



Estudo da temperatura da transição de Fase do modelo de potts bidimensional

Wharley Costa Gomes¹, Sergio Murilo da Silva Braga Martins Junior², Fred Jorge Carvalho Lima³, Antonio Soares dos Anjos Filho⁴

¹Graduando em Licenciatura Plena em Física – IFMA (Campus Monte Castelo – São Luis MA). Email: wharleygomes@hotmail.com

²Graduando em Licenciatura Plena em Física – IFMA (Campus Monte Castelo – São Luis MA). Email: sergiomurillo21@gmail.com

³Graduando em Licenciatura Plena em Física – IFMA (Campus Monte Castelo – São Luis MA). Email: fred_18@hotmail.com

⁴Prof. Dr. Do curso de Licenciatura Plena em Física – IFMA (Campus Monte Castelo – São Luis MA). Email: asafilho@yahoo.com.br

Resumo: Este artigo é fruto de um trabalho que objetiva estudar a temperatura crítica da transição de fase do modelo de Potts q -estados bidimensional, em uma rede quadrada, como função do número de estados q , através da técnica de simulação de Monte Carlo. Para este fim, quantidades térmicas relevantes do presente modelo, tais como a magnetização por spin, a energia e a função de correlação, serão também analisadas para identificar as transições entre as fases ferromagnética e paramagnética presentes nos seus respectivos diagramas de fases. A dinâmica de evolução que usaremos para simular as flutuações térmicas e reproduzir o comportamento termodinâmico desse modelo será a bem conhecida dinâmica de Glauber, por ser satisfatória nas vizinhanças dos pontos nos diagramas de fases onde surgem os chamados fenômenos críticos. Para a estimativa da temperatura crítica da transição de fase, será feita também uma análise dos erros estatísticos, que são inerentes a própria complexidades de obtê-la nas transições de fases.

Palavras-chave: modelo de Potts; fenômenos críticos; sistemas cooperativos; técnica de Monte Carlo; transição de fase

1. INTRODUÇÃO

O estudo de Transições de Fases e Fenômenos Críticos (FC), isto é, mudanças qualitativas globais que ocorrem bruscamente em sistemas de muitos graus de liberdade, é um campo de pesquisa que abarca várias ciências, como Economia, Sociologia, e principalmente Física, onde FC têm sido observados em Cosmologia, Física de Partículas e, principalmente, Física da Matéria Condensada, entre outras áreas. Geralmente governados por relações não lineares, os fenômenos críticos são também intimamente conectados com modernos conceitos que vão de caos até fractais.

A não linearidade subjacente aos FC é também responsável pelas dificuldades matemáticas encontradas na obtenção de resultados analíticos exatos nos sistemas estudados, o que tem provocado o desenvolvimento de inúmeras técnicas aproximativas (Campo Médio, Grupo de Renormalização e Simulação de Monte-Carlo entre outras) que tornaram possíveis a obtenção de uma impressionante gama de resultados que permitiram o esclarecimento das características básicas das transições de fases e dos fenômenos críticos.

Considerada uma ferramenta onipresente na investigação de sistemas modelos, que inclui casos, além dos limites da Mecânica Estatística tais como Físico-Química, Física do Estado Sólido, Ciências dos Materiais, Bioquímica, Biofísica, etc, a simulação computacional é hoje a mais nova categoria de análise da Física.

Em Mecânica Estatística a idéia básica de tais simulações computacionais é que com um computador pode-se desde que o sistema esteja apropriadamente construído, seguir a sua trajetória que servirá para simular o comportamento real de um ensemble de sistemas, de forma que a análise estatística desta trajetória nos permite determinar significativas predições para as propriedades do mesmo.

Uma das classes gerais de simulações, que é particularmente apropriada para o estudo do comportamento termodinâmico de sistemas macroscópicos, é o método (ou simulação) de Monte Carlo (a origem do nome tem a ver com a utilização de sequências de números aleatórios).

O método de Monte Carlo é um conjunto de algoritmos numéricos, que faz uso de variáveis aleatórias, para escolher amostras representativas do total de configurações do sistema em equilíbrio. Fazendo uso de um gerador de números aleatórios (um algoritmo que gera uma sequência longa de números aleatórios uniformemente distribuídos no intervalo entre 0 e 1), são geradas recursivamente novas configurações, a partir de uma configuração inicial, segundo uma dinâmica pré-estabelecida, que no caso de sistemas em equilíbrio conduz a estados descritos pela distribuição de Gibbs. Em outras palavras, o método gera uma cadeia markoviana de configurações, através do espaço de fase, de tal modo que os estados criados ocorrem assintoticamente $\langle \rightarrow \infty \rangle$ com uma frequência relativa proporcional ao fator de probabilidade de Gibbs, $\exp(-\beta E)$, adequado no ensemble canônico (quando o sistema atinge o equilíbrio termodinâmico). O tempo nesse caso refere-se à “unidade de tempo de Monte Carlo”, que significa o tempo necessário para que, em média, todos os spins da rede sejam visitados, e eventualmente atualizados, uma única vez.

Em termos práticos, o método de Monte Carlo quando implementado em sistemas cooperativos simula de forma aproximada as reais flutuações térmicas que ocorrem em sistemas macroscópicos, de tal modo a reproduzir não só o comportamento termodinâmico como as diferentes transições de fases que ocorrem nos sistemas reais.

Um modelo importante em Mecânica Estatística é o modelo de Potts com q-estados. Este modelo é um modelo de rede no qual existe uma variável de “spin”, σ (que pode assumir q valores inteiros: $\sigma = 1, 2, \dots, q$) em cada sítio. Do ponto de vista de simulação, este modelo é bastante fácil de simular, a única complicação é que existem várias escolhas entre as quais a variável de “spin” σ do sítio pode assumir. A maneira mais fácil de proceder numa simulação de Monte Carlo é gerar aleatoriamente um dos q-1 estados restantes usando um gerador de números aleatórios; a eficiência do algoritmo na escolha de um valor diferente para a variável de “spin” σ que se encontra em um determinado sítio, pode ser melhorada construindo uma tabela de probabilidades para os q-1 estados restantes.

2. MATERIAL E MÉTODOS

Neste projeto, usamos os procedimentos necessários para implementar o método de simulação de Monte Carlo para obter os valores médios das grandezas termodinâmicas de interesse, tais como, a temperatura da transição de fase, a energia, a magnetização por spin e a função de correlação, do modelo de Potts q-estados bidimensional na rede quadrada.

Para a atualização das variáveis de estados σ_i (que podem assumir q valores inteiros) sobre os sítios de uma rede quadrada de dimensão linear L ($N=L^2$ é o número total de “spins”), utilizaremos o algoritmo da dinâmica de Glauber, que segue as seguintes regras, a saber:

- (i) Um possível estado novo $\sigma_i(t+1)$ é escolhido ao acaso, com $\sigma_i(t+1) \neq \sigma_i(t)$, a partir do qual calcula-se a mudança na energia $\Delta H = H(t+1) - H(t)$.
- (ii) Define-se, então, a probabilidade

$$p_i(t) = [1 + \exp(\beta \Delta H)]^{-1} \quad [\beta = 1/(k_B T)]$$

- (iii) Introduzindo um número aleatório $z_i(t)$, uniformemente distribuído no intervalo $[0, 1]$, executa-se a mudança se $z_i(t) \leq p_i(t)$; caso contrário, o spin $\sigma_i(t)$ não é atualizado.

Para contornar os efeitos das bordas do sistema finito, serão usadas em todas as simulações condições de contorno periódicas, e como referência, nossas medidas de temperaturas serão em unidades da temperatura crítica do modelo de Potts q-estados na rede quadrada que é exatamente conhecida, a saber, $k_B T_c(q)/J = 1/\ln(1 + \sqrt{q})$, onde k_B é a constante de Boltzmann, e J é a

constante de acoplamento entre os “spins” de primeiros vizinhos. Aqui, vale ressaltar que um dos objetivos do projeto é determinar numericamente esta temperatura crítica a partir do comportamento das quantidades termodinâmicas do presente modelo de Potts q-estados bidimensional na rede quadrada.

As simulações foram programadas na linguagem C++, no ambiente Windows.

3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Estudamos o ferromagneto de Potts com q-estados na rede quadrada de tamanho linear $L=40$, através do procedimento numérico de Monte Carlo(MC). Condições de contorno periódicas foram sempre usadas. Nós sempre começamos com a configuração inicial com todos os spins da rede no estado $\sigma_i = 1$ (para todos os sítios i); Após isto, o sistema evoluiu para o equilíbrio, por um tempo de termalização $t_{eq} = 4 \times 10^3$ passos de MC. As médias térmicas foram desenvolvidas sob $t_{av} = 4 \times 10^4$ passos de MC, que forneceram um total de $t_{av} = 4 \times 10^4$ medidas para cada média térmica. Além disso, cada simulação foi repetida para $M = 40$ amostras diferentes, para melhorar as estatísticas, como também para reduzir possíveis dependência sobre seqüências de números aleatórios. O intervalo de temperatura considerado foi de $[0.05 - 1.50]$ com incremento na temperatura da ordem de $\Delta T=0.01$, em todas as simulações realizadas.

Na figura 3 exibimos o comportamento da magnetização por spin como uma função da temperatura, obtida pelo procedimento numérico acima mencionado, para os casos $q=2, 3$, e 4 . Nosso critério para a determinação da temperatura crítica (associada com o tamanho finito do sistema considerado) consiste em procurar pela temperatura na qual o parâmetro de ordem (magnetização por spin) vai a zero. Por motivo de não usarmos, até o momento, um método apropriado para determinar esta temperatura, definimos um intervalo de temperatura que abarca todos os pontos que se encontra nas vizinhanças do chamado ponto crítico, ou seja, na região onde ocorre a transição de fase. Tal procedimento foi realizado para todas as curvas da magnetização por spin.

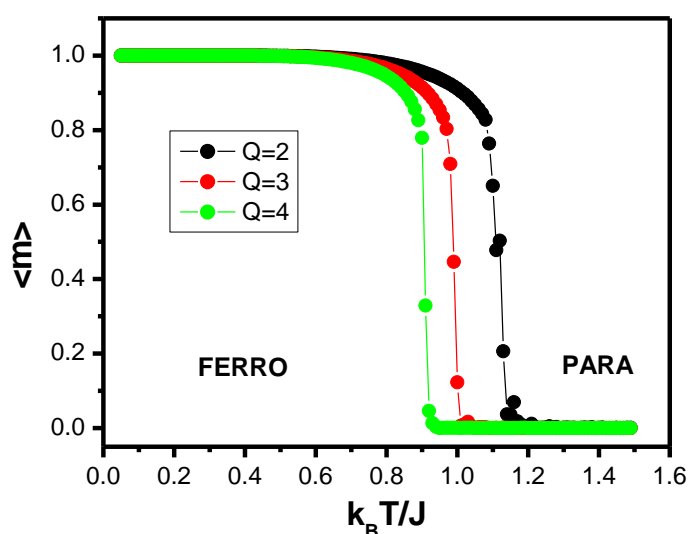


Figura 3. A magnetização por spin versus temperatura, para os casos $q=2, 3$ e 4 . A linha cheia é só uma guia para o leitor. As fases ferromagnéticas e paramagnéticas estão simbolizadas por FERRO e PARA, respectivamente.

Em todos os casos analisados ($q=2, 3$, e 4), a temperatura crítica estimada coincide com os valores exatos, até uma precisão de 0.01 , isto é, nossa estimativa para as temperaturas críticas em função de q , está em torno de

$$\frac{k_B T_c^{(L)}(q)}{J} = \frac{1}{\ln(1 + \sqrt{q})} \pm 0.01,$$

onde $T_c^{(L)}(q)$ representa a “temperatura crítica” para o sistema de tamanho finito L . É importante salientar que o nosso sistema é pequeno, e que os resultados dessa estimativa para a temperatura crítica podem ser bastante melhorados realizando simulações em sistemas maiores e usando métodos de extrapolação para o limite termodinâmico, como o cumulante de Binder e a técnica de escalonamento de tamanho finito (procedimento a ser feito posteriormente em sistemas maiores).

Diante desse quadro, podemos também identificar as fases ferromagnéticas e paramagnéticas presentes no seu diagrama de fases: fase ferromagnética na região de temperatura $T \leq T_c^{(L)}(q)$ e fase paramagnética na região oposta para temperaturas $T > T_c^{(L)}(q)$.

Na figura 4 exibimos o comportamento da energia (interna) média $\langle E \rangle$ como uma função da temperatura, para os casos $q=2, 3$ e 4 . Apesar do tamanho de rede considerado pequeno, observa-se uma completa curva suave - mesmo próximo da criticalidade, onde ocorrem flutuações em todas as escalas de tamanho.

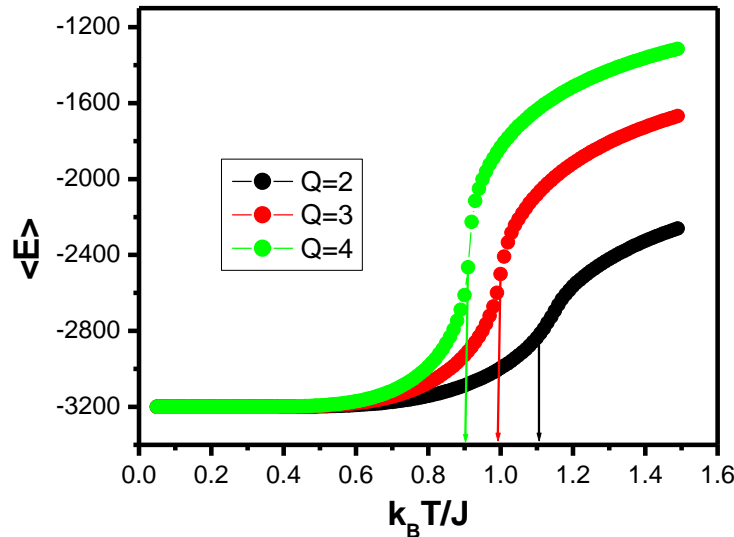


Figura 4. A energia interna versus temperatura, para os casos $q=2, 3$ e 4 . A linha cheia é só uma guia para o leitor. As setas indicam as temperaturas críticas estimadas para os casos analisados.

Analisando o comportamento dessas curvas, verifica-se que existe um ponto onde há uma mudança na concavidade – ponto de inflexão - que ocorre exatamente no interior do intervalo de temperatura definido acima para a determinação da temperatura crítica. Tal ponto de inflexão é uma evidência que naquela região, a derivada da energia interna, ou seja, o calor específico provavelmente diverge, que é uma assinatura típica de uma transição de fase do tipo contínua (ou de segunda ordem). Portanto, tal análise a partir dessa mudança na concavidade da curva da energia, nos informa que há uma transição de fase contínua, na vizinhança do ponto de temperatura $T = T_c^{(L)}(q)$ para os correspondentes casos analisados.

Na tabela 1, nós listamos nossos resultados quantitativos para a temperatura crítica em função dos índices q , comparados com os correspondentes valores exatos do modelo de Potts q -estados. Os valores obtidos são bastante satisfatórios, considerando o tamanho da rede usada ($L=40$).

Estados	Resultados Exatos (Limite Termodinâmico)	Presente Trabalho $T_c(Q)$ ($L=40$)
$Q=2$	1.13459...	1.124-1.145
$Q=3$	0.99497...	0.985-1.005
$Q=4$	0.91023...	0.9003-0.920

6. CONCLUSÕES

Nós utilizamos o método de simulação de Monte-Carlo para avaliar algumas quantidades termodinâmicas do Modelo de Potts q -estados, na sua versão ferromagnética, sobre uma rede quadrada, com o objetivo de determinar a temperatura crítica do presente modelo em função dos índices q . O sistema investigado foi o modelo de Potts com q -estados ($q=2, 3, 4$) sobre uma rede quadrada de tamanho linear $L=40$.

Como resultados obtidos, estimamos valores da temperatura crítica da transição de fase como função do número de estados q , e identificamos, a partir do comportamento da magnetização por spin as fases ferromagnética e paramagnética presentes nos seus respectivos diagramas de fases.

Além disso, identificamos também a partir do comportamento da grandeza energia interna, uma mudança na concavidade da curva de tal parâmetro, exatamente sobre o ponto onde ocorre a referida transição de fase, servindo assim, de parâmetro alternativo para se estimar os valores das temperaturas críticas do presente modelo.

AGRADECIMENTOS

Queremos agradecer ao IFMA e ao CNPq pelo apoio.

REFERÊNCIAS

- A. S. Anjos, **Dissertação de Mestrado**, DFTE/UFRN (2004).
- A. S. Anjos, **Tese de Doutorado**, DFTE/UFRN (2008).
- H. E. Stanley, *“Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena”*, Oxford University Press, London, 1971.
- J. M. Yeomans, *“Statistical Mechanics of Phase Transitions”*, Oxford University Press, 1994.
- J. J. Binney, N. J. Dowrick, A. J. Fisher and M. E. J. Newman, *“The Theory of Critical Phenomena: An Introduction to the Renormalization Group”*, Oxford University Press, New York, 1992.
- K. Huang, *“Statistical Mechanics”*, John Wiley, New York, 1987.
- R. J. Baxter, *“Exactly Solved Models in Statistical Mechanics”*, Academic Press, London, 1982