meu próprio caminho.

Ao meu coorientador, amigo e camarada Ricardo, que me acompanhou desde a graduação. Uma das pessoas mais inteligentes que tive o prazer de conhecer, tanto no contexto da física, onde ele sempre tinha um caminho para me apontar, o que foi crucial para a finalização deste trabalho, quanto na diversidade de conhecimento fora da física que me divertiam e me enriqueciam culturalmente.

À Universidade Federal de Viçosa, pela oportunidade de realizar tanto a graduação quanto a pós-graduação, em especial ao departamento de Física, GISC, os professores e funcionários que constroem o ambiente que me formou como Físico e pesquisador. O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior – Brasil (CAPES) – Código de Financiamento 001.

*“Não é sobre a descoberta. É a vida que importa, nada além da vida - o processo da descoberta,  
o processo eterno e perpétuo, não a descoberta em si, de forma alguma.”  
(Fyodor Dostoyevsky, O idiota )*

## RESUMO

SILVA, Pedro Augusto, M.Sc., Universidade Federal de Viçosa, julho de 2023. **Transições de fase no Modelo XY generalizado**. Orientador: Afrânio Rodrigues Pereira.

Ao longo deste trabalho, abordaremos as transições de fases no modelo XY generalizado em duas dimensões. Nos últimos anos, os modelos de Heisenberg generalizados bidimensionais têm sido amplamente estudados, resultando em conclusões adversas sobre suas transições de fases. Durante este trabalho, discutiremos alguns resultados obtidos nas últimas décadas, com foco especial no modelo de Domany, o primeiro modelo generalizado construído motivado pela transição de fase Berezinskii, Kosterlitz e Thouless e o modelo XY generalizado proposto por Romano e Zagrebnov, como uma generalização do Modelo XY. Nosso objetivo é mostrar, utilizando técnicas computacionais, tanto pelo método de Monte Carlo, quanto de forma analítica, utilizando medidas de Gibbs, que o modelo XY generalizado bidimensional suporta transições de fases de primeira ordem, sem violar o teorema de Mermin-Wagner. Apresentaremos duas abordagens para estimar o parâmetro crítico  $q$ , onde a transição de fase de primeira ordem surge, utilizando técnicas analíticas e computacionais. Além disso, mostraremos que o modelo apresenta três regiões distintas onde para diferentes valores do parâmetro  $q$ , o modelo suporta a transição de fase BKT para uma determinada temperatura, suporta uma transição de primeira ordem e uma BKT em temperaturas diferentes ou uma única transição de fase de primeira ordem. E por último apresentaremos o mecanismo por trás das transições de fases e estimaremos a temperatura crítica do sistema também de forma analítica e computacional.

Palavras-chave: Modelos Generalizados. Transições de fase. Magnetismo. Vórtices.

## ABSTRACT

SILVA, Pedro Augusto, M.Sc., Universidade Federal de Viçosa, July, 2023. **Phase transitions in the Generalized XY model.** Advisor: Afrânio Rodrigues Pereira.

This work, we will discuss phase transitions in the generalized two-dimensional XY model. Generalized two-dimensional Heisenberg models have been extensively studied over the past decades, yielding conflicting results regarding their phase transitions. In this work, we propose to discuss some of the results obtained in recent decades, particularly focusing on the Domany model, which was the first model that was developed, motivated by the BKT phase transition, and the generalized XY model proposed by Romano and Zagrebnov as an extension of the XY model. The aim of this work is to computationally and analytically demonstrate that the generalized two-dimensional XY model supports first-order phase transitions without violating the Mermin-Wagner theorem. We will present two approaches to estimate the critical parameter " $q$ " at which the first-order phase transition occurs, both analytically and computationally. Additionally, we will show that the model exhibits three distinct regions: one where, for a given parameter " $q$ ," the model undergoes a BKT phase transition at a certain temperature; another where it undergoes separate first-order and BKT transitions at different temperatures; and a third region where only a first-order phase transition occurs. Lastly, we will present the mechanism behind the phase transitions and estimate the critical temperature of the system, both analytically and computationally.

Keywords: Generalized Models. Phase transitions. Magnetism. Vortices.

## LISTA DE FIGURAS

1.1	O material $K_2CuF_4$ , um exemplo de material que pode apresentar comportamento magnético bidimensional, onde a rede de Cobre(Cu), em vermelho, é isolada por cadeias de Flúor (F), em preto, e K (Potássio) em azul. Fonte: Sachs et al [10] . . . . .	16
1.2	Esboço do Diagrama da água. A temperatura crítica é representada pelo círculo não preenchido. O círculo sólido representa o ponto triplo. . . . .	17
1.3	Esboço do calor latente. As linhas paralelas ao eixo representa onde duas fases coexistem. . . . .	17
1.4	Ilustração dos domínios acima da temperatura crítica, abaixo da temperatura crítica e na temperatura igual a zero. . . . .	19
1.5	Esboço do gráfico da magnetização com a temperatura de um sistema magnético. . . . .	20
1.6	Interação entre primeiros vizinhos. . . . .	25
1.7	Configurações típicas do tipo vórtice, onde (a) é uma configuração típica do vórtice com carga topológica $Q=1$ , e (b) é uma configuração típica do vórtice com carga topológica $Q=-1$ . . . . .	27
1.8	Ilustração da transição de fase BKT por Johan Jarnestad, onde a rede azul representa baixa temperatura, e os vórtices permanecem ligados, e a rede vermelha representa altas temperaturas onde os vórtices estão desacoplados Fonte: Nobel Prize 2016 [19] . . . . .	29
2.1	A Condição de contorno considerada por Van Enter et al. [9], onde os vértices são as posições dos spins, as linhas vermelhas representam os estados ordenados e as linhas azuis os estados desordenados. . . . .	42
3.1	Energia por spin para diferentes valores de $q$ e redes de tamanho $L=96$ . . . . .	47
3.2	Calor específico para $q=3$ para diferentes tamanhos de rede. . . . .	48
3.3	Gráfico LogxLog do Calor específico máximo pelo tamanho do sistema ao quadrado, em uma transição de fase. . . . .	49
3.4	Gráfico Densidade de vórtice pela temperatura, para diferentes valores do parâmetro de generalização $q$ para redes de tamanho $L=96$ . . . . .	50
3.5	Diferença da densidade de vórtice pelo parâmetro $1/q$ , utilizando . . . . .	50
3.6	Histograma da energia para $q=3$ , para uma rede de tamanho $L=96$ . . . . .	51
3.7	As duas fases do modelo XY generalizado representado pelo histograma de $q = 6$ e $L = 96$ na temperatura $k_b T/J = 0.6212$ . Onde o pico de menor energia, representa uma fase de menor densidade de vórtice(a esquerda do gráfico) e o pico de maior energia representa uma fase de maior densidade de vórtice(a direita do gráfico). . . . .	52
3.8	Cumulante de Binder para $q=2$ em função da temperatura para diferentes tamanhos da rede. . . . .	53
3.9	Susceptibilidade Planar para diferentes tamanhos da rede para $q=2$ . . . . .	53
3.10	Cumulante de Binder para $q=3$ em função da temperatura para diferentes tamanhos da rede. . . . .	55
3.11	Modulo da Helicidade em função da temperatura para $q=2$ , para diferentes tamanhos de rede. . . . .	55

3.12	Análise de tamanho finito da Helicidade para alguns valores de $q$ , onde redes de tamanho $L=16,32,48,64,80,96$ foram utilizados para obter os resultados.	56
3.13	Cumulante de Binder para $q=6$ em função da temperatura para diferentes tamanhos da rede. . . . .	57
3.14	Susceptibilidade planar para $q = 6$ em função da temperatura, para diferentes. . . . .	57

\*

## LISTA DE TABELAS

4.1	Temperatura de transição e crítica para alguns valores de $q$ obtido pelos métodos discutidos no texto, e os seus respectivos desvios . . . . .	60
-----	---	----

\*

# SUMÁRIO

<b>Introdução</b>	<b>13</b>
<b>1 Considerações Gerais</b>	<b>15</b>
1.1 Materiais Magnéticos bidimensionais . . . . .	15
1.2 Transições de Fase . . . . .	16
1.2.1 Transição de fase na Água . . . . .	16
1.2.2 Transição de fase Magnética . . . . .	18
1.3 Modelos Magnéticos . . . . .	21
1.3.1 Modelo de Heisenberg . . . . .	22
1.4 Transições de fase Berezinskii,Kosterlitz e Thouless . . . . .	23
1.5 Modelos Generalizados . . . . .	29
1.5.1 O modelo XY generalizado . . . . .	31
<b>2 Metodologia</b>	<b>33</b>
2.1 Mecânica Estatística . . . . .	33
2.2 Método de Monte Carlo . . . . .	34
2.2.1 Metropolis . . . . .	35
2.2.2 Wolff . . . . .	36
2.2.3 Super-relaxação . . . . .	37
2.2.4 O método de Jackknife . . . . .	37
2.3 Propriedades Físicas Relevantes . . . . .	38
2.3.1 Cumulante de Binder . . . . .	39
2.3.2 Susceptibilidade Planar . . . . .	40
2.3.3 Helicidade . . . . .	40
2.3.4 Densidade de Vórtice . . . . .	42
2.4 Medidas de Gibbs e transições de fases . . . . .	42
<b>3 Resultados e Discussões</b>	<b>46</b>
3.1 Resultados Computacionais . . . . .	46
3.1.1 Energia e Calor Especifico . . . . .	47
3.1.2 Densidade de Vórtice e as transições de fases . . . . .	49
3.1.3 Primeira Região ( $q < 3$ ) . . . . .	52
3.1.4 Segunda Região ( $3 \leq q < 6$ ) . . . . .	54
3.1.5 Terceira Região ( $q \geq 6$ ) . . . . .	54
3.2 Resultado Analítico . . . . .	56
<b>4 Conclusões e Perspectivas</b>	<b>59</b>
<b>Referências</b>	<b>63</b>
<b>A Aproximação Continua do XY generalizado</b>	<b>64</b>
<b>B Helicidade para o Modelo XY generalizado</b>	<b>68</b>

# Introdução

As transições de fases são eventos fascinantes e comuns que ocorrem em nosso dia a dia. Exemplos incluem a evaporação da água em dias quentes, seguida pela sua condensação em forma de chuva, bem como o congelamento anômalo de rios e lagos. Esses processos são fascinantes e essenciais para a vida na terra. Além disso, o estudo das transições de fase vai além desses exemplos comuns do dia a dia e abrange uma ampla gama de fenômenos em diversos sistemas físicos. Por exemplo, a magnetização de materiais, a supercondutividade e a superfluidez são transições de fases que despertam grande interesse tecnológico, logo cultural e político.

A existência de um comportamento universal para esses fenômenos tão distintos é um dos estudos mais fascinantes na física. Essa busca levou ao surgimento de uma nova área de pesquisa conhecida como Fenômenos Críticos que se dedica a entender os aspectos comuns e as propriedades universais desses processos. Para compreender esse comportamento, foram desenvolvidas grandes teorias, especialmente na área da mecânica estatística e da matéria condensada, como as teorias de Campo Médio, teoria de Ginzburg-Landau e o Grupo de Renormalização. Essas teorias fornecem uma estrutura teórica para entender as transições de fase e os fenômenos críticos em diferentes sistemas físicos, permitindo a investigação de propriedades universais que emergem nesses processos.

Os materiais de baixa dimensionalidade têm sido extensivamente estudados devido à sua capacidade de proporcionar resultados exatos. Especialmente após a solução exata de Onsager [1] em 1944 para o modelo bidimensional de Ising, que desempenhou um papel fundamental na compreensão das transições de fase. Além disso, outros dois resultados importantes no contexto das transições de fase de modelos bidimensionais são o teorema de Mermin-Wagner[2] e a transição de fase Berezinskii-Kosterlitz-Thouless(BKT). Embora essas descobertas tenham gerado grande agitação na época e tenha havido observações experimentais relacionadas a transição BKT feitas por Bishop e Reppy em filmes de Hélio-4 [3] relacionada a superfluidez, a dificuldade de construir materiais bidimensionais reais manteve o interesse predominantemente teórico.

Os estudos experimentais durante a década de 80 em materiais bidimensionais eram limitados ao estudo de superfícies em semicondutores, que também abriram caminho para investigação das transições de fases em sistemas eletrônicos confinados, especialmente em presença de campos magnéticos intensos. Isso levou ao surgimento de fenômenos como o Efeito Hall Quântico (EHQ) e o Efeito Hall Quântico Fracionário (EHQF). No entanto, foi apenas em 2004 que o primeiro material bidimensional foi descoberto. Utilizando técnicas para isolar folhas planas de cristais, que Geim e Novoselov [4] observaram camadas únicas de grafeno. Um marco significativo que foi reconhecido com o Prêmio Nobel de Física em 2010, por "experimentos inovadores sobre o material bidimensional grafeno". Essa descoberta revolucionou o campo dos materiais bidimensionais e reestimulou o interesse tanto em sua compreensão teórica quanto em suas aplicações práticas. Desde então, houve

uma explosão de pesquisas em materiais bidimensionais, explorando suas propriedades únicas e suas aplicações em diversos campos da ciência e da tecnologia. Materiais, como o grafeno, Nitreto de Boro Hexagonal (h-BN), Dissulfeto de Molibdênio (MoS<sub>2</sub>) e muitos outros, apresentam características notáveis que podem ser exploradas no futuro. Com a descoberta desses materiais bidimensionais e o avanço tecnológico em sua fabricação e análise, surgiu um renovado interesse em compreender a estabilidade e as transições de fase nesses sistemas. Em particular, a transição de fase BKT que está relacionada ao surgimento de excitações topológicas no sistema, que desempenhou um papel fundamental ao introduzir a topologia na física, o que rendeu a Thouless e Kosterlitz o Prêmio Nobel de 2016.

Uma forma de estudar a transição de fase BKT foi proposta por Domany et al. [5], onde é introduzido parâmetro de generalizações em modelos conhecidos que apresentem transição de fase BKT para identificar quais são os efeitos nestes sistemas. O objetivo deste trabalho é estudar uma dessas generalizações, que foi proposta por Romano e Zagrebnov [6]. Este modelo foi estudado de diversas formas pelo próprio Romano e Zagrebnov em seu artigo original, por Mol et al [7] [8], Van Enter et al [9] e outros trabalhos, mas algumas questões como a ordem da transição de fase relacionada ao parâmetro de generalização, e o mecanismos por trás destas transições permaneceram sem uma resposta definitiva.

Como será mostrado durante este trabalho, o modelo XY generalizado proposto por Romano e Zagrebnov apresenta transições de fase de primeira ordem para altos valores do parâmetro de generalização e transição de fase de BKT para pequenos valores e, em um intervalo, as duas transições de fases podem coexistir em temperaturas diferentes. Para isso iremos organizar o texto da seguinte forma: no Capítulo 1 iremos fazer a revisão sobre transições de fases e modelos magnéticos, apresentando as motivações e o modelo que será estudado, assim como discutir os resultados anteriores a este trabalho. No Capítulo 2 apresentaremos a metodologia e os conceitos por trás das aplicações, sem aprofundar nas técnicas aplicadas. No capítulo 3 finalmente iremos discutir os resultados obtidos, agrupando-os de forma a apresentar as regiões de transição de fase do modelo. E finalmente no capítulo 4 as conclusões e as perspectivas do trabalho.

# Capítulo 1

## Considerações Gerais

Este primeiro capítulo é uma revisão sobre modelos magnéticos e transições de fase. Onde começamos com um exemplo de material bidimensional como motivação do trabalho.

### 1.1 Materiais Magnéticos bidimensionais

Os efeitos de dimensionalidade podem ser entendidos a partir do alcance de suas interações. Matérias em duas dimensões (2D) são definidos como redes de átomos de poucas camadas onde as interações no plano são consideravelmente mais fortes que as interações entre as camadas. Essa diferença nas forças das interações leva a propriedades únicas nos materiais bidimensionais. A baixa dimensionalidade influencia as propriedades ópticas, magnéticas e mecânicas desses materiais, resultando em comportamentos distintos em comparação com materiais tridimensionais. Então, uma forma de obter materiais magnéticos bidimensionais é quando camadas magnéticas são separadas por camadas de radicais orgânicos que atuam como uma barreira, enfraquecendo as interações de longo alcance entre as duas camadas e, assim, mantendo as interações principalmente no plano. Assim, para materiais ferromagnéticos, onde a principal interação responsável pela ordenação em um sistema com momentos magnéticos localizados é a interação de troca, por originar-se da superposições das funções de ondas e a repulsão colombiana, ela é de curto alcance. Logo é esperado que a interação seja relevante apenas entre íons magnéticos mais próximos, onde se as camadas forem mais afastadas que os compostos no plano poderíamos aproximar o sistema de um material bidimensional.

Uma classe de materiais que pode ser usada para obter materiais magnéticos bidimensionais é a dos compostos  $K_2MF_4$ , onde M representa metais como ferro (Fe), cobre (Cu) e manganês (Mn). Um exemplo desse tipo de material foi proposto por Sachs et al [10]. Eles propuseram que um cristal ferromagnético bidimensional poderia ser obtido pela esfoliação de camadas individuais de  $K_2CuF_4$ . A estrutura do material é ilustrada na Figura 1.1, onde uma camada de  $Cu - F_2$  se forma entre as camadas de  $K - F$ . Os autores apontam que é de conhecimento experimental que Bulks de  $K_2CuF_4$  exibem pequenas anisotropias no plano, logo eles podem ser descritos por uma hamiltoniana de Heisenberg de plano fácil.

O objetivo deste artigo foi descrever um material bidimensional real e estável que pudesse ser usado para observar e estudar a transição de fase de BKT sem a interferência de interações tridimensionais. A possibilidade de observar as transições de fase BKT,

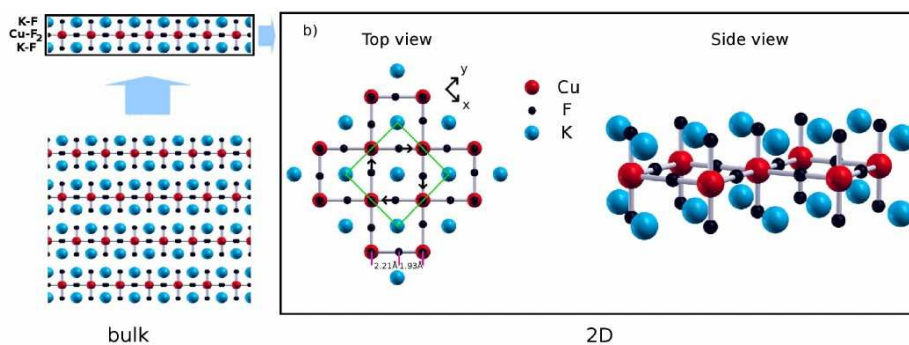


Figura 1.1: O material  $K_2CuF_4$ , um exemplo de material que pode apresentar comportamento magnético bidimensional, onde a rede de Cobre(Cu), em vermelho, é isolada por cadeias de Flúor (F), em preto, e K (Potássio) em azul.

Fonte: Sachs et al [10]

em especial o comportamento dos vórtices do sistema é uma das motivações deste trabalho. Mas antes de discutir diretamente a transição de fase BKT, é importante revisar os conceitos gerais das transições de fases.

## 1.2 Transições de Fase

As transições de fase são eventos comuns no nosso dia a dia. Podemos observá-las quando um pedaço de gelo derrete ao ser retirado da geladeira ou quando pequenas gotas de água se formam na parte externa de uma garrafa de cerveja gelada. Além disso, temos o exemplo de um material magnético que, quando aquecido a uma temperatura elevada, perde sua magnetização. A busca pelo entendimento de fenômenos tão complexos e diversos levou os físicos a procurarem por classificações que englobem as várias transições de fase que ocorrem na natureza. Para ilustrar, vamos primeiro considerar as transições de fase da água e, em seguida, discutiremos o caso do material magnético, utilizando suas características para explorar os diferentes conceitos que envolvem as transições de fase.

### 1.2.1 Transição de fase na Água

As transições de fase ocorrem devido à mudança nos parâmetros termodinâmicos do sistema. No caso da água, ela passa pelo processo de solidificação a  $0^\circ$  Celsius (273K) e pela vaporização a  $100^\circ$  Celsius (373K) a uma pressão de 1 atm. Durante a solidificação, a água líquida perde energia e se transforma em gelo, formando uma estrutura cristalina. Já durante a vaporização, a água absorve energia térmica e se transforma em vapor, adquirindo maior liberdade entre os átomos. Essas transições de fase são pontos bem definidos no diagrama de fase da água e são acompanhadas por mudanças em sua simetria e propriedades físicas.

A melhor forma de ilustrar as transições de fase da água é por meio do diagrama de fase, que é representado pela figura 1.2. Esse diagrama mostra os diferentes estados da água que são divididos por linhas que representam as regiões onde dois estados da matéria podem coexistir. Na linha de coexistência, é necessário fornecer uma quantidade maior de calor para que o sistema possa fazer a transição completa de um estado para outro e aumentar sua temperatura. Essa quantidade de energia necessária durante a transição de

fase é conhecida como calor latente, está representada na figura 1.3.

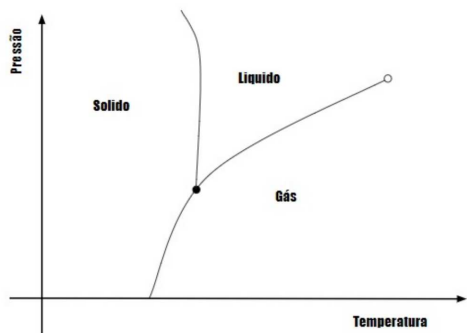


Figura 1.2: Esboço do Diagrama da água. A temperatura crítica é representada pelo círculo não preenchido. O círculo sólido representa o ponto triplo.

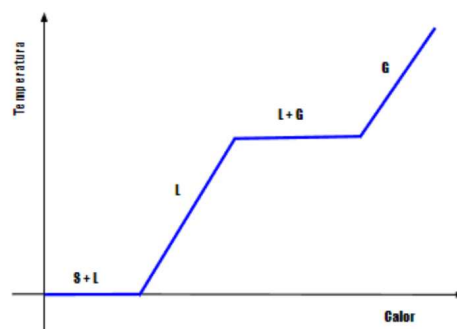


Figura 1.3: Esboço do calor latente. As linhas paralelas ao eixo representa onde duas fases coexistem.

Em condições normais, o calor latente está sempre presente durante as transições de fase da água. No entanto, existe um ponto conhecido como ponto crítico, onde a transição de fase ocorre de forma contínua e o calor específico latente é igual a zero. Esse ponto ocorre durante a transição de fase de líquido para gás, localizado no final da curva de coexistência entre as duas fases. A temperatura na qual essa transição ocorre é denominada temperatura crítica ( $T_c$ ). No ponto crítico, as propriedades líquidas e gasosas da água se tornam indistinguíveis, e não é mais possível distinguir claramente entre as duas fases. A densidade da forma líquida e gasosa se tornam a mesma, e a viscosidade vai a zero neste ponto. Além disso, qualquer tentativa de comprimir a água acima do ponto crítico resulta na formação de uma fase supercrítica, que possui características únicas. Resumindo, para temperaturas abaixo do ponto crítico ( $T < T_c$ ) ao longo da linha de transição de fase, ocorre a transição de fase com a presença de calor latente. No ponto crítico ( $T = T_c$ ), a transição de fase é contínua e não há calor latente envolvido. Acima do ponto crítico ( $T > T_c$ ), para a água, a distinção entre líquido e gás deixa de existir, e não ocorre mais uma transição de fase clássica. Em vez disso, a água se torna um fluido supercrítico com propriedades únicas, onde as características líquidas e gasosas se misturam.

Uma outra característica das transições de fases, é que ao adicionarmos calor no sistema resulta no aumento da entropia do sistema, e elas estão relacionadas pelo calor específico:

$$C_x = T \left( \frac{\partial S}{\partial T} \right)_x \quad (1.1)$$

Durante uma transição de fase, a necessidade de adicionar calor latente implica em uma descontinuidade no calor específico. Essa descontinuidade está relacionada ao gasto de energia necessário para reorganizar as moléculas do sistema durante a transição. No entanto, a ausência de calor latente na transição de fase não implica necessariamente em continuidade no calor específico. No limite que a temperatura aproxima da temperatura crítica, o calor específico diverge na forma

$$c \sim |T - T_c|^{-\alpha} \quad (1.2)$$

onde a divergência pode ser do tipo logarítmica ou lei de potência, e  $\alpha$  é conhecido como expoente crítico, que faz parte de um conjunto conhecido como parâmetros críticos que determinam a universalidade das transições de fase contínuas. Este comportamento não é limitado apenas no calor específico, mas pode surgir em outras quantidades termodinâmicas como a susceptibilidade. A descontinuidade dos parâmetros termodinâmicos foi a primeira tentativa de classificar transições de fases. A primeira classificação foi devido a Paul Ehrenfest, que estabeleceu que a ordem da transição de fase é determinada pela menor ordem da derivada da função de Gibbs em relação a um parâmetro termodinâmico a surgir uma descontinuidade na temperatura de transição. Para a transição de fase da água, quando o sistema apresenta calor latente, a primeira derivada da função de Gibbs exibe uma descontinuidade, indicando que a transição de fase é de primeira ordem. No entanto, quando nos aproximamos do ponto crítico, a descontinuidade surge apenas na segunda derivada da função de Gibbs (calor específico), indicando que a transição de fase é de segunda ordem. A classificação de Ehrenfest foi eventualmente substituída quando se descobriu que, em alguns casos, as derivadas poderiam divergir ao se aproximar da temperatura de transição sem necessariamente ocorrer uma descontinuidade na própria transição (exemplo modelo de Ising).

Atualmente, é comum classificar as transições de fase em apenas dois grupos, com base na presença ou ausência de calor latente no sistema, onde transições de primeira ordem ou descontínuas apresentam calor latente, e todas as outras transições de fases, conhecidas como transições de fase contínuas, não envolvem calor latente. Durante as transições de fase contínuas, surgem várias características comuns em sistemas totalmente diferentes. Essas características são expressas pelos chamados expoentes críticos, como  $\alpha$ , e são parte de um fenômeno conhecido como universalidade, e são extensivamente exploradas principalmente pela teoria dos fenômenos críticos.

Outras características comuns às transições de fase incluem o parâmetro de ordem, a simetria e o comprimento de correlação. Na próxima seção, vamos explorar essas três características em relação aos modelos magnéticos, onde elas são particularmente intuitivas.

## 1.2.2 Transição de fase Magnética

Chamamos de Ferromagneto qualquer material que possua momento magnético espontâneo, ou seja, que apresente momento magnético mesmo que não exista nenhum campo magnético aplicado sobre ele.

Quando um ferromagneto é aquecido até atingir uma temperatura crítica chamada temperatura de Curie ( $T_c$ ), ocorre uma transição de fase. Nessa temperatura, a magnetização total do material desaparece e ele se torna um paramagneto. Embora seja um fenômeno completamente distinto das transições de fase da água, a mudança de estado de um ferromagneto para um paramagneto é uma transição de fase.

A explicação microscópica para a existência de magnetização em materiais ferromagnéticos é baseada no alinhamento dos spins dos elétrons. Como cada spin pode ser associado a um momento magnético, quando os spins se alinham na mesma direção, os momentos magnéticos individuais se somam e resultam em uma magnetização macroscópica. A orientação dos spins magnéticos, que buscam a se alinhar, é influenciada por interações entre eles e a temperatura resultando na magnetização ou na desaparecimento desta. Dentro de um material, existem pequenos domínios, governada pelas interações entre os spins, como é representado pela figura 1.4. Acima da temperatura de Curie, agi-

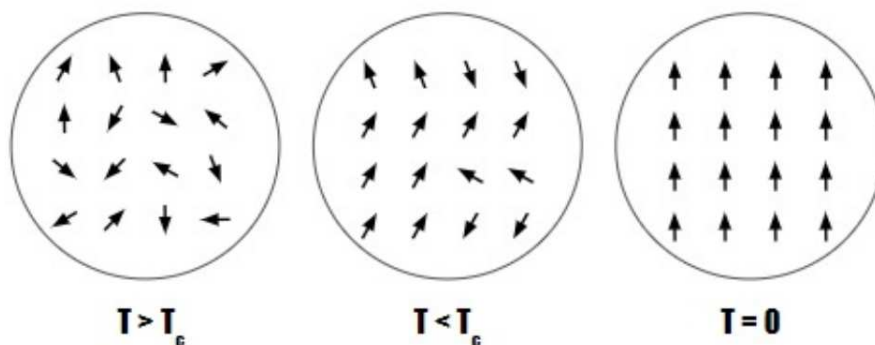


Figura 1.4: Ilustração dos domínios acima da temperatura crítica, abaixo da temperatura crítica e na temperatura igual a zero.

tações térmicas destroem qualquer tipo de ordem, assim os spins pertencentes ao mesmo domínio estão em direções completamente diferentes, tornando o momento magnético igual a zero. Ao chegar na temperatura de Curie, os spins dentro de um domínio começam a se alinhar em uma direção, resultando em magnetização. No entanto, a soma dos diferentes domínios que compõem o material ainda é igual a zero. Abaixo da temperatura crítica, a magnetização aumenta à medida que a temperatura diminui. Esse aumento na magnetização ocorre devido ao aumento do número de domínios com orientações favoráveis em detrimento dos domínios menos favoráveis, ou através da rotação dos domínios menos favoráveis. Dessa forma, o material se magnetiza de forma mais intensa à medida que a temperatura diminui. Na temperatura  $T = 0$ , o sistema atinge sua magnetização máxima, que pode ser menor do que o valor máximo de saturação, onde todos os domínios estão alinhados na mesma direção. Na presença de um campo magnético externo, a existência de uma direção preferencial dos domínios magnéticos é facilmente compreendida. No entanto, na ausência de qualquer campo magnético externo, a presença de uma direção preferencial para a ordem magnética pode ser considerada surpreendente. A explicação reside na existência de qualquer forma de anisotropia, como anisotropias cristalinas, desordens locais ou campo residual dentro do material, os quais seriam suficientes para estabelecer uma direção preferencial.

Conforme discutido anteriormente, e como pode ser observado na figura 1.5, a magnetização varia de forma contínua com a temperatura durante todo o processo de transição. Ao passar pela temperatura crítica, a variação da magnetização muda de comportamento. Essa é uma característica típica de uma transição de fase de segunda ordem. Para a transição do ferromagneto para o paramagneto, duas características comuns às transições de fase surgiram, a quebra de simetria e ordem e desordem. Quando os spins magnéticos estão desalinhados devido à alta temperatura, dizemos que o sistema está em uma fase desordenada. Nessa fase, não há uma orientação preferencial dos spins e a magnetização é zero. À medida que a temperatura diminui e ocorre o ordenamento dos spins magnéticos, a magnetização começa a aparecer e o sistema entra em uma fase ordenada. Nessa fase, os spins se alinham preferencialmente em uma direção, resultando em uma ordem magnética. A transição entre a fase desordenada e a fase ordenada é caracterizada por uma quebra de simetria. Ou seja, o estado ordenado não apresenta todas as simetrias da hamiltoniana, o que é referido como uma quebra de simetria. Na ausência de um campo magnético externo, esse fenômeno é chamado de quebra espontânea de simetria. Podemos ilustrar ao considerar um sistema magnético onde sua hamiltoniana geralmente

exibe uma simetria esférica, quando os spins dos domínios estão alinhados na mesma direção, a simetria do sistema é quebrada de forma que o sistema não é mais invariante sob rotações em todas as direções, exceto em torno do eixo paralelo a magnetização.

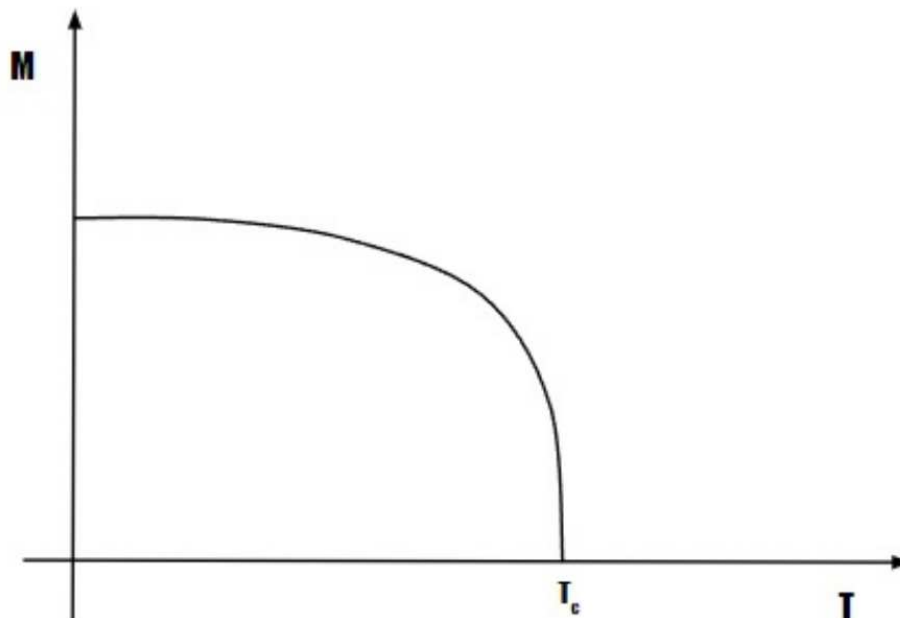


Figura 1.5: Esboço do gráfico da magnetização com a temperatura de um sistema magnético.

Além da transição de fase, a quebra de simetria em modelos magnéticos apresenta diversas consequências, como rigidez do sistema, onde o sistema tende a permanecer no estado com simetria quebrada por ser energeticamente favorável, resultando em um estado magnetizado estável. Surgimento de excitações como ondas de spins, que se propagam pelo sistema influenciando as suas propriedades magnéticas. Formação de defeitos magnéticos no material, que podem formar barreiras que dividem os domínios magnéticos devido a quebra de simetria em dois locais diferentes no sistema.

A existência de ordem, e quebras de simetrias foi uma das consequências obtidas pela teoria de Ginzburg e Landau para transições de fase de segunda ordem [11] [12]. A ideia central é a introdução de um parâmetro de ordem, representado por  $\phi(\vec{x}, t)$ , que descreve a transição de fase de forma quantitativa. Onde o parâmetro de ordem tem média nula na fase desordenada e uma média diferente de zero na fase ordenada. No contexto do ferromagneto, a magnetização é diretamente definida como o parâmetro de ordem, uma vez que ela se torna zero acima da temperatura crítica, agora para outros sistemas, o parâmetro de ordem não é sempre de fácil definição. A água, por exemplo, a transição de fase líquido-gás, o parâmetro de ordem é dado pela diferença de densidade entre os estados. O parâmetro de ordem permite uma descrição fenomenológica das transições de fase em termos de um único parâmetro, ocultando as complexidades dos muitos graus de liberdade presentes em uma descrição microscópica. O conceito por trás da teoria de Landau é expandir um funcional da energia Livre, normalmente referida como energia de Landau, em função do parâmetro de ordem, onde as mudanças de sinais e os diferentes termos da expansão representa transições de fases e quebras de simetrias do sistema. A teoria de Ginzburg-Landau estabeleceu as bases para descrever as transições de fase de contínuas e foi amplamente aplicada, em diversas transições de fase. O sucesso ao obter os parâmetros

críticos, dimensões críticas e a supercondutividade a estabeleceu como um paradigma durante as décadas de 60 e 70 que afirma que uma transição contínua ocorre quando um novo estado ordenado surge de maneira contínua a partir de um estado desordenado de temperatura mais elevada. Nesse novo estado, ocorre uma quebra de simetria em relação à Hamiltoniana do sistema. Em outras palavras, para haver uma transição de fase, uma simetria é necessariamente quebrada durante o processo de transição.

Apesar de uma transição de fase descontínua em geral não apresentar universalidade como nos fenômenos críticos, uma generalização para a teoria de Ginsburg-Landau é obtida considerando a influência de campos externos no parâmetro de ordem[13].

### 1.3 Modelos Magnéticos

Diversos modelos foram criados para descrever sistemas magnéticos, e um dos mais simples e amplamente estudados é o modelo de Ising. Neste modelo, os sítios da rede interagem apenas com seus primeiros vizinhos e podem assumir os valores +1 ou -1. A Hamiltoniana do modelo de Ising é dada por:

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j \quad (1.3)$$

O modelo de Ising apresenta dois estados ordenados: um em que todos os sítios têm spin "up"(valor +1) e outro em que todos os spins estão "down"(valor -1). Esse modelo foi resolvido exatamente em uma dimensão por Ising e em duas dimensões por Onsager [1]. A transição de fase contínua, de um estado ordenado para um estado desordenado, foi observada apenas no modelo de Ising em duas dimensões, através da quebra da simetria "up"(todos os spins +1) - "down"(todos os spins -1) dos sítios. Apesar da sua simplicidade, a importância do modelo de Ising no estudo de transições de fase não pode ser ignorada, pois a maioria dos resultados acima mencionados estavam em mente durante o desenvolvimento do modelo de Ising.

Outro modelo amplamente estudado, com aplicações em diversas áreas, é o modelo de Potts, no qual cada sítio da rede é ocupado por spins  $\sigma_i = 1, 2, 3, \dots, q$ . A interação entre os spins é descrita pela seguinte Hamiltoniana:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \delta_{\sigma_i \sigma_j} \quad (1.4)$$

onde  $\delta_{\sigma_i \sigma_j}$  é o delta de Kronecker. Assim como no modelo de Ising, também ocorre quebra de simetria no modelo de Potts, mas neste caso é referida como simetria de permutação.

A ordem da transição de fase no modelo de Potts depende tanto da dimensionalidade do sistema quanto do parâmetro  $q$ . Por exemplo, no modelo de Potts em duas dimensões, a transição de fase é contínua para  $1 \leq q \leq 4$  e de primeira ordem para  $q > 4$ .

A seguir será apresentado o modelo de Heisenberg e suas anisotropias. Eles podem ser agrupados em um mesmo grupo com o modelo de ising chamado de modelos  $O(n)$  com hamiltoniana 1.3, onde  $n$  é o numero de componentes dos spins colocados na rede, onde  $O(1)$  referente ao modelo de ising,  $O(2)$  o modelo de Rotor Planar, e  $O(3)$  modelo de Heisenberg.

### 1.3.1 Modelo de Heisenberg

Como foi discutido anteriormente, para que um sistema apresente qualquer tipo de ordem, é necessário a existência de uma interação que favoreça este tipo de comportamento. A origem das propriedades ferromagnéticas de um material é de origem microscópica. Ela é uma consequência direta da superposição entre as funções de ondas de dois elétrons muito próximos, o princípio de exclusão de Pauli e a interação coulombiana <sup>1</sup>.

De uma forma mais simples, o modelo de Heisenberg, a interação entre os spins é descrita como uma interação de troca entre dois átomos da rede, com spins  $\vec{S}_i$  e  $\vec{S}_j$ . Essa interação pode ser definida por uma energia de interação dada por:

$$V = -2J\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \quad (1.5)$$

onde  $J$  é a constante de troca que está relacionada à sobreposição das funções de onda dos spins. Como a interação é de curto alcance, a interação ocorre apenas entre primeiros vizinhos e a Hamiltoniana do modelo de Heisenberg pode ser escrita como:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \quad (1.6)$$

onde  $\langle i, j \rangle$  indica a soma sobre primeiros vizinhos. Para  $J > 0$ , a energia é mínima quando os spins estão alinhados, resultando em um comportamento ferromagnético. Para  $J < 0$ , a energia é mínima quando os spins vizinhos se alinham de forma antiparalela, resultando em um comportamento antiferromagnético.

A presença de anisotropias na rede pode ser facilmente adicionada ao modelo de Heisenberg na forma:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - \lambda S_i^z S_j^z \quad (1.7)$$

onde  $\lambda = 0$  é o modelo de Heisenberg, referido como Heisenberg Isotrópico, em que não há direção preferencial para os spins. Para  $0 < \lambda < 1$ , temos o modelo de Heisenberg de plano fácil, em que os spins se alinham preferencialmente no plano. E para  $\lambda < 0$ , temos o modelo de Heisenberg de eixo fácil, em que os spins se alinham preferencialmente na direção  $z$ .

No contexto deste trabalho, o caso mais interessante é quando  $\lambda = 1$ , o que leva à seguinte forma da Hamiltoniana:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y \quad (1.8)$$

Essa Hamiltoniana representa dois modelos distintos, diferenciados apenas pelas componentes presentes e pelo vínculo não linear. No modelo de Rotor Planar, temos o vínculo  $S^2 = (S_i^x)^2 + (S_i^y)^2 = 1$ , e o sistema apresenta apenas as componentes no plano. No modelo XY, todas as três componentes estão presentes, e o vínculo não linear tem a forma  $S^2 = (S_i^x)^2 + (S_i^y)^2 + (S_i^z)^2 = 1$ . É importante destacar que esses dois modelos são frequentemente chamados de modelo XY na literatura. No entanto, distinguir os dois modelos é importante, pois a dinâmica dos spins é obtida através da equação quântica de movimento:

<sup>1</sup>Explicação completa pode ser obtida em livros de Mecânica Quântica, ou no artigo J. H. Van Vleck [14]

$$\frac{\partial \vec{S}}{\partial t} = \frac{i}{\hbar} [\vec{S}, H] \quad (1.9)$$

onde  $[\vec{S}, H]$  é a comutação entre o spin e a Hamiltoniana do sistema. Ao contrário do modelo XY, o modelo de Rotor Planar não apresenta a componente  $S^Z$ , portanto, não há dinâmica associada a esse modelo.

Em um contexto mais geral temos que  $\vec{S}_i$  do modelo de Heisenberg são operadores de spin. Mas para alto valores de spin, podemos tratar os spins em um sistema clássico, isto é, assumimos que podemos conhecer as três componentes de spins e considerando os seus devidos vínculos não lineares. Podemos parametrizar o rotor planar, de forma que a sua hamiltoniana pode ser escrita na forma:

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} \cos(\theta_i - \theta_j) \quad (1.10)$$

Para o modelo XY, podemos parametrizar em coordenadas esféricas:

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} \sin \phi_i \sin \phi_j \cos(\theta_i - \theta_j) \quad (1.11)$$

assim obtemos as hamiltonianas tanto do XY quanto do rotor planar em função dos campos escalares.

Agora sobre as transições de fases no modelo de Heisenberg temos o teorema de Mermin e Wagner nos afirma que simetrias contínuas não podem ser quebradas espontaneamente a temperaturas finitas em sistemas com interações de curto alcance suficientes em dimensões  $d \leq 2$ . Ou seja, em materiais magnéticos descritos por modelos de Heisenberg isotrópico, não ocorre quebra de simetria, a não ser para  $T = 0$ . A simetria rotacional permite que todas as direções de spins podem ser globalmente rotacionadas sem custo de energia, logo qualquer flutuação de longo comprimento de onda, conhecida como ondas de spins<sup>2</sup>, podem ser criadas com baixo custo de energia, e destroem qualquer ordem de longo alcance do sistema. Como não há ordem de longo alcance no sistema para  $T > 0$ , o modelo de Heisenberg, não apresenta quebra espontânea de simetria, logo não há magnetização no sistema sem a presença de campo externo.

Durante a década de 50 até o final da década de 70, o paradigma de Landau, junto com o teorema de Mermin-Wagner definiam a existência de transições de fases em modelos magnéticos. Era esperado que modelos magnéticos bidimensionais com interação unicamente de curto alcance e simetrias contínuas não apresentariam nenhum tipo de transição de fase.

## 1.4 Transições de fase Berezinskii, Kosterlitz e Thouless

Com base no paradigma de Landau e o teorema de Mermin-Wagner, o modelo rotor planar não exibirá transição de fase. No entanto Berezinskii [15] demonstrou que não era tão simples, ao utilizar uma outra técnica conhecida para estudar transições de fase, a função de correlação.

<sup>2</sup>Contexto de modos de Goldstone elas são chamadas de magnons

A função de correlação é utilizada para analisar a distribuição das propriedades físicas. No caso de materiais magnéticos, ela pode ser usada para estudar ordem e os arranjos dos momentos magnéticos dos spins entre materiais. Então, para avaliar a ordem magnética em um sistema, utilizamos a função de correlação spin-spin. Essa função é definida como:

$$G(i, j) = \langle \vec{s}_i \cdot \vec{s}_j \rangle \quad (1.12)$$

A função de correlação spin-spin nos fornece informações sobre o quanto dois spins no sistema estão relacionados, ou seja, ela indica o grau de influência que a direção de um spin no sítio  $i$  exerce sobre a direção do spin no sítio  $j$ . Para o modelo rotor planar, para temperaturas  $T > T_c$ , e a função de correlação depende apenas da diferença entre os vetores  $\vec{r} = |\vec{r}_i - \vec{r}_j|$ , e ela pode ser descrita como um decaimento exponencial [16] [17]:

$$G(i, j) \sim e^{-\frac{|\vec{r}|}{\xi}} \quad (1.13)$$

onde  $\xi$  é chamado de comprimento de correlação, que define a escala do sistema. O comprimento de correlação caracteriza o tamanho da região onde os momentos magnéticos estão correlacionados e alinhados. Se o comprimento de correlação é pequeno, e menor que o tamanho do domínio magnético, isto sugere ordem de curto alcance. Durante transições de fase contínuas, o comprimento de correlação diverge próximo à temperatura crítica de acordo com uma lei de potência:

$$\lim_{t \rightarrow t_c} \xi \sim |t - t_c|^{-\nu} \quad (1.14)$$

onde  $\nu$  é outro parâmetro crítico que define a universalidade das transições contínuas. Isto indica que a correlação está do tamanho ou maior que o domínio magnético considerado, o que indica presença de ordem de longo alcance.

No caso do modelo rotor planar, o decaimento exponencial nos mostra que a correlação decai rapidamente com a distância, e o comprimento de correlação varia com  $\xi \sim a/\ln(T/J)$ , o que indica, em concordância com o teorema de Mermin-Wagner que não há ordem de longo alcance.

Um resultado interessante, obtido também por Berezinskii, é que se considerarmos o regime de baixas temperaturas, que os spins variam de forma lenta com os sítios (suposição de ondas de spin), uma vez que as flutuações térmicas são menores, obtém-se que a função de correlação para baixas temperaturas [16]:

$$G(i, j) \sim |r|^{-\frac{k_b T}{2\pi J}} \quad (1.15)$$

A função de correlação agora decai com a distância seguindo uma lei de potência, um decaimento mais lento do que a exponencial. No entanto, ainda assim só teríamos ordem de longo alcance apenas para  $T = 0$ . Este resultado é muito significativo, e foi apontado por Berezinskii, porque a alteração no comportamento da função de correlação estaria associada a uma nova transição de fase. Dois outros resultados importantes obtidos por Berezinskii [15] foram a divergência da susceptibilidade magnética e o spin-stiffness, que serão utilizadas para obter a temperatura crítica desta nova transição de fase.

Para explicar essa nova transição de fase, é necessário obter uma solução, mesmo que aproximada, do modelo rotor planar. Uma forma de resolver é trabalharmos no limite contínuo, onde consideramos uma rede quadrada, e que os spins variam lentamente e que a distância entre spins próximos é desprezível. Este comportamento representa baixas

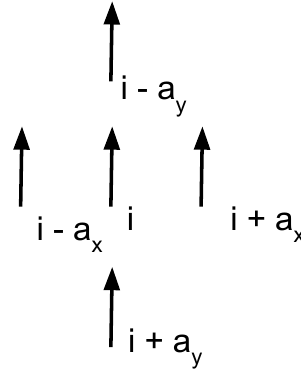


Figura 1.6: Interação entre primeiros vizinhos.

temperaturas e grandes comprimentos de onda. Partindo da Hamiltoniana 1.8, temos que para um sítio  $i$ , o spin interage com os seus vizinhos na forma:

$$P_i^\alpha = S_i^\alpha (S_{i+a_x}^\alpha + S_{i-a_x}^\alpha + S_{i+a_y}^\alpha + S_{i-a_y}^\alpha) \quad (1.16)$$

$\alpha$  representa a componente  $x$ ,  $y$ ,  $z$ , e os termos  $i + a_\gamma$  representam a posição na rede, como ilustrado na figura 1.6. Considerando que os spins variam lentamente, podemos expandi-los em uma série de Taylor

$$S_{i\pm a_x}^\alpha = S_i^\alpha \pm a \partial_x S_i^\alpha + \frac{a^2}{2} \partial_x^2 S_i^\alpha + \dots \quad (1.17)$$

$$S_{i\pm a_y}^\alpha = S_i^\alpha \pm a \partial_y S_i^\alpha + \frac{a^2}{2} \partial_y^2 S_i^\alpha + \dots \quad (1.18)$$

onde  $a$  é o espaçamento da rede. Substituindo 1.16, obtemos

$$P_i^\alpha = 4S_i^\alpha S_i^\alpha + a^2 S_i^\alpha [\partial_x^2 S_i^\alpha + \partial_y^2 S_i^\alpha] \quad (1.19)$$

substituindo na hamiltoniana original, e considerando que no limite contínuo podemos aproximar a soma em uma integral, a Hamiltoniana fica na forma

$$H = -2J \int \frac{dxdy}{a^2} (S^\alpha)^2 - \frac{J}{2} \int dxdy (\partial_x^2 S^\alpha + \partial_y^2 S^\alpha) \quad (1.20)$$

onde este resultado foi dividido por 2 já que cada sítio é somado duas vezes. A primeira integral representa o estado fundamental do sistema, ao impor o vínculo não linear e considerar uma rede infinita, este termo vai ao infinito, logo subtraímos da hamiltoniana original. O segundo termo integramos por partes:

$$H = \frac{J}{2} \int dxdy ((\partial_x S^\alpha)^2 + (\partial_y S^\alpha)^2) - \int dx S^\alpha \partial_x S^\alpha - \int dy S^\alpha \partial_y S^\alpha \quad (1.21)$$

onde os dois últimos termos são iguais a zero, já que

$$\partial_\alpha (\vec{S} \cdot \vec{S}) = (\partial_\alpha \vec{S}) \cdot \vec{S} + \vec{S} \cdot (\partial_\alpha \vec{S}) = \partial_\alpha (S^2) = 0 \quad (1.22)$$

assim, temos que para o modelo XY,

$$H = \frac{J}{2} \int d^2r [(\partial_x S^\alpha)^2 + (\partial_y S^\alpha)^2] + \frac{4}{a^2} (S^z)^2 \quad (1.23)$$

Parametrizando  $\vec{S} = (\sqrt{1-m^2} \cos \phi, \sqrt{1-m^2} \sin \phi, m)$ , onde  $m$  e  $\phi$  são dois campos escalares, temos:

$$H_{xy} = \frac{J}{2} \int d^2r \left[ \frac{m^2 (\vec{\nabla} m)^2}{1-m^2} + (1-m^2) (\vec{\nabla} \phi)^2 + \frac{4}{a^2} m^2 \right] \quad (1.24)$$

assim podemos obter a dinâmica do sistema pela equação 1.9, que no limite contínuo fica na forma:

$$\frac{\partial m}{\partial t} = -\frac{\delta h}{\delta \phi} = -\vec{\nabla} \cdot \left[ \frac{\partial h}{\partial \vec{\nabla} \phi} \right] + \frac{\partial h}{\partial \phi} \quad (1.25)$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \frac{\delta h}{\delta m} = \vec{\nabla} \cdot \left[ \frac{\partial h}{\partial \vec{\nabla} m} \right] - \frac{\partial h}{\partial m} \quad (1.26)$$

Para o modelo XY, as equações de dinâmica ficam na forma

$$\frac{1}{J} \frac{\partial m}{\partial t} = (1-m^2) \nabla^2 \phi - 2m \vec{\nabla} m \cdot \vec{\nabla} \phi \quad (1.27)$$

$$\frac{1}{J} \frac{\partial \phi}{\partial t} = \frac{\nabla^2 m}{1-m^2} - \nabla^2 m + \frac{m (\vec{\nabla} \phi)^2}{(1-m^2)^2} + m (\nabla \phi)^2 + \frac{4m}{a^2} \quad (1.28)$$

A hamiltoniana apresentada na equação 1.24, juntamente com as equações de movimento correspondentes, forma uma teoria de campos completa para o modelo XY. No entanto, ao considerarmos  $m = 0$ , ou seja, a ausência da componente  $S^z$ , a hamiltoniana assume a seguinte forma

$$H = \frac{J}{2} \int d^2r (\vec{\nabla} \phi)^2 \quad (1.29)$$

e as equações de movimento são simplificadas para:

$$\nabla^2 \phi = 0 \quad (1.30)$$

assim temos a teoria de campos para o modelo rotor planar. Estes resultados são comumente referidos como modelo sigma não-linear.

Agora, o objetivo é encontrar a configuração que extremiza a ação, o que é alcançado pela condição de extremo:

$$\frac{\delta H}{\delta \phi(\vec{r})} = 0 \implies \nabla^2 \phi(\vec{r}) = 0 \quad (1.31)$$

essa equação apresenta a mesma forma da equação de movimento. Existem duas soluções para essa equação: a primeira é uma solução constante, representando o estado fundamental em que todos os spins estão alinhados na mesma direção. A solução mais interessante, obtida por Kosterlitz e Thouless [18], é conhecida como vórtice. Essas soluções são obtidas ao considerarmos condições de contorno para a integral de caminho,



Figura 1.7: Configurações típicas do tipo vórtice, onde (a) é uma configuração típica do vórtice com carga topológica  $Q=1$ , e (b) é uma configuração típica do vórtice com carga topológica  $Q=-1$ .

$$\oint \vec{\nabla}\phi(\vec{r}) \cdot d\vec{l} = 0 \quad (1.32)$$

onde para todas as curvas fechadas que circula o centro do vórtice

$$\oint \vec{\nabla}\phi(\vec{r}) \cdot d\vec{l} = 2\pi Q \quad (1.33)$$

caso o caminho não envolva o centro do vórtice, temos

$$\oint \vec{\nabla}\phi(\vec{r}) \cdot d\vec{l} = 0 \quad (1.34)$$

onde  $Q$  é a carga topológica, assume valores inteiros  $Q = \pm 1, \pm 2, \dots$ . A configuração que satisfaz essas condições de contorno para um caminho envolvendo o centro do vórtice, é expressa da seguinte forma:

$$\phi = \pm \arctan\left(\frac{y - y_o}{x - x_o}\right) \quad (1.35)$$

em que a posição  $(x_o, y_o)$  representa o centro do vórtice. O sinal da função está relacionado a carga topológica, onde para  $Q = +1$  temos um vórtice representado na figura 1.7a, e para  $Q = -1$  temos um antivórtice representado na figura 1.7b.

A energia de um único vórtice pode ser estimada considerando que o sistema apresenta simetria esférica, o que implica que o campo é radial  $\phi(r)$ . Portanto, podemos obter diretamente da condição de contorno

$$\oint \nabla\phi(\vec{r}) \cdot d\vec{l} = 2\pi r |\nabla\phi| = 2\pi Q \quad (1.36)$$

$$|\nabla\phi(r)| = \frac{Q}{r} \quad (1.37)$$

substituindo na Hamiltoniana 1.29, para um vórtice de carga  $Q=1$ , temos

$$E = \pi J \ln\left(\frac{L}{a}\right) \quad (1.38)$$

onde  $L$  representa o tamanho da rede e  $a$  é o espaçamento da rede. Logo ao considerarmos uma rede infinita o custo de energia para obter um vórtice em um sistema infinito é infinito, o que sugere que não deveria haver vórtices presentes. No entanto, Kosterlitz e Thouless argumentaram que modelos pertencentes à mesma classe de universalidade do modelo

do Rotor Planar, que exibem ordem topológica, devem conservar a carga topológica do sistema. Portanto, considerando um par de vórtice e antivórtice, que pode ser descrito pela seguinte expressão:

$$\phi = \arctan\left(\frac{y - y_o}{x - x_o}\right) - \arctan\left(\frac{y + y_o}{x + x_o}\right) \quad (1.39)$$

onde um vórtice está centrado no ponto  $(x_o, y_o)$  e um antivórtice no ponto  $(-x_o, -y_o)$ . Ela também é uma solução da equação de movimento, e a energia pode ser obtida da mesma forma, e é dada por:

$$E = 2\pi J \ln\left(\frac{R}{a}\right) \quad (1.40)$$

tomado  $Q = 1$ , e  $R$  é a distância entre o centro dos dois vórtices, logo a energia de um par de vórtice é finita. O que nos resta responder é como os vórtices estão ligados à suposta transição de fase que surge quando consideramos a mudança de comportamento da função de correlação em altas e baixas temperaturas. Para isto Kosterlitz e Thouless usaram um argumento heurístico. Se considerarmos a energia livre de um único vórtice:

$$F = E - TS \quad (1.41)$$

para um sistema de tamanho  $L$ , podemos estimar a entropia considerando o número de configurações onde podemos colocar um vórtice, simplesmente pelo número de posições onde o centro do vórtice pode ser colocado na rede. Para um sistema bidimensional, com espaçamento de rede  $a$ , temos que a entropia é dada por:

$$S = k_b T \ln\left(\frac{L^2}{a^2}\right) \quad (1.42)$$

assim a energia livre para um único vórtice pode ser dado por:

$$F = (\pi J - 2k_b T) \ln\left(\frac{L}{a}\right) \quad (1.43)$$

Note que existe um ponto onde a energia livre muda de comportamento. Para uma temperatura  $T < \pi J/2k_b$  a energia livre vai ao infinito positivo quando consideramos que o tamanho da rede vai ao infinito, logo vórtices isolados são altamente improváveis e pares de vórtices e antivórtices são formados de forma a minimizar a energia do sistema. O fato de que os vórtices possuem carga topológica indica que eles não podem ser destruídos de forma local. Eles podem ser criados ou aniquilados em pares, uma vez que a soma das cargas topológicas deve ser conservada. Quando  $T > \pi J/2k_b$  a energia livre vai ao infinito negativo, logo o sistema pode apresentar vórtices livres.

Este simples argumento mostra o mecanismo por trás da transição de fase BKT, os vórtices existem em pares vórtices-antivórtices em baixa temperatura, quando os vórtices passam pela temperatura crítica:

$$T_c = \frac{\pi J}{2k_b} \quad (1.44)$$

os vórtices desacoplam tornando-se livres no sistema. Uma ilustração desta transição de fase é dada na figura 1.8.

Como foi mostrado, a transição de fase BKT acontece de um estado de quase ordem, representado pelo decaimento algébrico da função de correlação spin spin, para um

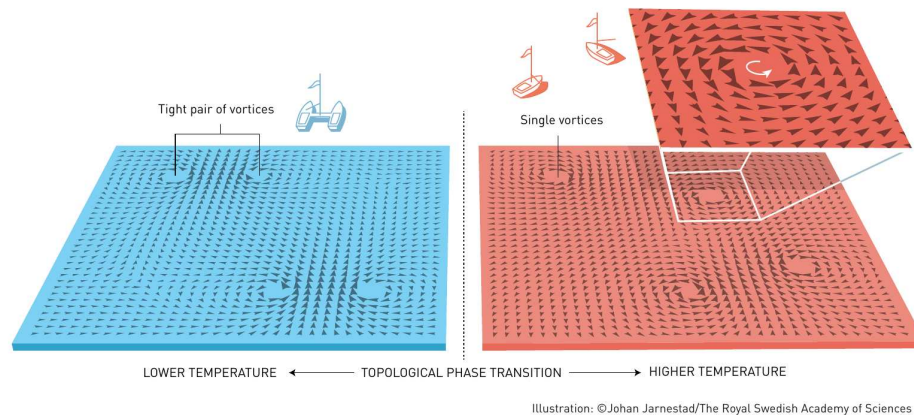


Figura 1.8: Ilustração da transição de fase BKT por Johan Jarnestad, onde a rede azul representa baixa temperatura, e os vórtices permanecem ligados, e a rede vermelha representa altas temperaturas onde os vórtices estão desacoplados

Fonte: Nobel Prize 2016 [19]

estado desordenado, representado pelo decaimento exponencial, logo em nenhum momento o sistema realmente apresenta ordem e assim não há quebra de simetria ou magnetização resultante nestes modelos.

É importante expressar que o decaimento algébrico da função de correlação é de responsabilidade das ondas de spins, mas o mecanismo mais aceito de transição é devido ao desacoplamento dos vórtices proposto por Kostelitz e Thouless (outras interessantes interpretações existem, como a de Patrascioiu e Seiler [?], mas a mais aceita é a de Kostelitz e Thouless é a mais aceita).

O primeiro resultado experimental condizente com a transição de fase BKT foi observada em filmes finos de Hélio 4 por Bishop e Reppy [3], onde as estimativas obtidas por Kostelitz e Thouless para o salto da densidade do estado superfluido é de bom acordo com os experimentos. A ideia é que a superfluidez em sistemas bidimensionais é causada pela presença de vórtices acoplados, para altas temperaturas, quando os vórtices se desacoplam o estado de fluidez convencional acontece.

Kostelitz [20] obteve em um outro artigo os parâmetros críticos para o modelo rotor planar utilizando grupo de renormalização, e confirmou resultados obtidos anteriormente por Berezinskii, sobre a divergência da susceptibilidade magnética e o surgimento do spin-stiffness. Confirmando a transição de fase BKT, como uma transição de fase contínua sem quebra de simetria, em comum acordo com o teorema de Mermin-Wagner, mas jogando abaixo o paradigma de Landau.

## 1.5 Modelos Generalizados

A existência desta nova transição de fase no modelo XY e modelo Rotor Planar, trouxe interesse em especial para o estudo do derretimento de sólidos em duas dimensões, onde o mecanismo de deslocamentos ou declinações no sólido seriam representados pelos desacoplamentos dos vórtices. Mas os experimentos [21] [22] [23] observados na época os classificaram como transições de fase de primeira ordem.

Durante a década de 70, existia um grupo de modelos conhecidos como modelos

$Z(N)$  que podiam apresentar transições de fases de primeira ordem ou contínuas simplesmente variando um parâmetro do sistema. Entre estes modelos temos o Clock Model, onde os spins poderiam apresentar apenas direções discretas, onde divide-se as direções de um spin por um número inteiro  $N$ . No limite  $N$  tendendo ao infinito, recuperamos o modelo Rotor Planar. Outro exemplo é o modelo de Potts discutido anteriormente que dependendo do parâmetro  $q$ , ele pode apresentar uma transição de fase contínua ou discreta.

Em 1984, Domany, Schick e Swendsen [5], apresentaram uma generalização para o modelo rotor planar onde os spins interagem através de um potencial, na forma

$$V(\theta) = 2J \left\{ 1 - \left[ \cos^2 \left( \frac{\theta}{2} \right) \right]^{p^2} \right\} \quad (1.45)$$

o parâmetro  $p$  é um parâmetro generalizador do sistema. Quando  $p = 1$ , temos o modelo de Villain, que é uma representação do modelo rotor planar, onde a periodicidade do potencial é o que importa, e não os detalhes específicos. Domany et al. mostraram que, à medida que  $p$  aumenta, o potencial se torna essencialmente constante e se torna proporcional ao modelo de Potts para valores muito grandes de  $p$ . Próximo ao mínimo de energia, é possível expandir a função cosseno e a energia se torna comparável a energia associada às excitações do tipo vórtice. Por meio de simulações de Monte Carlo, eles observaram que com o aumento do parâmetro  $p$ , o calor específico apresenta picos muito maiores do que para o modelo rotor planar. Também observaram histerese em uma pequena região de temperatura e descontinuidade na energia, todas características de uma transição de fase de primeira ordem. Para garantir que as características da transição de fase de primeira ordem não fossem simplesmente um caso de sistemas finitos, eles obtiveram histogramas de energia na região da transição de fase. Para  $p = \sqrt{50}$ , foi obtida uma estrutura de dois picos, que representa duas fases no sistema. Eles argumentaram que a variação desse novo parâmetro  $p$  pode transformar uma transição de fase contínua em uma transição descontínua, modificando simplesmente a classe dos modelos de  $O(N)$  para  $Z(N)$ . Em outras palavras, o modelo passa de um sistema com hamiltoniana do tipo rotor planar (para  $p=1$ ) para um modelo do tipo Potts, no qual eles mostraram que  $q$  está aproximadamente relacionado com  $p$  de forma  $q \approx 5.5p$ . Para o limite de alta densidade de partículas para um gás de Coulomb, Minnhagen [24] mostrou que as transições de fase de primeira ordem poderiam surgir, de acordo com os resultados obtidos por Domany. Eles sugeriram que essas mudanças no comportamento da transição de fase são devidas à alteração do potencial devido à importância relativa das excitações dos vórtices.

Os resultados de Domany foi contestado por Van Himerberg [25], que utilizando análise de grupo de renormalização de Migdal-Kadanoff (MK), chegou a conclusão que à transição de fase de primeira ordem surge apenas para pequenas redes e para uma rede muito grande o sistema voltaria apresentar características de uma transição de fase BKT. Knops [26] chegou em conclusão similar. No entanto, uma prova rigorosa por Van Enter e Schlomann [27] [28], mostrou que  $n$ -vector models em certas condições podem suportar transições de fase de primeira ordem.

Foram propostas outras generalizações [29] [30], onde os resultados seguem os mesmos princípios do resultado de Domany de que, com o aumento do parâmetro de generalização a hamiltoniana, se tornaria um sistema do tipo Potts ou Ising. O objetivo deste trabalho é mostrar que os modelos generalizados, utilizando o Modelo XY generalizado como base, suporta transições de fase de primeira ordem de acordo com as soluções analí-

ticas obtidas por Schlomann. Para isso, vamos primeiro discutir a generalização proposta por Romano e Zagrebnov, que é o foco desta dissertação, e seus resultados.

### 1.5.1 O modelo XY generalizado

O modelo proposto por Romano e Zagrebnov [6] é uma generalização do modelo XY, denotado por:

$$H_{XY}^{gen} = -J \sum_{\langle ij \rangle} (\sin \theta_i \sin \theta_j)^q \cos(\phi_i - \phi_j) \quad (1.46)$$

onde  $q \geq 1$  e  $q \in \mathbb{N}$ . Em termos das componentes, ele assume a forma:

$$H_{XY}^{gen} = -J \sum_{\langle ij \rangle} [1 - (S_i^z)^2 - (S_j^z)^2 + (S_i^z S_j^z)^2]^{\frac{q-1}{2}} (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y) \quad (1.47)$$

para  $q = 1$ , obtemos o modelo XY nas duas formas da hamiltoniana. No artigo de Romano e Zagrebnov [6], eles utilizaram desigualdades rigorosas para estudar as transições de fase em todos os valores de  $q$ , em duas ou três dimensões. No caso bidimensional, eles mostraram que, para qualquer valor arbitrário de  $q$ , o sistema apresenta desordem a qualquer temperatura finita e passa por uma transição de fase com um decaimento lento das correlações, ou seja, uma quase ordem, com susceptibilidade infinita. Assim, a classe de universalidade pode ou não ser da mesma classe BKT.

Mol et al. [7] [8] estudaram a presença de vórtices e sua estabilidade no modelo de forma analítica e computacional. Eles obtiveram o limite contínuo para o modelo XY generalizado(A),

$$H_{XY}^{Gen} = \frac{J}{2} \int d^2r \left[ (1 - m^2)^q (\vec{\nabla} \phi)^2 + q^2 m^2 (1 - m^2)^{q-2} (\vec{\nabla} m)^2 - \frac{4}{a^2} (1 - m^2)^q + \frac{4}{a^2} \right] \quad (1.48)$$

com as equações de movimento dadas por:

$$\frac{1}{J} \frac{\partial m}{\partial t} = (1 - m^2)^{q-1} \left[ 2qm(\vec{\nabla} \phi)(\vec{\nabla} m) - (1 - m^2) \vec{\nabla}^2 \phi \right] \quad (1.49)$$

$$\frac{1}{J} \frac{\partial \phi}{\partial t} = qm(1 - m^2)^{q-2} \left[ \frac{q(\vec{\nabla} m)^2}{(1 - m^2)} - \frac{q(q-2)m^2(\vec{\nabla} m)^2}{(1 - m^2)^2} + \frac{Lm \nabla^2 m}{(1 - m^2)} + (\vec{\nabla} \phi)^2 - \frac{4}{a^2} \right] \quad (1.50)$$

Ao considerar  $m = 0$ , as equações de movimento reduzem-se à mesma equação do modelo rotor planar. Portanto, o modelo suporta vórtices planares estáticos usuais para qualquer valor de  $q$ . Nesse mesmo trabalho, eles demonstraram por meio de simulações de Monte Carlo que algumas características de uma transição de fase de primeira ordem estão presentes, como a descontinuidade na energia, a dependência do calor específico com o tamanho da rede e sinais de histerese no sistema para pequenos valores de  $q$ . Mas este resultado foi contestado por Komura [31], que utilizando Monte Carlo Híbrido e o método de Wang–Landau mostrou que para  $q = 100$  nenhum sinal de transição de fase de primeira ordem foi encontrado, assumindo que a transição de fase de primeira ordem não deve surgir para qualquer valor de  $q$ . No entanto, uma prova rigorosa por Van Enter et al. [9] revelou, sem especificar o parâmetro  $q$ , que o modelo proposto por Romano e Zagrebnov suporta transições de fase de primeira ordem, mas a incapacidade de obter o

parâmetro  $q$  crítico onde surge a transição de fase de primeira ordem, levou Komura [32] a argumentar que a transição só apareceria para  $q$  muito maior que 100.

Neste trabalho, primeiro iremos obter os resultados por meio de simulações que confirmam a existência de uma transição de fase de primeira ordem para o modelo XY generalizado para pequenos valores de  $q$ , e obter o parâmetro crítico  $q_c$  onde a transição de fase de primeira ordem aparece pela primeira vez, além propor um mecanismo para esta transição de fase. Segundo, iremos mostrar como estes resultados estão relacionados com a solução rigorosa de Van Enter et al [9], e uma forma de modifica-la para obter tanto as temperaturas críticas quanto o parâmetro crítico do modelo.

## Capítulo 2

# Metodologia

Neste capítulo serão mostradas as técnicas utilizadas para obter os resultados de interesse. Inicialmente, abordaremos o Método de Monte Carlo, seguido por uma breve discussão, na última seção, sobre resultados analíticos relevantes, desenvolvido nas últimas décadas denominado medida de Gibbs, que serão adaptados para obter os resultados analíticos.

### 2.1 Mecânica Estatística

A mecânica estatística é uma das técnicas mais impressionantes da física, pois, ao conhecermos a função de partição, podemos obter todas as propriedades termodinâmicas do sistema. A forma geral para uma função de partição é dada por:

$$Z = \sum_n e^{-\beta H_n} \quad (2.1)$$

onde a soma é feita em todos os estados possíveis do sistema,  $H_n$  é a energia do estado  $n$ , e  $\beta = 1/k_b T$ , com  $T$  representando a temperatura e  $k_b$  a constante de Boltzmann.

A probabilidade de o sistema ocupar um estado específico é determinada pelo peso de Boltzmann. Para um estado  $n$  particular, temos

$$P_n = \frac{e^{-\beta H_n}}{Z} \quad (2.2)$$

desse modo, qualquer quantidade termodinâmica, como  $A$ , pode ser obtida através da média estatística

$$\langle A \rangle = \sum_n A_n P_n \quad (2.3)$$

Um exemplo de quantidade termodinâmica é a energia  $E$  do sistema, que pode ser obtida diretamente:

$$\langle E \rangle = \sum_n E_n \frac{e^{-\beta E_n}}{Z} = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} \quad (2.4)$$

e as flutuações da energia são dadas por:

$$\sigma^2 = \langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2 \quad (2.5)$$

A capacidade térmica por partícula a volume constante  $c_v = \frac{1}{N} \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T}$  pode ser obtido diretamente pela definição 2.4:

$$C_v = \frac{1}{Nk_bT^2} (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2) \quad (2.6)$$

No entanto, surgem dificuldades quando o sistema possui um grande número de graus de liberdade e interações complexas entre as partículas, o que torna difícil obter expressões analíticas fechadas para as funções de partição.

Assim, o próximo passo é obter resultados termodinâmicos por meio de cálculos numéricos. No entanto, isso exigiria conhecer todas as configurações do sistema, o que se torna inviável para um sistema contínuo, que apresenta infinitos microestados acessíveis. Mesmo para o modelo de Ising com  $N$  spins, que possui  $2^N$  graus de liberdade, para um grande número de partículas, é impraticável obter todas as configurações do sistema para realizar cálculos numéricos.

A ideia por trás do método de Monte Carlo é considerar apenas os estados mais relevantes do sistema em uma determinada temperatura para calcular as médias. Para isso, é necessário encontrar uma maneira de obter as configurações mais relevantes, permitindo que obtenhamos os parâmetros termodinâmicos através de médias simples.

## 2.2 Método de Monte Carlo

Os métodos de Monte Carlo são algoritmos que utilizam a aleatoriedade para descrever a evolução de modelos de forma estocástica. O termo "Monte Carlo" é derivado dos cassinos em Monte Carlo, devido ao uso de aleatoriedade nesses métodos. Eles têm aplicações em várias áreas da física, onde existem muitos graus de liberdade, como sistemas magnéticos, polímeros e crescimento de cristais, além de serem aplicados em outras áreas como medicina, sociologia e economia.

A ideia principal dos métodos de Monte Carlo é obter um conjunto de configurações aleatórias, obtidas por meio de uma distribuição probabilística usando as configurações anteriores. Isso permite calcular grandezas macroscópicas relevantes do sistema por meio de médias estatísticas.

Para garantir uma boa estatística, um dos conceitos mais importantes por trás dos métodos de Monte Carlo são as cadeias de Markov. Um processo markoviano é um processo estocástico que depende apenas da configuração atual do sistema e não de todos os passos anteriores. Um conjunto finito de configurações obtidas consecutivamente, seguindo o processo de Markov, é chamado de cadeia de Markov. Embora a maioria dos processos reais apresente memória em relação a tempos passados, a importância nos métodos de Monte Carlo é obter configurações independentes para evitar viés estatístico. Utilizando a equação mestra que descreve os fluxos de probabilidade de um processo markoviano,

$$\frac{\partial P_n(t)}{\partial t} = - \sum_{n \neq n'} [P_n(t)W_{n \rightarrow n'} - P_{n'}(t)W_{n' \rightarrow n}] \quad (2.7)$$

onde  $W_{n \rightarrow n'}$  é a taxa de transição do estado  $n$  para o estado  $n'$ . Ela pode ser vista como

uma equação de continuidade para a probabilidade total. Nela está contida a propriedade mais importante dos processos markovianos, que é o fato de que a próxima configuração obtida na cadeia de Markov é totalmente determinada pela configuração anterior. A seguir iremos discutir os algoritmos utilizados neste trabalho.

### 2.2.1 Metropolis

O algoritmo de Metropolis é o primeiro e mais conhecido método de Monte Carlo a ser discutido. Se considerarmos na equação mestra que a probabilidade segue a estatística de Boltzmann, ou seja:

$$P_n(t) = \frac{e^{-\beta E_n}}{Z} \quad (2.8)$$

Para um sistema em equilíbrio, onde a taxa de variação temporal da probabilidade é igual a zero, temos:

$$\frac{W_{n \rightarrow n'}}{W_{n' \rightarrow n}} = e^{\beta(E_{n'} - E_n)} \quad (2.9)$$

assim qualquer taxa de transição que satisfaça essa equação pode gerar cadeias de Markov aceitáveis. A escolha feita por Metropolis <sup>1</sup> é dada por:

$$W_{n \rightarrow n+1} = \min \left[ 1, e^{-\frac{E_{n+1} - E_n}{k_b T}} \right] \quad (2.10)$$

Ou seja, ao diminuir a energia, uma nova configuração é aceita; caso contrário, a aceitação da nova configuração depende do peso de Boltzmann. Após definir a probabilidade de transição, podemos implementar o algoritmo de Metropolis para modelos de spins.

Considerando uma rede de spins, onde a energia do sistema é dada por uma hamiltoniana  $H$ , o algoritmo de Metropolis pode ser descrito pelos seguintes passos:

1. Escolha um spin da rede e sorteie uma nova direção para esse spin.
2. Calcule a diferença de energia  $\Delta E = E_f - E_i$ .
3. Obtenha a probabilidade de transição  $p$  de acordo com a Equação 2.10.
4. Sorteie um número aleatório  $0 \leq r \leq 1$ .
5. Se  $r < p$ , aceite a nova configuração; caso contrário, mantenha a configuração atual.

No caso do algoritmo de Metropolis, é comum definir que uma nova configuração é obtida quando tentamos escolher uma nova direção para cada um dos spins pelo menos uma vez. Isso pode ser feito por varredura, onde cada spin é girado sequencialmente, ou por seleção aleatória de spins  $N$  vezes, onde  $N$  é o número total de spins na rede. Após  $N$  spins serem escolhidos, considera-se que o sistema deu um passo de Monte Carlo (MCS).

A primeira dificuldade do algoritmo de Metropolis é o aumento do tempo computacional à medida que consideramos redes cada vez maiores, pois o número de spins aumenta consideravelmente. Outra dificuldade é conhecida como "critical slowing down", onde na prática, as simulações de Monte Carlo estão correlacionadas durante um tempo

<sup>1</sup>Para uma generalização do método de Metropolis, temos o Metropolis-Hastings [33]

t, conhecido como tempo de autocorrelação. Essa autocorrelação pode causar vieses estatísticos. A autocorrelação depende do algoritmo e do comprimento de correlação  $\xi$ . Como  $\xi$  diverge em uma transição de fase contínua, obter cadeias de Markov em torno da temperatura crítica se torna complicado para diferentes algoritmos, especialmente para os algoritmos locais, como o algoritmo de Metropolis. O que acontece é que com altos tempos de autocorrelação o sistema demora um tempo muito longo para produzir configurações estatisticamente independentes, quebrando um dos pressupostos da cadeia de Markov, causando erros estatísticos.

Uma abordagem para lidar com os problemas do algoritmo de Metropolis é adicionar pequenos incrementos aleatórios às três direções dos spins e reescalar para a unidade, em vez de apenas selecionar uma nova direção. Isso é conhecido como Metropolis modificado, e a aceitação ou rejeição é feita da mesma maneira que no método de Metropolis original. Outra abordagem é o uso de um algoritmo híbrido, que combina diferentes algoritmos para eliminar as correlações em todas as escalas de comprimento. Neste trabalho, iremos combinar o método de Metropolis modificado, a super-relaxação e o algoritmo de Wolff, que serão discutidos a seguir.

### 2.2.2 Wolff

O algoritmo de Wolff [34] é um outro algoritmo de Monte Carlo, onde a principal diferença entre o algoritmo de Wolff e o algoritmo de Metropolis, é que o Wolff atualiza os spins de forma coletiva, em vez de individualmente. Isso significa que em vez de escolher aleatoriamente um spin e alterar sua direção, o algoritmo de Wolff cria clusters de spins e os inverte simultaneamente. Este algoritmo pode ser resumido nos seguintes passos:

- Escolha um sítio aleatório na rede e uma direção aleatória no plano  $\vec{v}$ .
- Marque o sítio  $i$  escolhido como pertencente ao cluster e inverta o spin nesse sítio usando o operador de reflexão  $R(\vec{v})$  dada por:

$$R(\vec{v})\vec{S}_i = \vec{S}_i - 2(\vec{S}_i \cdot \vec{v})\vec{v} \quad (2.11)$$

- Visite os vizinhos do sítio escolhido e calcule a probabilidade de cada vizinho pertencer ao cluster:

$$P(\vec{S}_i, \vec{S}_j) = 1 - \exp \left[ \min \left( 0, 2\beta(\vec{v} \cdot \vec{S}_i)(\vec{v} \cdot \vec{S}_j) \right) \right] \quad (2.12)$$

- Sorteie um número aleatório entre 0 e 1.
- Se o número sorteado for menor do que a probabilidade calculada, adicione o vizinho ao cluster e inverta seu spin.
- Repita os passos 3-5 para todos os vizinhos adicionados ao cluster.
- Continue esse processo iterativo até que todos os vizinhos dos spins ativos e todas as ligações possíveis sejam consideradas.

A vantagem do algoritmo de Wolff é que a probabilidade de um spin ser refletido é sempre igual a 1. Além disso, como podem ocorrer atualizações em todas as escalas de

comprimento, o problema de "critical slowing down" é reduzido significativamente, como é demonstrado numericamente no artigo original[34], o que significa que as simulações podem alcançar equilíbrio mais rapidamente. A ergodicidade é garantida pelo fato de que a probabilidade de refletir um spin ou uma ligação entre dois spins é sempre diferente de zero.

### 2.2.3 Super-relaxação

Por ser um algoritmo determinístico, a super-relaxação, estritamente falando, não é um método de Monte Carlo. No entanto, quando combinada com os dois métodos mencionados anteriormente, torna-se uma importante ferramenta para estudar modelos de spins. A ideia é utilizar a equação de movimento para obter novas configurações do sistema. O algoritmo pode ser descrito em apenas dois passos:

- Escolha um sitio  $i$  da rede e obtenha o campo efetivo  $\vec{B}_{eff}$  sobre ele, tal que:

$$E_i = \vec{S}_i \cdot \vec{B}_{eff} \quad (2.13)$$

- Reflita o Spin  $\vec{S}_i$  através o campo efetivo:

$$\vec{S}_i = -\vec{S}_i + 2 \frac{\vec{S}_i \cdot \vec{B}_{eff}}{|\vec{B}_{eff}|} \vec{B}_{eff} \quad (2.14)$$

note que ao refletir o Spin  $\vec{S}_i$  através do campo efetivo, a energia do sistema é preservada. Logo super-relaxação é um processo microcanônico. Embora um algoritmo determinístico, quando combinado com técnicas estocásticas, como o método de Metropolis e o algoritmo de Wolff, a super-relaxação é muito útil para descorrelacionar as configurações entre os spins.

### 2.2.4 O método de Jackknife

Apesar de todas as técnicas mencionadas acima, as configurações ainda podem estar fortemente correlacionadas, e as médias podem continuar enviesadas. Portanto, uma forma de obtermos estimativas melhores dos erros estatísticos associados aos resultados é através do método de Jackknife. Para implementar o método, dividimos as  $N$  configurações obtidas pelas simulações em  $N_a$  caixas, cada uma contendo  $n_a$  configurações. Em seguida, redefinimos as médias e as variâncias da seguinte maneira:

$$\bar{x} = \frac{1}{N_a} \sum_{j=1}^{N_a} \bar{x}_j \quad (2.15)$$

$$\bar{X}_x = \frac{1}{N_a} \sum_j^{N_a} \bar{X}_j \quad (2.16)$$

onde,

$$\bar{x}_j = \frac{1}{N - n_a} \sum_{k \notin j} x_k \quad (2.17)$$

$$\bar{x}_j^2 = \frac{1}{N - n_a} \sum_{k \notin j} x_k^2 \quad (2.18)$$

$$\bar{X}_j = \bar{x}_j^2 - \bar{x}_j^2 \quad (2.19)$$

onde a notação  $k \notin j$  indica que a soma é feita para todos os valores de  $N$ , exceto aqueles que pertencem à caixa  $j$ . As novas médias termodinâmicas, como por exemplo a energia discutida anteriormente, são dadas pela Equação acima, e a capacidade térmica, que está relacionado à variância, é dado por:

$$C_v = \frac{\beta^2 \bar{x}_E^2}{N} \quad (2.20)$$

As estimativas para as barras de erro são dadas por:

$$\sigma_{\bar{x}}^2 = \frac{N_a - 1}{N_a} \sum_{j=1}^{N_a} [\bar{x}_j - \bar{x}]^2 \quad (2.21)$$

$$\sigma_{\bar{X}}^2 = \frac{N_a - 1}{N_a} \sum_{j=1}^{N_a} [\bar{X}_j - \bar{X}]^2 \quad (2.22)$$

Os subintervalos  $N_a$  devem ser escolhidos de forma a serem descorrelacionados entre si, por isso é importante calcular a autocorrelação temporal  $t$ . Ela é definida para um número de configurações  $n$ , que apresentam observáveis  $x_t$ , dada por:

$$C(k) = \frac{1}{\sigma^2(n-k)} \sum_{t=1}^{n-k} (x_t - \bar{x})(x_{t+k} - \bar{x}) \quad (2.23)$$

onde  $\sigma$  é a variância,  $\bar{x}$  é a média dos observáveis considerando  $n$  pontos. O tempo de autocorrelação  $t$  é definido como:

$$t = \frac{1}{2} C(0) + \sum_{i=1}^n C(i) \quad (2.24)$$

Para obter uma série descorrelacionada, consideramos um tempo  $2t$ . O método Jackknife é uma técnica poderosa no sentido que apresenta um grande ganho nos cálculos das medias, principalmente das variâncias, não há perda em seu uso, ou seja, na pior das hipóteses o seu resultado é esperado é idêntico às medias aritméticas normais.

## 2.3 Propriedades Físicas Relevantes

Agora, com as bases estabelecidas, nesta seção abordarei as propriedades físicas relevantes neste trabalho, especialmente aquelas relacionadas às transições de fase. Nas simulações de Monte Carlo, devido ao tamanho finito, as funções termodinâmicas não apresentam singularidades devido à limitação do comprimento de correlação. Isso impede que as quantidades divergentes ocorram, uma vez que o tamanho das redes é finito. No entanto, é possível obter o comportamento crítico por meio de simulações de Monte Carlo ao analisar o efeito do tamanho finito nas várias quantidades termodinâmicas do sistema. Em geral, quando o comprimento de correlação  $\xi$  se torna comparável ou maior que o

tamanho do sistema  $L$ , temos:

$$\xi \propto L \quad (2.25)$$

portanto, o tamanho do sistema se torna relevante em relação ao comprimento de escala, substituindo  $\xi$  nas relações de escala.

Conforme mencionado anteriormente, utilizaremos o método de Monte Carlo em conjunto com o método jackknife para obter as quantidades termodinâmicas e aplicar as relações de escala para obter a transição de fase BKT. A transição de fase BKT não exibe divergência no calor específico durante a transição, apenas um pico ligeiramente acima da temperatura crítica esperada. Portanto, não é possível determinar a temperatura crítica para a transição de fase BKT pelo calor específico. Mas espera-se que ele divirja com o tamanho do sistema de acordo com uma lei de potência, para transições de fase de primeira ordem,

$$C_v \propto L^d \quad (2.26)$$

onde  $d$  é a dimensão do sistema, no nosso caso,  $d=2$ .

Outras quantidades podem ser utilizadas para obter as transições de fase, em especial a BKT. Considere a componente  $\alpha$  da magnetização definida por:

$$M_\alpha = \sum_i S_i^\alpha \quad (2.27)$$

onde a média é obtida diretamente de 2.15. Assim, a suscetibilidade por spin para a componente  $\alpha$  é obtida pelas flutuações utilizando 2.16 e é dada por:

$$\chi^{\alpha\alpha} = \frac{1}{Nk_bT} \bar{X}^2 \quad (2.28)$$

essas duas quantidades são importantes para entender a ordem das transições de fase, como será discutido a seguir.

### 2.3.1 Cumulante de Binder

O cumulante de Binder de quarta ordem é frequentemente usado como uma estimativa inicial para as transições de fase de um sistema. Essa medida é definida pela equação:

$$U_L = 1 - \frac{\langle (M_x^2 + M_y^2)^2 \rangle}{2 \langle M_x^2 + M_y^2 \rangle^2} \quad (2.29)$$

onde  $M_x$  e  $M_y$  representam as componentes da magnetização no plano. Para um sistema de tamanho  $L$ , esse valor é zero quando a temperatura ( $T$ ) é maior que a temperatura crítica ( $T_c$ ), indicando um estado desordenado. Quando  $T$  é menor que  $T_c$ , o valor desse cumulante é aproximadamente 0.5. Ao calcular na temperatura crítica, esse valor é aproximadamente independente do tamanho da rede, o que nos permite estimar a temperatura crítica simplesmente construindo um gráfico  $U_L$  em função de  $T$  para diferentes tamanhos do sistema e observar onde esses pontos se cruzam

Para uma transição de fase de primeira ordem, Tsai e Salinas [35] mostraram que,

para o modelo de Blume-Capel, o cumulante de Binder assume um valor negativo antes de atingir 0.5. Aqui iremos supor que este comportamento seja válido para o modelo XY generalizado para qualquer valor do parâmetro  $q$ . Embora o cumulante de Binder seja uma técnica de fácil aplicação, pode apresentar dificuldades na determinação precisa da temperatura crítica. Portanto, é importante considerar outras técnicas complementares para obter resultados mais precisos.

### 2.3.2 Susceptibilidade Planar

Uma abordagem para determinar a temperatura crítica é fazer uma análise de tamanho finito (FSS) da susceptibilidade planar. Embora uma transição de fase BKT não apresente magnetização, mesmo abaixo da temperatura crítica  $T_{BKT}$ , foi demonstrado por Kosterlitz [20], utilizando o grupo de renormalização, e por Berezinskii [15], que tanto o comprimento de correlação quanto a susceptibilidade planar divergem com a temperatura ao se aproximar da temperatura crítica por cima e permanecem infinitas para todas as temperaturas abaixo da temperatura crítica. Abaixo da temperatura crítica, como discutido anteriormente, a função de correlação decai de acordo com uma lei de potência e pode ser reescrita como:

$$G \sim \frac{1}{r^\eta} \quad (2.30)$$

onde  $\eta$  é um expoente crítico. Usando essas considerações, é possível mostrar que, de acordo com a hipótese de escala, a susceptibilidade planar se relaciona com o tamanho da rede:

$$\chi \propto L^{2-\eta} \quad (2.31)$$

essa relação pode ser utilizada para estimar o parâmetro  $\eta$  na temperatura crítica ou, como é conhecido, para uma transição de fase BKT,  $\eta = 1/4$ . Portanto, como a susceptibilidade planar é dada por:

$$\chi = \frac{1}{2}(\chi^{xx} + \chi^{yy}) \quad (2.32)$$

podemos assumir que a hipótese de escala para o modelo XY generalizado continua válida, e o valor de  $\eta = 1/4$  para qualquer valor do parâmetro  $q$ . Basta realizarmos um estudo de tamanho finito, onde plotamos as curvas  $\chi/L^{7/4}$  em função da temperatura para diferentes tamanhos de  $L$ , e observar em que ponto essas curvas se cruzam. A validade dessa suposição é testada pela qualidade dos resultados obtidos.

### 2.3.3 Helicidade

O módulo da helicidade é uma medida utilizada para quantificar o grau de rigidez a torções em um sistema físico. Em sistemas que passam por uma transição de fase conhecida como BKT, o módulo da helicidade exibe um comportamento singular próximo à temperatura crítica, indicando uma mudança de rigidez do sistema. O módulo da helicidade pode ser obtida da variação da energia livre devido a uma torção ao longo do sistema em uma coordenada

$$\Upsilon(T) = \frac{1}{N} \frac{\partial^2 f}{\partial \Delta^2} \quad (2.33)$$

considerando que  $F = k_b T \ln Z$ , temos

$$\frac{\partial^2 f}{\partial \Delta^2} = \frac{k_b T}{Z^2} \left( \frac{\partial Z}{\partial \Delta} \right)^2 - \frac{k_b T}{Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial \Delta^2} \quad (2.34)$$

para uma hamiltoniana qualquer

$$\frac{\partial Z}{\partial \Delta} = -\frac{1}{k_b T} \sum_{\sigma} \frac{\partial H}{\partial \Delta} e^{\beta H(\sigma)} \quad (2.35)$$

$$\frac{\partial^2 Z}{\partial \Delta^2} = -\beta \sum_{\sigma} \frac{\partial^2 H}{\partial \Delta^2} e^{-\beta H(\sigma)} + \beta^2 \sum_{\sigma} \left( \frac{\partial H}{\partial \Delta} \right)^2 e^{-\beta H(\sigma)} \quad (2.36)$$

pela definição 2.3, temos

$$N\Upsilon = \left\langle \frac{\partial^2 H}{\partial \Delta^2} \right\rangle - \beta \left[ \left\langle \left( \frac{\partial H}{\partial \Delta} \right)^2 \right\rangle - \left\langle \frac{\partial H}{\partial \Delta} \right\rangle^2 \right] \quad (2.37)$$

Para o modelo XY generalizado, mostramos via apêndice B que a helicidade é dada por

$$N\Upsilon = \frac{1}{2} \left\langle H_{xy}^{Gen} \right\rangle - \beta \left\langle \left[ \sum_{\langle i,j \rangle} (\vec{r}_{ij} \cdot \hat{x}) [1 - (S_i^z)^2 - (S_j^z)^2 + (S_i^z S_j^z)^2]^{\frac{q-1}{2}} (S_i^x S_i^x + S_i^y S_i^y) \right]^2 \right\rangle \quad (2.38)$$

onde  $\langle H_{xy}^{Gen} \rangle$  é a hamiltoniana original. Utilizando as simulações de Monte Carlo, podemos obter o comportamento da helicidade em função da temperatura. De acordo com o grupo de renormalização de Kosterlitz, o módulo da helicidade em um sistema infinito pula de zero para um valor finito dado por,

$$\Upsilon(T_c) = \frac{2}{\pi} k_b T_c \quad (2.39)$$

na temperatura crítica do sistema. Em simulações, não é possível obter resultados para um sistema de tamanho infinito, mas podemos estimar a temperatura crítica do sistema, buscando a interseção da curva  $\Upsilon(T)$  com a reta  $\Upsilon = (2/\pi)k_b T$ .

Devido à dependência do resultado com o tamanho do sistema, uma forma melhor de estimar a temperatura crítica é utilizando uma expressão de escala [36] [37] para o BKT que foi utilizado tanto para sistemas clássicos quanto quânticos, dada por,

$$\frac{\pi \Upsilon}{2k_B T} = A(T) \left[ 1 + \frac{1}{2 \ln(L/L_o)} \right] \quad (2.40)$$

onde  $A(T)$  e  $L_o$  são constantes de ajuste. Essa expressão é exata em  $T = T_c$ , onde  $A(T_c) = 1$ . Assim, fazemos um gráfico de  $A(T)$  em função de  $T$  e buscamos a temperatura onde  $A(T) = 1$ .

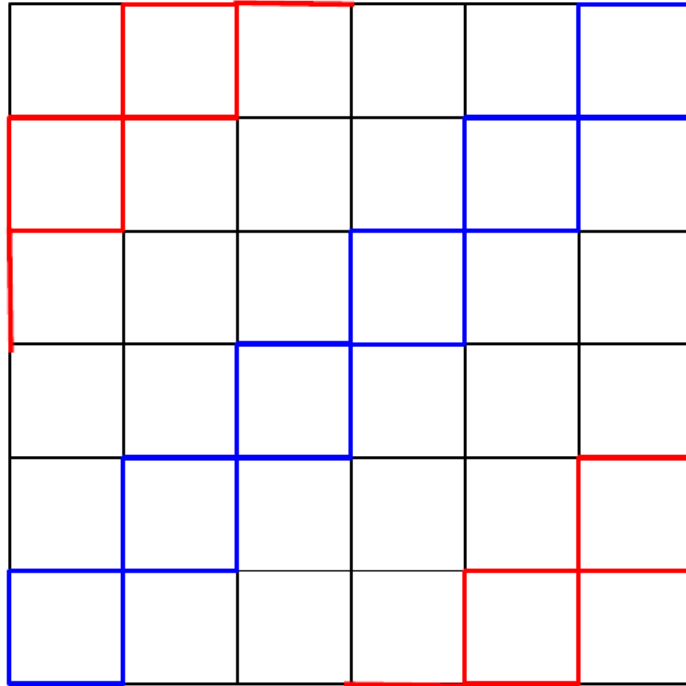


Figura 2.1: A Condição de contorno considerada por Van Enter et al. [9], onde os vértices são as posições dos spins, as linhas vermelhas representam os estados ordenados e as linhas azuis os estados desordenados.

### 2.3.4 Densidade de Vórtice

A discussão sobre a dependência das transições de fases no modelo Heisenberg anisotrópico em relação às excitações topológicas já foi abordada anteriormente. Portanto, é de grande importância investigar como a variação do parâmetro  $q$  pode afetar os vórtices e, conseqüentemente, as transições de fase do sistema. Um conceito crucial nesse contexto é a densidade de vórtices, que pode ser definida da seguinte forma

$$\rho = \frac{\sum_i |Q_i|}{N} \quad (2.41)$$

onde  $Q_i$  representa a carga topológica do vórtice. Para determinar o número de vórtices no sistema, examinamos a rede e calculamos a diferença angular  $\Delta\phi$  entre os spins vizinhos em torno de uma plaqueta. Quando essa soma é igual a  $2\pi$  (ou  $-2\pi$ ), levando em consideração pequenas variações numéricas, identificamos a presença de um vórtice (ou antivórtice). Durante uma simulação, é raro encontrar vórtices com carga topológica maior que  $\pm 1$ , portanto, neste estudo, consideramos apenas vórtices e antivórtices com módulo igual a 1.

## 2.4 Medidas de Gibbs e transições de fases

A medida de Gibbs é uma ferramenta poderosa no campo da mecânica estatística, que recebe o nome em homenagem ao físico Josiah W. Gibbs. Sua formulação atual, proposta por Dobrushin, Lanford e Ruelle (DLR) na década de 60, oferece uma abordagem alternativa para o estudo de sistemas infinitos.

Na mecânica estatística, o foco é entender sistemas de larga escala constituídos por um número muito grande de partículas ou graus de liberdade. A medida de Gibbs proposta por DLR desempenha o papel de caracterizar os estados de equilíbrio desses sistemas. Ela combina o conceito das distribuições de equilíbrio de Maxwell-Boltzmann-Gibbs, com os conceitos da probabilidade condicional de um grupo de variáveis aleatórias, onde cada configuração do sistema está associada a um valor de energia, que reflete as configurações e interações do sistema. A probabilidade de diferentes configurações é determinada pelas energias relativas dessas configurações em relação umas às outras. Apartir de uma perspectiva probabilística, a medida de Gibbs é uma família de variáveis aleatórias que admite probabilidades condicionais, representando uma generalização do ensemble canônico para sistemas infinitos.

Na teoria de probabilidade, a medida de Gibbs também é vista como uma distribuição de processos estocásticos, onde, ao invés de estar indexado pelo tempo, ela é parametrizada pelos sítios de uma rede, e admite distribuições condicionais com respeito a configurações fora de regiões finitas. Em especial, aproximação DLR pode ser interpretada como uma extensão do formalismo de cadeias de Markov e está relacionada a um algoritmo de Monte Carlo conhecido como Amostragem de Gibbs.

Na prática da mecânica estatística, é comum estudar sistemas infinitos, como modelos de spin, simplesmente considerando o número de partículas  $N$  tendendo ao infinito. Nas medidas de Gibbs, para estudar sistemas infinitos, a rede finita de spins é substituída por uma rede inteira  $d$ -dimensional infinita, representada por  $\mathbb{Z}^d$ . Letras gregas são usadas para denotar caixas finitas ou infinitas contáveis de configurações do sistema. Assim, uma medida de Gibbs é definida como:

$$\mu^\Lambda = \frac{1}{Z^\Lambda} \exp[-\beta H^\Lambda(\rho)] \mu_0^\Lambda \quad (2.42)$$

onde  $H^\Lambda(\rho)$  é a hamiltoniana associada a uma caixa  $\Lambda$  que é um subespaço não vazio do sistema. Para Hamiltonianas de primeiros vizinhos, ela é dada por

$$H^\Lambda(\rho) = - \sum_{\langle i,j \rangle \subset \Lambda} U(\rho_i, \rho_j) \quad (2.43)$$

onde  $U$  é o potencial entre os dois spins, que determina o modelo em questão. É importante destacar que a temperatura continua a desempenhar um papel fundamental nas probabilidades do sistema, pois temperaturas mais altas possibilitam o acesso a configurações de energia mais alta, enquanto temperaturas mais baixas favorecem estados de menor energia. A partir disto, a medida de Gibbs captura a preferência estatística no comportamento de equilíbrio do sistema.

A medida de Gibbs possui aplicações em várias áreas, proporcionando uma estrutura para modelar e analisar sistemas complexos com muitas interações em equilíbrio, fornecendo informações valiosas sobre seu comportamento e fenômenos coletivos. Uma das aplicações importantes está relacionada à transição de fase, que está ligada ao conceito de unicidade da medida de Gibbs. Um sistema pode apresentar várias medidas de Gibbs, cada uma correspondendo a diferentes conjuntos de parâmetros. A unicidade da medida de Gibbs refere-se à condição de existir apenas uma medida de Gibbs que descreve a distribuição de equilíbrio do sistema. Um exemplo, é considerar um ferromagneto na presença de um campo magnético externo. Abaixo de uma determinada temperatura, os momentos magnéticos do material alinham-se na mesma direção do campo externo. Ao desligar o campo magnético, o campo magnético macroscópico formado pelos momentos

magnéticos do sistema ainda mantém a mesma direção do campo externo. No entanto, se um campo magnético em uma direção diferente for aplicado, os momentos magnéticos se alinharão nessa nova direção. Cada um desses estados apresenta sua própria estrutura interna e condições, e os estados de equilíbrio distintos são caracterizados por medidas de Gibbs associadas a essas especificações. Esse fenômeno físico reflete a não unicidade da medida de Gibbs. Quando a unicidade da função de Gibbs não é satisfeita, do ponto de vista físico, isso significa que o sistema pode ter vários equilíbrios distintos. Esse fenômeno é interpretado como uma transição de fase.

Um dos primeiros trabalhos relacionados às transições de fase em modelos magnéticos utilizando medidas de Gibbs foi realizado por Dobrushin e Shlosman [38]. Nesse artigo, eles estabeleceram um teorema que afirma que, desde que o potencial seja contínuo, limitado inferiormente, invariante por translação e decresça rapidamente, todo estado de Gibbs em uma rede bidimensional com esse potencial é sempre uma medida invariante sob a ação de um grupo de simetria  $G$ . Embora essas condições possam parecer restritivas, elas não são impossíveis de serem satisfeitas. De fato, o modelo de Heisenberg satisfaz essas condições. Esse teorema nada mais é do que uma generalização do teorema de Mermin-Wagner, em que a invariância em relação ao potencial representa a ausência de quebra de simetria contínua em sistemas bidimensionais.

A possibilidade de existência de transições de fase em modelos bidimensionais com simetrias contínuas também foi estudada por Shlosman em um outro artigo [27], utilizando duas novas técnicas chamadas reflection-positivity e chess-board estimates. Essas técnicas foram amplamente utilizadas para obter transições de fase tanto em casos clássicos quanto quânticos. Shlosman mostrou que é possível obter duas fases diferentes para uma determinada interação em modelos isotrópicos de alcance curto e simetria contínua, desde que a temperatura seja suficientemente baixa. No entanto, todas as fases permanecem invariantes sob uma ação, chamada de  $G$ , no espaço de configurações, ou seja, há possibilidade de transição de fase de primeira ordem sem quebra de simetria. Um exemplo prático desse resultado é obtido diretamente para o modelo XY generalizado, resolvido por Van Enter et al. [9]. Partindo de uma rede  $\mathbb{Z}^d$  e uma hamiltoniana adimensional do modelo XY bidimensional para um espaço finito  $|\Lambda|$ , temos

$$H^\Lambda = - \sum_{\langle i,j \rangle \subset \Lambda} (\sin \theta_i \sin \theta_j)^q \cos(\phi_i - \phi_j) \quad (2.44)$$

onde, para um valor alto de  $q$ , a interação apreciável dos spins existe apenas quando eles estão dentro de uma mesma vala próxima ao valor de  $\theta = \pi/2$ , na qual a largura é da ordem  $1/\sqrt{q}$ . Assim, é possível fazer uma aproximação do tipo vala quadrada da hamiltoniana, que pode ser reescrita como

$$H^\Lambda(\phi, \theta) = - \sum_{\langle i,j \rangle \subset \Lambda} n_\epsilon(\theta_i) n_\epsilon(\theta_j) \cos(\phi_i - \phi_j) \quad (2.45)$$

onde  $n_\epsilon(\theta_i)$ , denota o intervalo de interação, com  $0 \leq \epsilon \leq \pi/2$ . Assim a função característica é dada no intervalo  $[\pi/2 - \epsilon, \pi/2 + \epsilon]$ . A  $H_\epsilon^\Lambda$  em condição de contorno periódica, é associada com uma medida de Gibbs

$$\mu^\Lambda(d\phi, d\theta) = \frac{1}{Z^\Lambda} \exp[-\beta H_\epsilon^\Lambda(\phi, \theta)] \mu_o^\Lambda(d\phi, d\theta) \quad (2.46)$$

utilizando reflexão positiva, foi obtido,

$$\mu_o^\Lambda(d\phi, d\theta) = \prod_{i \in \Lambda} \mu_o(d\phi_i, d\theta_i) \quad (2.47)$$

que denota o fato de ser invariante sobre rotações. A reflexão positiva é necessária para a aplicação do chessboard stimate que permitiu nestes trabalhos estimar a função de partição assumindo que a diferença entre dois spins dentro da mesma vala é pequena, e por meio da integração sobre os intervalos  $|\theta| \leq \epsilon$  e  $|\phi| \leq \pi/20$ , obtiveram

$$Z^\Lambda \geq (C_1 \epsilon \exp(2\beta C_2))^{|\Lambda|} \quad (2.48)$$

onde  $C_1 = C_2 = \cos(\pi/20) \approx 1$ . Essa condição é necessária para o resultado mencionado acima.

A genialidade foi construir uma condição de contorno universal 2.1 que consiste de duas fases diferentes. Uma ordenada, no qual o sítio central e seus vizinhos estão dentro da vala, e um estado desordenado, no qual o spin central e seus vizinhos não estão na vala. A condição de contorno consiste em estados ordenados e desordenados separados por sítios que não pertencem a nenhum dos dois estados, a uma distância de 2 comprimentos da rede na diagonal dos sítios considerados centrais (conforme mostrado na Figura 2.1), integrando todas as configurações compatíveis com este contorno, eles obtiveram uma função de partição restrita dada por

$$Z_{uc}^\Lambda \leq ((2\epsilon)^{3/4} \exp(\beta))^{|\Lambda|} \quad (2.49)$$

A partir das estimativas das funções de partição, é possível mostrar, por meio do teorema 1 no artigo de Van Enter et al. [28], a coexistência de duas medidas de Gibbs, simplesmente tomando

$$\frac{Z_{uc}^\Lambda}{Z^\Lambda} \leq \epsilon^{\frac{|\Lambda|}{(4+C_3)}} \quad (2.50)$$

onde  $C_3$  é uma constante determinada pelas constantes  $C_1$  e  $C_2$ . Com base na proporção entre as duas funções de partição, escolhendo um valor suficientemente pequeno de  $\epsilon$ , os contornos que separam as duas fases são suprimidos em uma determinada região de temperatura. Assim, existe um intervalo em que as duas fases coexistem, representado por um volume infinito de medidas de Gibbs.

Em resumo, se  $\epsilon$  for grande ( $\epsilon > 1$ ), a função de partição total estimada leva a razão a zero, portanto o sistema é desordenado. Para um  $\epsilon$  pequeno ( $\epsilon < 1$ ) essa razão é dominada pela função de partição definida pelo contorno universal, onde o sistema estaria ordenado. Logo pode existir uma região de temperatura que  $Z$  e  $Z_{uc}$  são comparáveis, isto implica que as duas fases coexistem, Logo a transição de fase acontece e é de primeira ordem. No trabalho original, no caso do modelo XY generalizado bidimensional, o valor crítico não foi obtido. Os autores afirmam que, com base em experimentos anteriores com o modelo de Potts, mesmo que tentassem obter o valor de  $q$  por meio de minimização, o valor obtido estaria longe do esperado, devido as aproximações tomadas para o potencial.

Esse resultado está em acordo com os resultados obtidos por Shlosman, Dobrushin [27] [28] e outros trabalhos que mostram que, em duas dimensões, as medidas de Gibbs permanecem invariantes sob rotações, o que implica que a magnetização permanece igual a zero. Mas mesmo assim, tanto para o modelo XY generalizado [9] quanto para o modelo de Domany [28], quando o expoente  $q$  é suficientemente grande, a transição de fase ocorre e é de primeira ordem.

# Capítulo 3

## Resultados e Discussões

Nesta seção iremos apresentar os resultados e serão discutidas as interpretações para cada um deles, onde primeiro iremos passar pelas simulações, para depois os resultados analíticos obtidos utilizando as medidas de Gibbs. As temperaturas de transição e crítica obtidas neste trabalho estão resumidas na tabela 4.1.

### 3.1 Resultados Computacionais

Nesta seção, apresentaremos os resultados computacionais obtidos para o modelo XY generalizado, utilizando o algoritmo de Monte Carlo híbrido discutido anteriormente. Consideramos tamanhos de rede de  $L=16,32,48,64,80,96$ , além de diferentes valores do parâmetro de generalização  $q$ .

Um passo de Monte Carlo consiste do algoritmo Wolf para as componentes planares onde pelo menos  $N(L^2)$  ligações aconteçam, seguido por  $N$  tentativas do Metropolis modificado para as três componentes, onde os spins são selecionados aleatoriamente e modificados por pequenos incrementos aleatórios nas três direções, sendo então renormalizados para o comprimento unitário. A aceitação da nova configuração é determinada de acordo com o algoritmo de Metropolis.  $N$  passos de super-relaxação aplicada de forma usual.

Para estimar as médias termodinâmicas de forma mais precisa, utilizamos o método de Jackknife. Verificamos que o Monte Carlo híbrido utilizado foi eficiente em descorrelacionar as configurações obtidas, mesmo próximas à temperatura crítica. Também realizamos testes com diferentes tamanhos de caixas e verificamos que não houve mudanças significativas nos resultados. Para os resultados apresentados, utilizamos uma única configuração por tamanho de caixa.

Foram realizados 10.000 passos de Monte Carlo para aquecer as amostras até um estado de equilíbrio, seguidos por 300.000 configurações para o cálculo das médias termodinâmicas.

A seguir, analisaremos os resultados obtidos computacionalmente para diferentes quantidades termodinâmicas e discutiremos os principais aspectos observados.

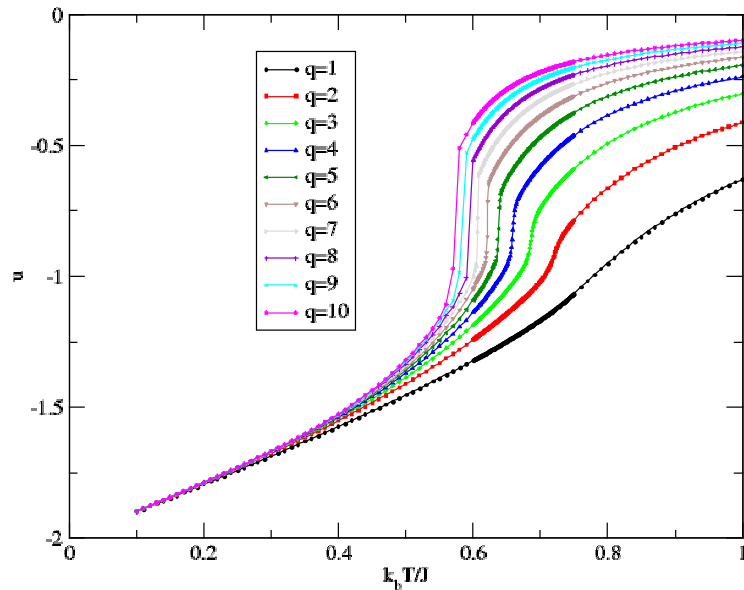


Figura 3.1: Energia por spin para diferentes valores de  $q$  e redes de tamanho  $L=96$ .

### 3.1.1 Energia e Calor Específico

Começaremos analisando a média da energia por spin em função da temperatura. A Figura 3.1, apresenta o gráfico da energia em função da temperatura para diferentes valores do parâmetro  $q$ .

Para o valor  $q = 1$ , que representa o modelo XY clássico, observamos uma variação contínua da energia com a temperatura. Esse comportamento é característico de uma transição de fase do tipo BKT, onde não há quebra espontânea de simetria e a transição ocorre de forma contínua.

Conforme aumentamos o valor do parâmetro  $q$ , começamos a observar uma descontinuidade na energia, indicando a possível presença de uma transição de fase de primeira ordem. Além disso, para valores de  $q$  maiores que 1, observamos a formação de um pico acentuado no calor específico, como mostrado na figura 3.2, em uma determinada temperatura. Isso sugere que o calor específico apresenta uma dependência com o tamanho do sistema, uma característica ausente em uma transição de fase BKT, onde não há divergência do calor específico. À medida que  $q$  aumenta, os efeitos de tamanho finito se tornam cada vez mais evidentes.

Para transições de fases de primeira ordem, é esperado que o calor específico máximo apresente uma relação proporcional com o volume da rede  $C_v^{max} \propto L^d$ , onde  $d$  é a dimensão. Para uma rede bidimensional é esperado que o calor específico máximo cresça de forma proporcional  $L^2$ . No entanto, a figura 3.3, não mostra esse comportamento para nenhum valor de  $q$  obtido. Devido a dificuldade de obter o  $C_v^{max}$ , devido à sua sensibilidade à temperatura e ao longo tempo computacional necessário nas simulações, torna-se difícil realizar uma varredura abrangente de diferentes pontos de temperatura para comprovar a transição de fase de primeira ordem dessa forma.

Para investigar melhor a possibilidade de uma nova transição de fase, computamos

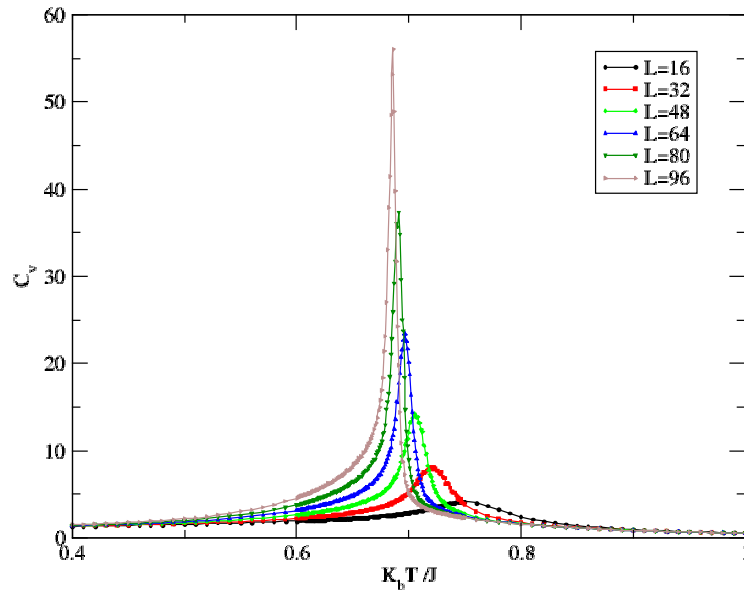


Figura 3.2: Calor específico para  $q=3$  para diferentes tamanhos de rede.

o histograma da energia para um grande número de passos de Monte Carlo em torno da temperatura em que ocorre a descontinuidade da energia, para diferentes tamanhos da rede. Para  $q = 3$ , na mesma temperatura em que ocorre a descontinuidade da energia e o pico do calor específico, surge uma estrutura de dois picos, conforme mostrado na Figura 3.6.

A estrutura de dois picos, como é de conhecimento na literatura, é uma característica clara de uma transição de fase de primeira ordem, onde cada pico representa uma fase do sistema. A temperatura de transição de primeira ordem é definida quando as áreas abaixo dos dois picos são iguais no histograma, ou seja, os dois estados são considerados equiprováveis. É importante destacar a dependência com o tamanho da rede. Para  $q = 3$  a estrutura de dois picos aparece apenas para  $L = 96$ , enquanto para altos valores de  $q$ , ela aparece para tamanhos muito menores, por exemplo, como para  $L = 32$  para  $q = 4$ . Isso é esperado, uma vez que a dependência com o tamanho da rede foi observada tanto para a energia quanto para o calor específico. Portanto, para  $q=2$ , que mostrou uma pequena dependência com o tamanho, a estrutura de dois picos pode ocorrer em tamanhos muito maiores do sistema, em uma pequena faixa de temperatura que não foi abordada neste estudo. Outra característica é que os picos que formam o histograma começam a afastar, o que pode ser, mas não exclusivamente, um aumento no calor latente do modelo o que dificulta a transição entre os dois estados. Para  $q \geq 3$  a diferença entre a temperatura em que ocorre a estrutura de dois picos no histograma e a temperatura obtida para o pico do calor específico foi menor que 1%. Uma melhor estimativa é utilizar o critério de Lee-Kosterlitz [39] para determinar de forma categórica a transição de fase de primeira ordem pelo histograma, mas devido ao tempo computacional, e a dificuldade em obter resultados em pequenos passos de temperatura, este resultado será obtido no futuro.

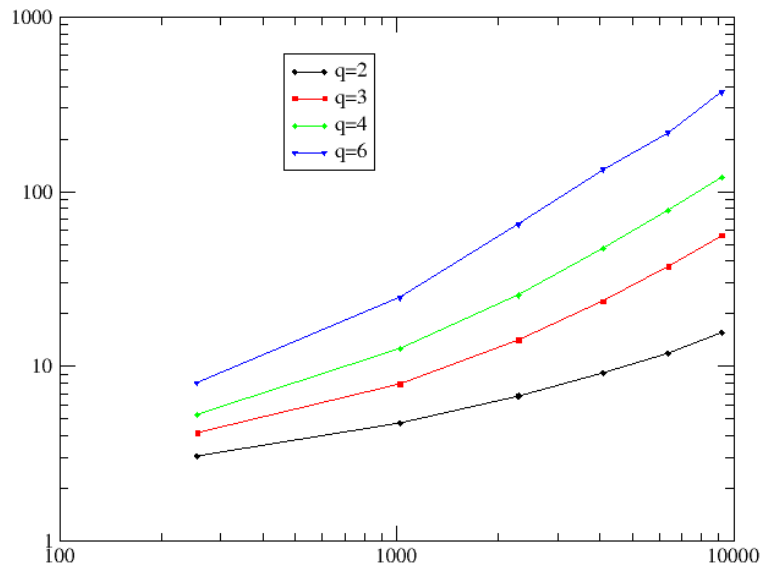


Figura 3.3: Gráfico LogxLog do Calor específico máximo pelo tamanho do sistema ao quadrado, em uma transição de fase.

### 3.1.2 Densidade de Vórtice e as transições de fases

Devido ao papel significativo das excitações topológicas na transição BKT, é crucial obter a densidade de vórtices do sistema. A variação da densidade de vórtice com o parâmetro  $q$  é mostrado na figura 3.4. Assim como para a energia, para o valor  $q = 1$ , que representa o modelo XY clássico observamos uma variação contínua da densidade de vórtice com a temperatura.

À medida que o parâmetro  $q$  aumenta, três comportamentos distintos são observados. O primeiro deles é o aumento da densidade de vórtice com o parâmetro  $q$ , que pode ser explicado considerando que em altas temperaturas, a flutuação das componentes fora do plano  $S^z$ , potencializada com o parâmetro  $q$ , aumenta a energia do sistema, logo para minimizar a energia livre do sistema, a entropia precisa aumentar e assim o número de vórtices do sistema aumenta. O segundo comportamento é o surgimento de efeitos de tamanho finito na densidade de vórtices para  $q > 1$ , mesmo que seja efetivamente bem pequeno. Terceiro comportamento é a ocorrência de uma descontinuidade na densidade de vórtices na mesma temperatura em que ocorre a descontinuidade na energia. Essa informação é suficiente para estabelecer uma correlação entre os dois eventos.

Para investigar como a densidade de vórtices está relacionada à transição de fase de primeira ordem e determinar o valor de  $q$  em que a transição de fase ocorre, utilizamos a densidade de vórtices como um análogo à densidade de água. Ou seja, consideramos a diferença na densidade de vórtices como um parâmetro de ordem do modelo. Assim, traçamos o gráfico de  $\Delta\rho$  em função de  $1/q$ , na temperatura em que se espera a descontinuidade na transição de fase. O primeiro valor de  $q$  em que  $\Delta\rho$  é não nulo corresponde ao valor esperado em que a transição de fase de primeira ordem ocorre.

No gráfico 3.5 foi considerado redes de tamanho  $L = 96$  e as temperaturas foram

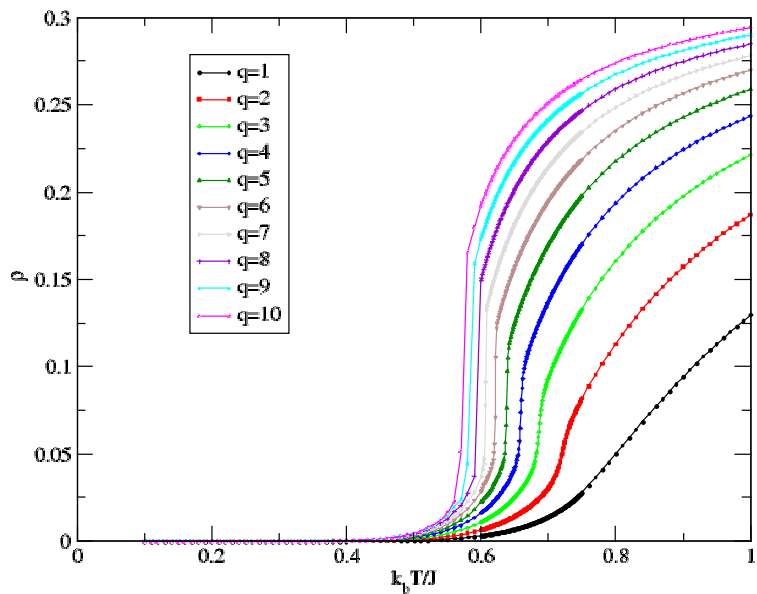


Figura 3.4: Gráfico Densidade de vórtice pela temperatura, para diferentes valores do parâmetro de generalização  $q$  para redes de tamanho  $L=96$ .

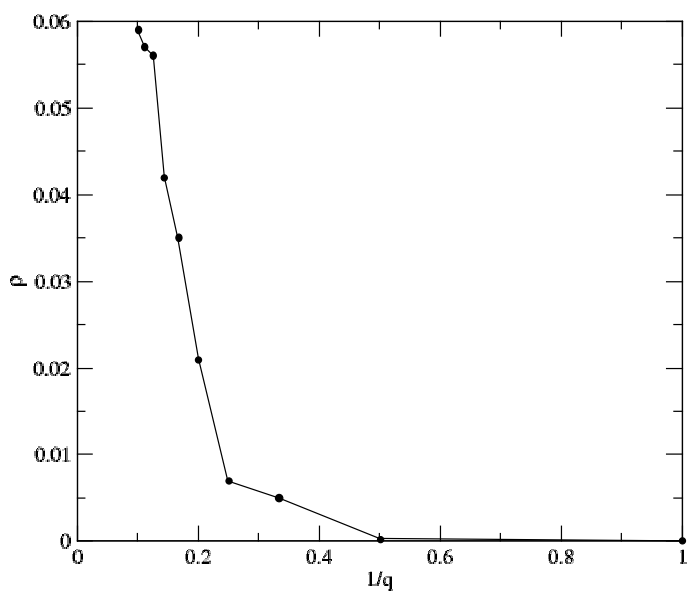


Figura 3.5: Diferença da densidade de vórtice pelo parâmetro  $1/q$ , utilizando

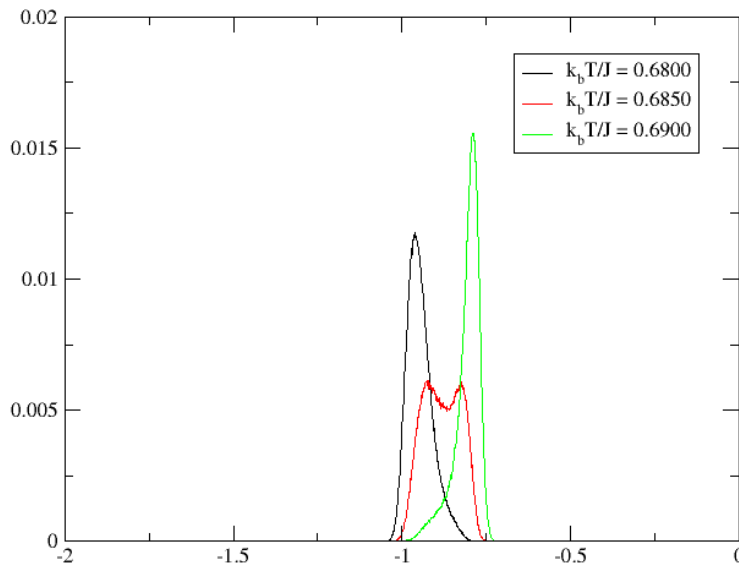


Figura 3.6: Histograma da energia para  $q=3$ , para uma rede de tamanho  $L=96$ .

decididas baseado no gráfico de densidade (figura 3.4), onde a diferença de densidade foi obtida de duas formas. A primeira via observação direta ao gráfico 3.4. A segunda forma foi utilizando os histogramas e definindo uma barreira de energia onde os dois possíveis estados estariam definidos. Assim obtivemos diferentes configurações pertencentes aos dois estados e calculamos a diferença de densidade entre eles. O valor obtido para o parâmetro generalizador crítico  $q_c$  onde a transição de primeira ordem aparece é  $q_c = 3$  é de comum acordo nas duas formas e o resultado obtido anteriormente pelo Histograma já que para  $q < 3$ , não foi observada estrutura dois picos no histograma, o que confirma que abaixo de  $q = 3$  apenas transições de fase de BKT existe.

Agora, considere a figura 3.7. Ela ilustra as duas fases do modelo XY generalizado pelo histograma da energia para o parâmetro  $q = 6$  e  $L = 96$  perto da temperatura de transição  $k_b T/j = 0.6212$ . Estas fases são separadas simplesmente pela densidade de vórtice, ou seja, o mecanismo ligado a esta transição de fase é a proliferação de vórtice causada pelas flutuações das componentes  $S^z$  para fora do plano o que aumenta a energia do sistema. O pico de menor energia representa uma fase de menor densidade de vórtices.

Com base nesses resultados, a existência da transição de primeira ordem é esperada, e ela é causada pela à proliferação de vórtices no sistema. Agora, surge a pergunta: o que acontece com a transição de fase BKT neste sistema? A resposta é fornecida pelos resultados do cumulante de Binder, da Helicidade e da suscetibilidade planar, três técnicas comumente utilizadas para identificar a transição de fase BKT. Esses resultados, juntamente com os resultados anteriores, mostraram a existência de três regiões dependentes do valor do parâmetro  $q$ , que diferem em suas transições de fase, e serão discutidas separadamente nas próximas seções.

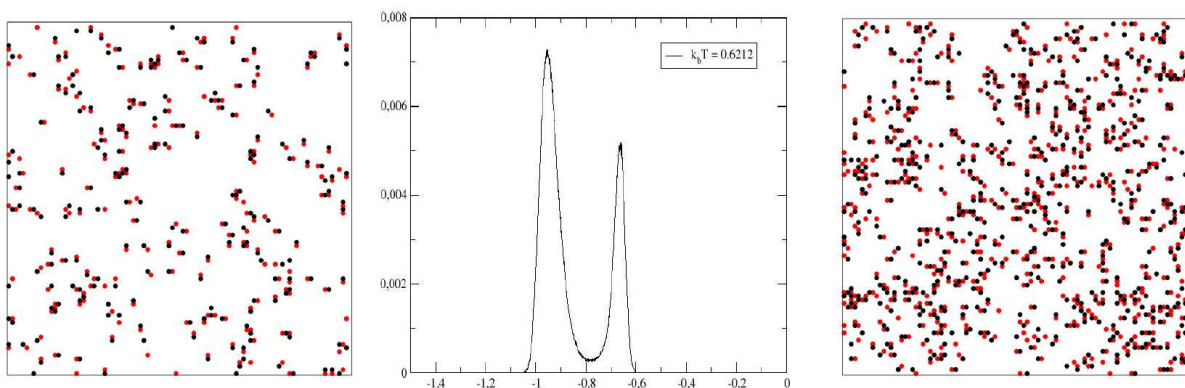


Figura 3.7: As duas fases do modelo XY generalizado representado pelo histograma de  $q = 6$  e  $L = 96$  na temperatura  $k_b T / J = 0.6212$ . Onde o pico de menor energia, representa uma fase de menor densidade de vórtice (a esquerda do gráfico) e o pico de maior energia representa uma fase de maior densidade de vórtice (a direita do gráfico).

### 3.1.3 Primeira Região ( $q < 3$ )

A primeira região é a mais simples, mas é de importância para introduzirmos os resultados esperados para uma transição de fase BKT. Vale lembrar que tanto para modelo XY, aqui representado por  $q = 1$ , quanto para o modelo XY generalizado para  $q = 2$  a energia e a densidade de vórtice são contínuas. O Histograma não apresenta uma estrutura de dois picos e, mesmo para  $q = 2$ , embora apresente pequenas dependências com o tamanho do sistema, não mostrou nenhuma características de uma transição de fase de primeira ordem.

A primeira forma de obter a temperatura para a transição de fase BKT é o cumulante de Binder como foi discutido anteriormente.

O gráfico típico obtido por esta técnica é representado para  $q = 2$  na figura 3.8. Note que as curvas para os diferentes tamanho de  $L$  se cortam na temperatura  $T_c = 0.68(8)$ . A dificuldade pode estar em identificar exatamente o ponto onde as curvas se cruzam. Em comparação com os resultados de técnicas mais sofisticadas, como o FSS da susceptibilidade e a Helicidade, a temperatura de transição BKT é sempre um pouco maior que a temperatura esperada.

Para obter uma melhor estimativa da temperatura crítica, utilizamos o FSS da susceptibilidade planar, representada pelo gráfico 3.9. Novamente, como discutido anteriormente, o ponto onde as curvas se cruzam é a temperatura crítica. Para  $q = 1$  obtivemos o valor esperado pela literatura,  $T_c = 0.69(9)$ , enquanto para  $q = 2$ , obtivemos  $T_c = 0.67(9)$ .

A última maneira de obter a temperatura crítica é através do módulo da Helicidade, onde podemos estimá-la considerando o gráfico 3.11. Onde mostra claramente a dependência da helicidade com o tamanho da rede. Em um sistema infinito, quando o sistema passa pela transição de fase BKT, o módulo da helicidade pula de zero para um valor finito  $\frac{2}{\pi} k_b T_c$ . Portanto, podemos estimar a temperatura crítica simplesmente encontrando o ponto onde a reta  $\frac{2}{\pi} k_b T$  cruza uma temperatura  $T$ . Para  $L = 96$ , esse valor ainda é muito maior do que o valor esperado em relação às medidas anteriores. Logo a melhor forma de obter a temperatura de transição BKT pela helicidade, é a partir do FSS. Os resultados para diferentes  $q$  estão representados na figura 3.12. A reta amarela representa  $A(T) = 1$ , ou seja, o ponto onde as duas curvas se cruzam é a temperatura crítica do sistema.

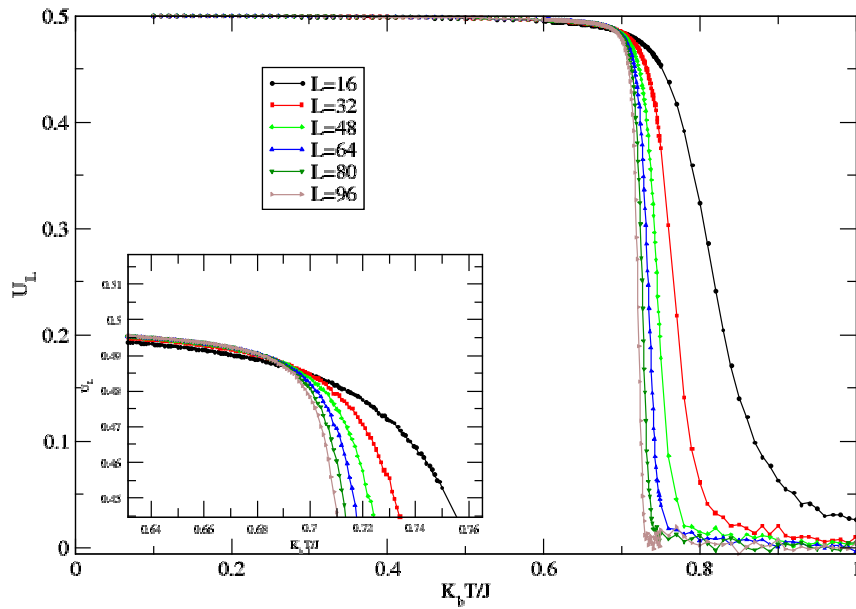


Figura 3.8: Cumulante de Binder para  $q=2$  em função da temperatura para diferentes tamanhos da rede.

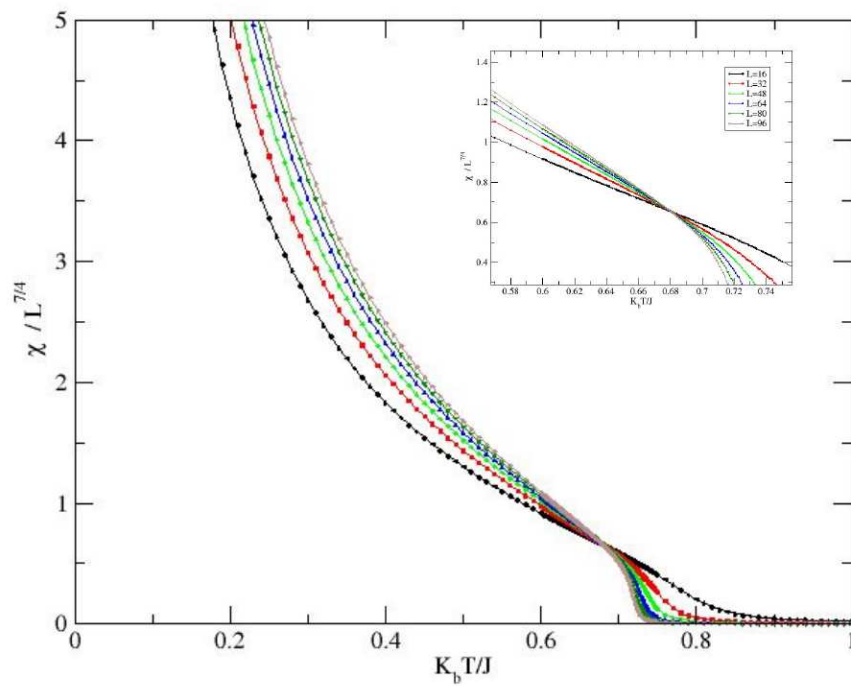


Figura 3.9: Susceptibilidade Planar para diferentes tamanhos da rede para  $q=2$

Como pode ser observado pela figura 4.1, para  $q = 1$  o FSS da helicidade e o FSS da susceptibilidade planar estão na mesma ordem de grandeza. A medida que  $q$  aumenta os dois resultados começam a se afastar. Agora para qualquer parâmetro  $q \geq 3$  a transição de fase de primeira ordem surge, começando e entramos na segunda região para as transições de fases.

### 3.1.4 Segunda Região ( $3 \leq q < 6$ )

Para  $3 \leq q$  a energia e a densidade de vórtices apresentam uma descontinuidade e o histograma apresenta uma estrutura de dois picos, ou seja, o sistema passa por uma transição de fase de primeira ordem.

Nesta região, o cumulante de Binder mostra um salto para valores negativos antes de atingir o valor máximo de  $U_L = 0.5$ , conforme ilustrado na Figura 3.10. De acordo com o resultado de Tsai e Salinas [35] o ponto em que o cumulante de Binder é mínimo coincide com a região onde se espera a temperatura de transição e a descontinuidade na energia. Portanto, o cumulante de Binder pode ser utilizado para identificar a transição de fase de primeira ordem.

O ponto onde as curvas se interceptam ainda representa a transição de fase BKT, para o parâmetro  $q = 3$ , temos uma temperatura de BKT  $T_c = 0.65(7)$ , e a temperatura de Transição  $T_T = 0.69(2)$ . Em relação à susceptibilidade planar e à helicidade, os resultados da FSS (Finite-Size Scaling) são obtidos de forma convencional. Para  $q = 3$ , a susceptibilidade planar possui temperatura  $T_c = 0.65(5)$ , enquanto a helicidade possui temperatura  $T_c = 0.63(8)$ . Está região o sistema passa por duas transições de fases diferentes. Se aumentarmos a temperatura do sistema, ele passa por uma transição de fase BKT relacionado a dissociação entre os vórtices. Ao continuar aumentando a temperatura do sistema a proliferação instantânea de vórtices no sistema faz com que o sistema passe por uma transição de fase de primeira ordem. A medida que o parâmetro  $q$  aumenta, a temperatura de transição e a temperatura BKT ficam muito próximas, até que para  $q = 6$ , elas estariam na mesma ordem, e assim temos a próxima região.

### 3.1.5 Terceira Região ( $q \geq 6$ )

Para  $q \geq 6$ , observa-se novamente uma descontinuidade na energia e o histograma exhibe uma estrutura de dois picos, indicando uma transição de fase de primeira ordem no sistema. No entanto, tanto o cumulante de Binder quanto a susceptibilidade planar não fornecem uma estimativa confiável da temperatura nessa faixa.

No caso específico de  $q = 6$  (conforme ilustrado na Figura 3.13), o cumulante de Binder continua apresentando saltos para valores negativos antes de atingir o valor  $U_L = 0.5$ . No entanto, as diferentes curvas correspondentes a diferentes tamanhos de rede não apresentam um ponto comum de interseção. Essa dificuldade também se reflete na susceptibilidade planar, conforme demonstrado no gráfico da Figura 3.14, impossibilitando uma estimativa precisa da temperatura da transição BKT do sistema. Essa limitação decorre da nossa suposição de que  $\eta = 1/4$  seria válido para qualquer valor de  $q$ , sugerindo que a universalidade do sistema pode ter sido alterada com o aumento do parâmetro  $q$ .

A única técnica que continua produzindo resultados consistentes é a helicidade. Isso pode ser explicado pelo fato de que a helicidade está relacionada à manifestação da desordem causada pelos vórtices no sistema. Quando as duas transições de fase se

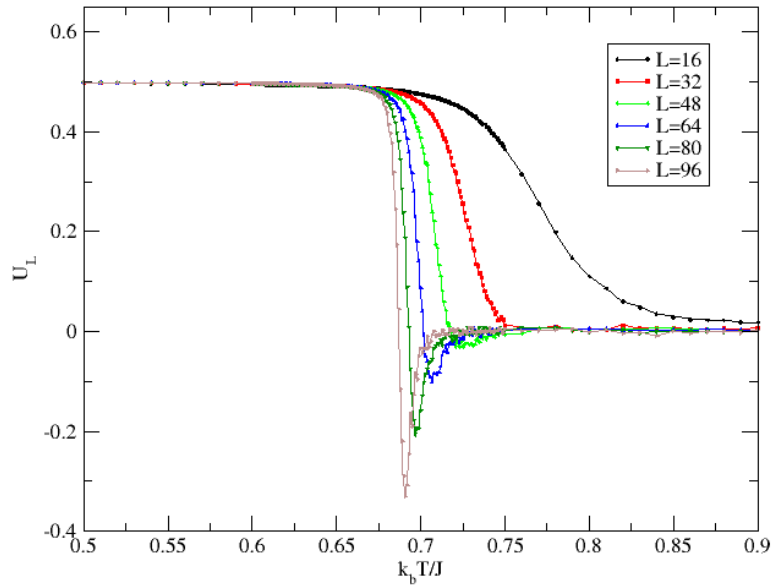


Figura 3.10: Cumulante de Binder para  $q=3$  em função da temperatura para diferentes tamanhos da rede.

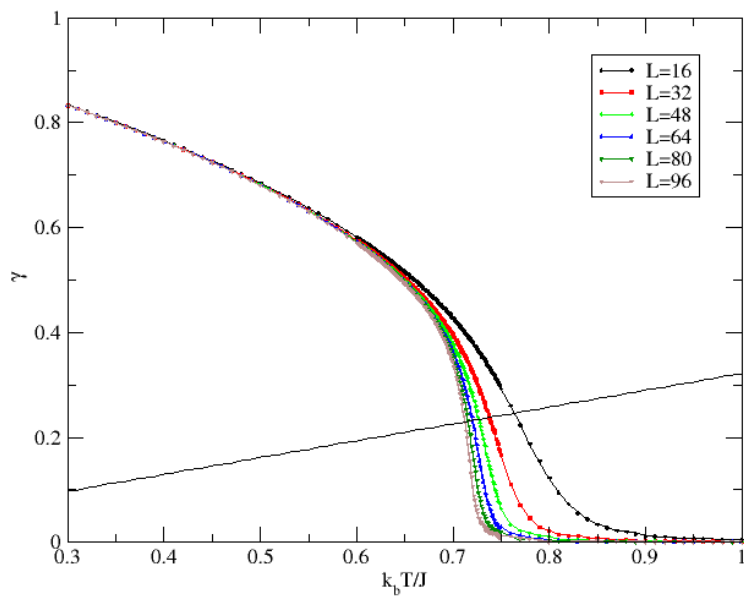


Figura 3.11: Modulo da Helicidade em função da temperatura para  $q=2$ , para diferentes tamanhos de rede.

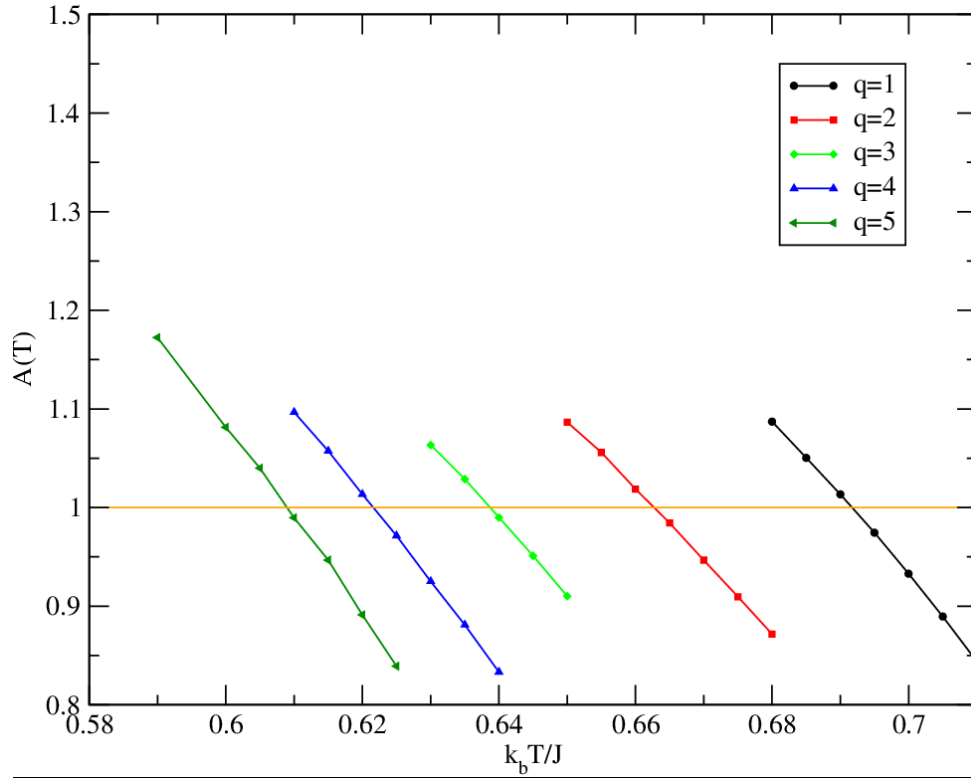


Figura 3.12: Análise de tamanho finito da Helicidade para alguns valores de  $q$ , onde redes de tamanho  $L=16,32,48,64,80,96$  foram utilizados para obter os resultados.

sobrepõem, a presença de vórtices livres, seja por dissociação ou proliferação, é identificada da mesma forma pelo módulo da helicidade.

## 3.2 Resultado Analítico

Retornando aos resultados obtidos por Van Enter et al [9], eles estimaram a função de partição,

$$Z^\Lambda \geq (C_1 \epsilon \exp(2C_2 \beta))^{| \Lambda |} \quad (3.1)$$

e a função restrita,

$$Z_{uc}^\Lambda \leq ((2\epsilon)^{3/4} \exp(\beta))^{| \Lambda |} \quad (3.2)$$

onde existe três grandezas de importância, o  $\beta$ , a vala, e a constante de separação entre os spins. A constante de separação foi atribuída um valor próximo a 1, ao tomar  $C_1=C_2 = \cos(\pi/20)$  e a vala fornece as propriedades necessárias para o sistema para que ocorra uma transição de fase de primeira ordem.

No trabalho original as interações foram substituídas por uma função degrau. O que faremos é tomar que a função  $\epsilon$  pode ser estimada por um grupo de funções gamas dependente do parâmetro  $q$  que preserva a interação média do sistema, assumindo que a área desta nova função seja a mesma área dada pela função degrau. Assim, obtemos

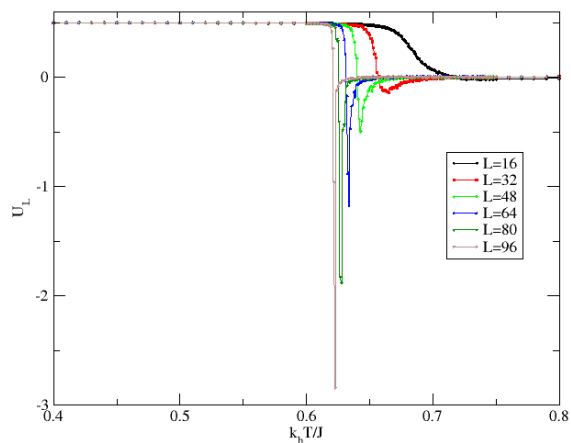


Figura 3.13: Cumulante de Binder para  $q=6$  em função da temperatura para diferentes tamanhos da rede.

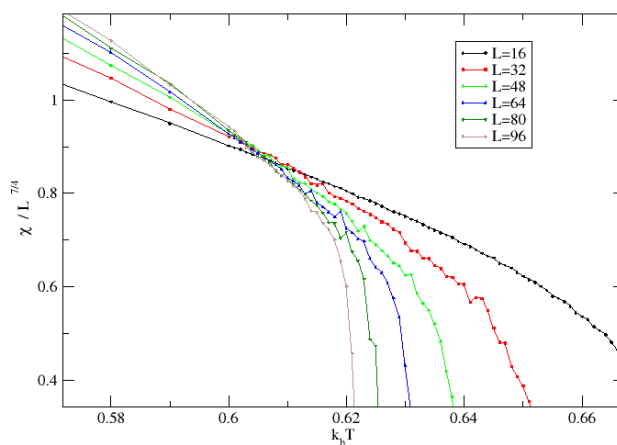


Figura 3.14: Susceptibilidade planar para  $q = 6$  em função da temperatura, para diferentes.

$$\epsilon(q) = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \left( \frac{2^{-q} \sqrt{\pi} \Gamma[\frac{1}{2} + q]}{\Gamma[\frac{1+q}{2}]^2} \right)^{-1} \frac{\Gamma[\frac{1+q}{2}]}{\Gamma[1 + \frac{q}{2}]} \quad (3.3)$$

aplicando as condições para que a transição de fase seja de primeira ordem ( $\epsilon \leq 1$ ) obtemos que o parâmetro crítico  $q_c = 2.28851$ , considerando que  $q \in \mathbb{N}$ , o menor parâmetro crítico é igual a  $q_c = 3$ , o qual é o mesmo valor obtido nas simulações.

Para obter as temperaturas de transição, iremos supor  $|\Delta\phi|$  como um parâmetro livre, de tal forma que pode ser maior  $\pi/20$ , mas suficiente próximo para que  $|\cos(|\phi|/d)| \simeq 1$ , ou seja  $d \geq 3$ . Partindo da equação,

$$\frac{Z_{uc}^\Lambda}{Z^\Lambda} \leq \frac{|(2\epsilon)^{\frac{3}{4}} \exp(\beta)|^{|\Lambda|}}{|C_1 \epsilon \exp(2C_2\beta)|^{|\Lambda|}} \leq 1 \quad (3.4)$$

já que  $Z^\Lambda \leq 1$  e  $Z_{uc}^\Lambda \leq |(2\epsilon)^{\frac{3}{4}} \exp(\beta)|^{|\Lambda|}$  por construção. Podemos reescrever esta equação como,

$$\exp[\beta(1 - 2C_2) - \frac{1}{4} \ln(\epsilon) + \frac{3}{4} \ln(2) - \ln(C_1)] \leq 1 \quad (3.5)$$

$$\beta(1 - 2C_2) - \frac{1}{4} \ln(\epsilon(q)) + \frac{3}{4} \ln(2) - \ln(C_1) \leq 0 \quad (3.6)$$

assim, podemos estimar a temperatura crítica em que ocorre a transição de fase de primeira ordem, ajustando as constantes  $C_1$  e  $C_2$ . Os resultados obtidos estão em acordo com as temperaturas críticas mostradas na Tabela 4.1. Os ângulos encontrados para as constantes também concordam com nossas suposições e com as simulações. Tanto  $C_1$  quanto  $C_2$  convergem para um valor próximo a  $\sim 40^\circ$ , independentemente do parâmetro  $q$ , e o ângulo médio obtido nas simulações foi aproximadamente  $\sim 45^\circ$  próximo à temperatura crítica, com pequenas variações para o valor de  $q$ .

## Capítulo 4

# Conclusões e Perspectivas

Neste trabalho, investigamos as transições de fase do modelo XY generalizado, considerando diferentes valores do parâmetro de generalização  $q$ . Utilizamos o algoritmo de Monte Carlo híbrido e técnicas de análise de tamanho finito para obter resultados computacionais e caracterizar as transições de fase.

Nossos resultados mostram que o valor do parâmetro  $q$  tem um impacto significativo nas propriedades termodinâmicas do sistema e a partir do histograma mostramos que para um determinado valor de  $q$ , o modelo XY generalizado suporta transições de fase de primeira ordem.

Identificamos três regiões distintas de transições de fase, dependendo do valor de  $q$ , que podem ser resumidas da seguinte forma:

1. Na primeira região ( $q < 3$ ), temos um regime do tipo BKT, no qual a energia e a densidade de vórtices variam continuamente com a temperatura. Os resultados são consistentes com um modelo XY usual.
2. Na segunda região ( $3 \leq q < 6$ ), as transições de primeira ordem e BKT coexistem neste modelo, ocorrendo em temperaturas diferentes. A temperatura de transição é maior que a temperatura da transição de fase BKT do sistema.
3. Na terceira região ( $q \geq 6$ ), ainda observamos transições de fase de primeira ordem, mas as técnicas de análise das transições de fase BKT não fornecem resultados conclusivos. Isso sugere uma possível mudança na universalidade do sistema e a extinção completa da transição de fase BKT. Mas, uma análise mais cuidadosa é necessária nessa região.

Além disso, mostramos uma forma de obter o parâmetro de generalização crítico  $q_c$  onde surge a transição de fase de primeira ordem neste sistema considerando a densidade de vórtice como parâmetro de ordem e com as modificações adequadas, também mostramos que é possível obter a temperatura crítica e o parâmetro  $q$  diretamente da solução de Van Enter et al. [9], em acordo com as simulações.

Retomando ao resultado de Van Enter et al. para o modelo XY generalizado, eles mostraram analiticamente que para um certo valor de  $q$ , o sistema apresenta duas fases distintas. Uma fase "Ordenada" (observe que o uso das aspas é para destacar que em nenhum momento existe ordem de Longo alcance), corresponde a uma configuração onde todos os spins estão dentro de um valas e interagem com eles mesmos. A outra fase, considerada como fase desordenada, é caracterizada por spins vizinhos residindo em

diferentes valas logo a interação não existe, ou é considerada desprezível. Notavelmente, Van Enter et al. mostrou que essas duas fases podem coexistir no sistema. Para a "fase desordenada" a fraca interação entre os spins, aumenta a energia do sistema o que leva a proliferação de vórtices, como foi ilustrado na figura 3.7. Por outro lado, quando todos os spins pertencem a mesma vala, as interações se tornam fortes, e a energia diminui, o que resulta em uma redução significativa da densidade de vórtices. A transição de fase do estado "desordenado" para o estado "ordenado" é acompanhado com uma descontinuidade na energia, na densidade de vórtice indicando uma transição de fase de primeira ordem. Uma vez que o modelo XY generalizado não apresenta ordem de longo alcance real e quebra de simetria e por consequência não há magnetização, estes resultados estão de acordo com o Teorema de Mermin-Wagner e o Teorema de Dobrushin-Schlomann. Logo a transição de fase de primeira ordem no modelo XY generalizado pertence a uma classe diferente da transição de fase BKT, e apesar do agente das duas transições serem o mesmo, o mecanismo é diferente.

Em resumo, nosso estudo proporciona uma compreensão detalhada das propriedades de transição de fase do modelo XY generalizado. Os resultados obtidos claramente mostram a ocorrência de transições de fase de primeira ordem e seu mecanismo subjacente. As classes de transições de fase concordam com os resultados obtidos analiticamente, e o mecanismo dessa nova transição de fase é devido à proliferação de vórtices no sistema. O próximo passo é investigar se outros modelos que exibem transições de fase de primeira ordem, como o modelo de Domany, podem ser explicados da mesma maneira. Além disso, estamos aplicando outras técnicas nesse modelo, como a repesagem de histograma para obter o valor máximo do calor específico e identificar o comportamento linear com o tamanho da rede, assim como investigar o critério de Lee-Kosterlitz [39]. Também estamos explorando a aproximação harmônica autoconsistente com correções para a transição de fase BKT [40] e técnicas de Machine Learning [41] [42] que estão sendo desenvolvidas em conjunto com este trabalho para identificar as transições de fase, especialmente a transição BKT.

q	FSS $\chi$	FSS $\Upsilon$	BKT $U_L$	Primeira Ordem $U_L$	Histograma	Medida de Gibbs
1	0.699 $\pm$ 0.001	0.692 $\pm$ 0.005	0.710 $\pm$ 0.001	-----	-----	-----
2	0.679 $\pm$ 0.003	0.662 $\pm$ 0.005	0.688 $\pm$ 0.003	-----	-----	-----
3	0.655 $\pm$ 0.001	0.638 $\pm$ 0.005	0.657 $\pm$ 0.005	0.690 $\pm$ 0.005	0.685 $\pm$ 0.001	0.68 $\pm$ 0.05
4	0.634 $\pm$ 0.001	0.621 $\pm$ 0.005	0.633 $\pm$ 0.003	0.662 $\pm$ 0.003	0.657 $\pm$ 0.001	0.65 $\pm$ 0.05
5	0.616 $\pm$ 0.001	0.608 $\pm$ 0.005	0.613 $\pm$ 0.004	0.640 $\pm$ 0.004	0.637 $\pm$ 0.001	0.64 $\pm$ 0.05
6	-----	0.599 $\pm$ 0.005	-----	0.623 $\pm$ 0.002	0.621 $\pm$ 0.001	0.62 $\pm$ 0.04
7	-----	0.586 $\pm$ 0.005	-----	0.608 $\pm$ 0.001	0.607 $\pm$ 0.001	0.61 $\pm$ 0.04

Tabela 4.1: Temperatura de transição e crítica para alguns valores de q obtido pelos métodos discutidos no texto, e os seus respectivos desvios

# Bibliografia

- [1] ONSAGER, L. Crystal statistics. i. a two-dimensional model with an order-disorder transition. *Physical Review*, New York, v. 65, n. 3-4, p. 117, 1944.
- [2] MERMIN, N. D.; WAGNER, H. Absence of ferromagnetism or antiferromagnetism in one-or two-dimensional isotropic heisenberg models. *Physical Review Letters*, New York, v. 17, n. 22, p. 1133, 1966.
- [3] BISHOP, D.; REPPY, J. Study of the superfluid transition in two-dimensional he 4 films. *Physical Review Letters*, New York, v. 40, n. 26, p. 1727, 1978.
- [4] NOVOSELOV, K. S.; GEIM, A. K.; MOROZOV, S. V.; JIANG, D.-E.; ZHANG, Y.; DUBONOS, S. V.; GRIGORIEVA, I. V.; FIRSOV, A. A. Electric field effect in atomically thin carbon films. *science*, v. 306, n. 5696, p. 666–669, 2004.
- [5] DOMANY, E.; SCHICK, M.; SWENDSEN, R. H. First-order transition in an xy model with nearest-neighbor interactions. *Physical review letters*, v. 52, n. 17, p. 1535, 1984.
- [6] ROMANO, S.; ZAGREBNOV, V. On the xy model and its generalizations. *Physics Letters A*, Amsterdam, v. 301, n. 5-6, p. 402–407, 2002.
- [7] MÓL, L. A.; PEREIRA, A. R.; CHAMATI, H.; ROMANO, S. Monte carlo study of 2d generalized xy-models. *The European Physical Journal B-Condensed Matter and Complex Systems*, v. 50, p. 541–548, 2006.
- [8] MÓL, L.; PEREIRA, A.; MOURA-MELO, W. A. On phase transition and vortex stability in the generalized xy models. *Physics Letters A*, Amsterdam, v. 319, n. 1-2, p. 114–121, 2003.
- [9] VAN ENTER, A. C.; ROMANO, S.; ZAGREBNOV, V. A. First-order transitions for some generalized xy models. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, v. 39, n. 26, p. L439, 2006.
- [10] SACHS, B.; WEHLING, T.; NOVOSELOV, K.; LICHTENSTEIN, A.; KATSNELSON, M. Ferromagnetic two-dimensional crystals: single layers of k<sub>2</sub>cuf<sub>4</sub>. *Physical Review B*, v. 88, n. 20, p. 201402, 2013.
- [11] LANDAU, L. D.; LIFSHITZ, E. M. *Statistical physics: Volume 5*. Elsevier, 2013. v. 5.
- [12] LANDAU, L. The theory of phase transitions. *Nature*, London, v. 138, n. 3498, p. 840–841, 1936.

- [13] BINDER, K. Theory of first-order phase transitions. *Reports on progress in physics*, v. 50, n. 7, p. 783, 1987.
- [14] VAN VLECK, J. H. A survey of the theory of ferromagnetism. *Reviews of Modern Physics*, New York, v. 17, n. 1, p. 27, 1945.
- [15] BEREZINSKII, V. Destruction of long-range order in one-dimensional and two-dimensional systems having a continuous symmetry group i. classical systems. *Sov. Phys. JETP*, v. 32, n. 3, p. 493–500, 1971.
- [16] NAGAOSA, N. *Quantum field theory in condensed matter physics*. Springer Science & Business Media, 1999.
- [17] LE BELLAC, M.; BARTON, G. Quantum and statistical field theory. (*No Title*), 1991.
- [18] KOSTERLITZ, J. M.; THOULESS, D. J. Ordering, metastability and phase transitions in two-dimensional systems. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, v. 6, n. 7, p. 1181, 1973.
- [19] The nobel prize in physics 2016. nobelprize, 2016. Disponível em : <https://www.nobelprize.org/prizes/physics/2016/press-release>. Acesso em: 12 de julho de 2023.
- [20] KOSTERLITZ, J. The critical properties of the two-dimensional xy model. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, v. 7, n. 6, p. 1046, 1974.
- [21] ECKE, R.; DASH, J. Properties of monolayer solid helium and its melting transition. *Physical Review B*, v. 28, n. 7, p. 3738, 1983.
- [22] HUFF, G.; DASH, J. Phases of neon monolayers adsorbed on basal plane graphite. *Journal of Low Temperature Physics*, v. 24, p. 155–174, 1976.
- [23] STOLTENBERG, J.; VILCHES, O. Heat capacity of o 2 films adsorbed on grafoil. *Physical Review B*, v. 22, n. 6, p. 2920, 1980.
- [24] MINNHAGEN, P.; WALLIN, M. New phase diagram for the two-dimensional coulomb gas. *Physical Review B*, v. 36, n. 10, p. 5620, 1987.
- [25] VAN HIMBERGEN, J. Kosterlitz-thouless transitions in simple spin-models with strongly varying vortex densities. *Solid state communications*, v. 55, n. 4, p. 289–293, 1985.
- [26] KNOPS, H. First-order transition in the xy model. *Physical Review B*, v. 30, n. 1, p. 470, 1984.
- [27] SHLOSMAN, S. Phase transitions for two-dimensional models with isotropic short-range interactions and continuous symmetries. *Communications in Mathematical Physics*, v. 71, p. 207–212, 1980.
- [28] VAN ENTER, A. C.; SHLOSMAN, S. B. First-order transitions for n-vector models in two and more dimensions: Rigorous proof. *Physical review letters*, v. 89, n. 28, p. 285702, 2002.

- [29] LEE, D.; GRINSTEIN, G. Strings in two-dimensional classical xy models. *Physical review letters*, v. 55, n. 5, p. 541, 1985.
- [30] CANOVA, G. A.; LEVIN, Y.; ARENZON, J. J. Competing nematic interactions in a generalized x y model in two and three dimensions. *Physical Review E*, v. 94, n. 3, p. 032140, 2016.
- [31] KOMURA, Y.; OKABE, Y. Phase transition of a two-dimensional generalized xy model. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, v. 44, n. 1, p. 015002, 2010.
- [32] KOMURA, Y.; OKABE, Y. Reply to the comment on ‘phase transition of a two-dimensional generalized xy model’. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, v. 44, n. 20, p. 208002, 2011.
- [33] ROBERT, C. P.; CASELLA, G.; ROBERT, C. P.; CASELLA, G. The metropolis—hastings algorithm. *Monte Carlo statistical methods*, p. 267–320, 2004.
- [34] WOLFF, U. Collective monte carlo updating for spin systems. *Physical Review Letters*, Woodbury, v. 62, n. 4, p. 361, 1989.
- [35] TSAI, S.-H.; SALINAS, S. R. Fourth-order cumulants to characterize the phase transitions of a spin-1 ising model. *Brazilian journal of physics*, v. 28, p. 58–65, 1998.
- [36] WEBER, H.; MINNHAGEN, P. Monte carlo determination of the critical temperature for the two-dimensional xy model. *Physical Review B*, v. 37, n. 10, p. 5986, 1988.
- [37] CAPRIOTTI, L.; CUCCOLI, A.; FUBINI, A.; TOGNETTI, V.; VAIA, R. Reentrant behavior of the phase stiffness in josephson junction arrays. *Physical review letters*, v. 91, n. 24, p. 247004, 2003.
- [38] DOBRUSHIN, R.; SHLOSMAN, S. Absence of breakdown of continuous symmetry in two-dimensional models of statistical physics. *Communications in Mathematical Physics*, v. 42, p. 31–40, 1975.
- [39] LEE, J.; KOSTERLITZ, J. Finite-size scaling and monte carlo simulations of first-order phase transitions. *Physical Review B*, v. 43, n. 4, p. 3265, 1991.
- [40] PIRES, A. Classical two-dimensional xxz model: A test of a generalized self-consistent harmonic approximation. *Physical Review B*, v. 54, n. 9, p. 6081, 1996.
- [41] TIRELLI, A.; COSTA, N. C. Learning quantum phase transitions through topological data analysis. *Physical Review B*, v. 104, n. 23, p. 235146, 2021.
- [42] TIRELLI, A.; CARVALHO, D. O.; OLIVEIRA, L. A.; DE LIMA, J. P.; COSTA, N. C.; DOS SANTOS, R. R. Unsupervised machine learning approaches to the q-state potts model. *The European Physical Journal B, Les Ulis*, v. 95, n. 11, p. 189, 2022.

# Apêndice A

## Aproximação Continua do XY generalizado

Considerando o modelo XY generalizado na sua forma angular:

$$H_{xy}^{gen} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} (\sin \theta_i \sin \theta_j)^q \cos(\phi_i - \phi_j) \quad (\text{A.1})$$

No limite contínuo, onde consideramos  $a$  muito pequeno, e logo todos os termos de  $a$  de ordem maior que 3 foi desconsiderado durante todo o desenvolvimento, temos:

$$\theta_j = \theta_i \pm a \partial_\mu \theta_i + \frac{a^2}{2} \partial_\mu \partial_\rho \theta_i + \dots \quad (\text{A.2})$$

$$\phi_j = \phi_i \pm a \partial_\mu \theta_i + \frac{a^2}{2} \partial_\mu \partial_\rho \phi_i + \dots \quad (\text{A.3})$$

temos,

$$\sin(\theta_j) \simeq \sin(\theta_i \pm a \partial_\mu \theta_i + \frac{a^2}{2} \partial_\mu \partial_\rho \theta_i \dots) \quad (\text{A.4})$$

seja a identidade trigonométrica  $\sin(x + y) = \sin x \cos y + \sin y \cos x$ , tomando  $x = \theta_i$  e  $y = \pm a \partial_\mu \theta_i + \frac{a^2}{2} \partial_\mu \partial_\rho \theta_i$ . temos,

$$\sin(\theta_j) \simeq \sin \theta_i \cos \left[ \pm a \partial_\mu \theta_i + \frac{a^2}{2} \partial_\mu \partial_\rho \theta_i \right] + \sin \left[ \pm a \partial_\mu \theta_i + \frac{a^2}{2} \partial_\mu \partial_\rho \theta_i \right] \cos \theta_i \quad (\text{A.5})$$

então,

$$(\sin \theta_i \sin \theta_j)^L \simeq \left[ \left( 1 - \frac{a^2}{2} (\partial_\mu \theta_i)^2 \right) \sin^2 \theta_i + \left( \pm a \partial_\mu \theta_i + \frac{a^2}{2} \partial_\mu \partial_\rho \theta_i \right) \sin \theta_i \cos \theta_i \right]^q \quad (\text{A.6})$$

Utilizando o binômio de Newton, temos que para o primeiro termo ( $p = 0$ ):

$$\simeq \left[ \left( 1 - \frac{a^2}{2} (\partial_\mu \theta_i)^2 \right)^q \right] \quad (\text{A.7})$$

tomando outra expansão,

$$\left[ 1 - \frac{a^2}{2} (\partial_\mu \theta_i)^2 \right]^q \simeq 1 - q \left( \frac{a^2}{2} (\partial_\mu \theta_i)^2 \right) \quad (\text{A.8})$$

assim,

$$\simeq \sin^{2q} \theta_i - \frac{qa^2}{2} (\partial_\mu \theta_i)^2 \sin^{2q} \theta_i \quad (\text{A.9})$$

O segundo termo da expansão binomial(  $p = 1$ ):

$$\simeq q \left[ \left( 1 - \frac{a^2}{2} (\partial_\mu \theta_i)^2 \right) \sin(\theta_i) \right]^{L-1} \left[ \pm a \partial_\mu \theta_i + \frac{a^2}{2} \partial_\mu \partial_\rho \theta_i \right] \sin \theta_i \cos \theta_i \quad (\text{A.10})$$

$$\simeq q \left[ 1 - \frac{a^2}{2} (\partial_\mu \theta_i)^2 \right]^{q-1} \left( \pm a \partial_\mu \theta_i + \frac{a^2}{2} \partial_\mu \partial_\rho \theta_i \right) \sin^{2q-1} \theta_i \cos \theta_i \quad (\text{A.11})$$

Agora, podemos integrar este termo por partes, considerando:

$$u = \sin^{2q-1} \theta_i \cos \theta_i \quad (\text{A.12})$$

$$dv = \left[ 1 - \frac{a^2}{2} (\partial_\mu \theta_i)^2 \right]^{q-1} \left( \pm a \partial_\mu \theta_i + \frac{a^2}{2} \partial_\mu \partial_\rho \theta_i \right) \quad (\text{A.13})$$

temos,

$$aq(\partial_\mu \theta_i \sin^{2q-1} \theta_i \cos \theta_i + \frac{a^2 q}{2} (\partial_\mu \theta_i)^2 \sin^{2q} \theta_i - \frac{q(2q-1)a^2}{2} \sin^{2q-2} \theta_i \cos \theta_i) \quad (\text{A.14})$$

considerando o terceiro termo (  $p=2$  ),

$$\simeq \frac{q(q-1)}{2} \left[ 1 + \frac{a^2}{2} (\partial_\mu \theta_i)^2 \right]^{q-2} \sin^{2L-2} \theta_i \cos^2 \theta_i \left[ \pm a \partial_\mu \theta_i + \frac{a^2}{2} \partial_\mu \partial_\rho \theta_i \right]^2 \quad (\text{A.15})$$

$$\simeq \frac{q(q-1)}{2} a^2 (\partial_\mu \theta_i)^2 \sin^{2q-1} \theta_i \cos^2 \theta_i \quad (\text{A.16})$$

juntando os termos:

$$\begin{aligned}
& (\sin \theta_i \sin \theta_j)^q \simeq \sin^{2q} \theta_i - \frac{qa^2}{2} (\partial_\mu \theta_i)^2 \sin^{2q} \theta_i \\
& + (\pm aL (\partial_\mu \theta_i \sin^{2q-1} \theta_i \cos \theta_i) + \frac{a^2 q}{2} (\partial_\mu \theta_i)^2 \sin^{2q} \theta_i \\
& - \frac{q(2q-1)a}{2} \sin^{2q-1} \theta_i \cos \theta_i - \frac{q(q-1)a^2}{2} (\partial_\mu \theta_i)^2 \sin^{2q-2} \theta_i \cos^2 \theta_i
\end{aligned} \tag{A.17}$$

seja:

$$\frac{q(2q-1)}{2} - \frac{q(q-1)}{2} = \frac{q^2}{2} \tag{A.18}$$

podemos simplificar,

$$(\sin \theta_i \sin \theta_j)^q \simeq \sin^{2q} \theta_i - \frac{q^2 a^2}{2} (\partial_\mu \theta_i)^2 \sin^{2q-1} \theta_i \cos^2 \theta_i (\partial_\mu \theta_i)^2 \tag{A.19}$$

O segundo termo, dependente  $\phi$ :

$$\cos(\phi_i - \phi_j) \simeq \cos \left[ \phi_i - \left( \phi_i \pm a \partial_\mu \phi_i + \frac{a^2}{2} \partial_\mu \partial_\rho \phi_i \right) \right] \tag{A.20}$$

tomando aproximação de segunda ordem para o cosseno,

$$\cos(\phi_i - \phi_j) \simeq 1 - \frac{1}{2} \left( \mp a \partial_\mu \phi_i + \frac{a^2}{2} \partial_\mu \partial_\rho \phi_i \right)^2 \tag{A.21}$$

$$\cos(\phi_i - \phi_j) \simeq 1 - \frac{a^2}{2} (\partial_\mu \phi_i)^2 \tag{A.22}$$

combinando os dois termos:

$$(\sin \theta_i \sin \theta_j)^q \cos(\phi_i - \phi_j) \simeq \left[ \sin^{2q} \theta_i - \frac{q^2 a^2}{2} (\partial_\mu \theta_i)^2 \sin^{2q-1} \theta_i \cos^2 \theta_i (\partial_\mu \theta_i)^2 \right] \left( 1 - \frac{a^2}{2} (\partial_\mu \phi_i)^2 \right) \tag{A.23}$$

parametrizando pelos dois campos escalares,  $m = \cos \theta$  e  $\phi$ , temos:

$$\sin \theta = 1 - m^2 \tag{A.24}$$

$$\partial_\mu \theta = \frac{1}{(1 - m^2)^{\frac{1}{2}}} \partial_\mu m \tag{A.25}$$

substituindo, todos os termos, a Hamiltoniana fica na forma:

$$H_{XY}^{Gen} = \frac{J}{2} \int d^2 r \left[ (1 - m^2)^q (\vec{\nabla} \phi)^2 + q^2 m^2 (1 - m^2)^{q-2} (\vec{\nabla} m)^2 - \frac{4}{a^2} (1 - m^2)^q + \frac{4}{a^2} \right] \tag{A.26}$$

temos o limite contínuo do XY generalizado. Para obter as equações de movimento, utilizamos

$$\frac{\partial m}{\partial t} = -\frac{\delta h}{\delta \phi} = -\vec{\nabla} \cdot \left[ \frac{\partial h}{\partial \vec{\nabla} \phi} \right] + \frac{\partial h}{\partial \phi} \quad (\text{A.27})$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \frac{\delta h}{\delta m} = \vec{\nabla} \cdot \left[ \frac{\partial h}{\partial \vec{\nabla} m} \right] - \frac{\partial h}{\partial m} \quad (\text{A.28})$$

onde,  $h$  é a hamiltoniana reduzida

$$h = \left[ (1 - m^2)^q (\vec{\nabla} \phi)^2 + q^2 m^2 (1 - m^2)^{q-2} (\vec{\nabla} m)^2 - \frac{4}{a^2} (1 - m^2)^q + \frac{4}{a^2} \right] \quad (\text{A.29})$$

de forma direta,

$$\frac{1}{J} \frac{\partial m}{\partial t} = (1 - m^2)^{q-1} \left[ 2qm (\vec{\nabla} \phi) (\vec{\nabla} m) - (1 - m^2) \vec{\nabla}^2 \phi \right] \quad (\text{A.30})$$

$$\frac{1}{J} \frac{\partial \phi}{\partial t} = qm (1 - m^2)^{q-2} \left[ \frac{q (\vec{\nabla} m)^2}{(1 - m^2)} - \frac{q(q-2)m^2 (\vec{\nabla} m)^2}{(1 - m^2)^2} + \frac{qm \nabla^2 m}{(1 - m^2)} + (\vec{\nabla} \phi)^2 - \frac{4}{a^2} \right] \quad (\text{A.31})$$

assim temos as equações de movimento do modelo XY generalizado.

## Apêndice B

# Helicidade para o Modelo XY generalizado

Seja uma torção  $\Delta$ , a helicidade para uma hamiltoniana qualquer é dada por:

$$N\gamma = \left\langle \frac{\partial^2 H}{\partial \Delta^2} \right\rangle - \beta \left[ \left\langle \left( \frac{\partial H}{\partial \Delta} \right)^2 \right\rangle - \left\langle \frac{\partial H}{\partial \Delta} \right\rangle^2 \right] \quad (\text{B.1})$$

vamos considerar condição de contorno periódica, com uma torção no eixo  $\hat{x}$ :

$$\phi(\vec{r}) = \phi(\vec{r}) + (\hat{r} \cdot \hat{x})\Delta \quad (\text{B.2})$$

considerando o modelo XY generalizado na forma

$$H_{xy}^{Gen} = \sum_{\langle i,j \rangle} f(S_i^z, S_j^z) (\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j) - f(S_i^z, S_i^z) (S_i^z S_j^z) \quad (\text{B.3})$$

onde  $f(S_i^z, S_j^z) = [1 - (S_i^z)^2 - (S_j^z)^2 + (S_i^z S_j^z)^2]^{(q-1)/2}$ . como estamos considerando uma torção no eixo  $\hat{x}$ , temos que  $f(S_i^z, S_j^z)$  é uma constante na derivada em  $\Delta$ , assim

$$\frac{\partial H_{xy}^{Gen}}{\partial \Delta} = f(S_i^z, S_j^z) \frac{\partial (\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j)}{\partial \Delta} \quad (\text{B.4})$$

assim, seja

$$\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j = \sin\theta_i \sin\theta_j (\cos\phi_i \cos\phi_j + \sin\phi_i \sin\phi_j) + \cos\theta_i \cos\theta_j \quad (\text{B.5})$$

$$\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j = \sin\theta_i \sin\theta_j \cos(\phi_i - \phi_j) + \cos\theta_i \cos\theta_j \quad (\text{B.6})$$

substituindo a condição de contorno

$$\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j = \cos\theta_i \cos\theta_j + \sin\theta_i \sin\theta_j \cos[\phi_j - \phi_i + (\vec{r}_j \cdot \hat{x})\Delta - (\vec{r}_i \cdot \hat{x})\Delta] \quad (\text{B.7})$$

derivando,

$$\frac{\partial \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j}{\partial \Delta} = -(\vec{r}_{ij} \cdot \hat{x}) \sin \theta_i \sin \theta_j \sin[\phi_j - \phi_i + (\vec{r}_{ij} \cdot \hat{x})\Delta] \quad (\text{B.8})$$

levando o  $\Delta$  a zero,

$$\left. \frac{\partial \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j}{\partial \Delta} \right|_{\Delta=0} = -(\vec{r}_{ij} \cdot \hat{x}) \sin \theta_i \sin \theta_j \sin(\phi_j - \phi_i) \quad (\text{B.9})$$

a segunda derivada

$$\frac{\partial^2 \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j}{\partial \Delta^2} = -(\vec{r}_{ij} \cdot \hat{x})^2 \sin \theta_i \sin \theta_j \cos[\phi_j - \phi_i + (\vec{r}_{ij} \cdot \hat{x})\Delta] \quad (\text{B.10})$$

levando o  $\Delta$  a zero,

$$\left. \frac{\partial^2 \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j}{\partial \Delta^2} \right|_{\Delta=0} = -\sin \theta_i \sin \theta_j \cos[\phi_j - \phi_i + (\vec{r}_{ij} \cdot \hat{x})\Delta] \quad (\text{B.11})$$

as derivadas na forma vetorial é dada por

$$f(\vec{S}_i, \vec{S}_j) \left. \frac{\partial \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j}{\partial \Delta} \right|_{\Delta=0} = -f(\vec{S}_i, \vec{S}_j) (\vec{r}_{ij} \cdot \hat{x}) (S_i^x S_j^x - S_i^y S_j^y) \quad (\text{B.12})$$

$$f(\vec{S}_i, \vec{S}_j) \left. \frac{\partial^2 \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j}{\partial \Delta^2} \right|_{\Delta=0} = \frac{1}{2} f(\vec{S}_i, \vec{S}_j) (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y) \quad (\text{B.13})$$

a segunda derivada é a hamiltoniana do modelo, então

$$N\gamma = \frac{1}{2} \langle H_{xy}^{Gen} \rangle - \beta \left\langle \left[ \sum_{\langle i,j \rangle} (\vec{r}_{ij} \cdot \hat{x}) [1 - (S_i^z)^2 - (S_j^z)^2 + (S_i^z S_j^z)^2]^{\frac{q-1}{2}} (S_i^x S_i^x + S_i^y S_i^y) \right]^2 \right\rangle$$

assim como mostrada no texto.