



Evento	Salão UFRGS 2014: SIC - XXVI SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
Ano	2014
Local	Porto Alegre
Título	Gás de Rede com Exclusão de Vizinhos na Rede Triangular
Autor	LUIS GUSTAVO MOLLMANN DOS SANTOS
Orientador	HEITOR CARPES MARQUES FERNANDES

O objetivo deste trabalho é estudar do modelo conhecido como gás de rede, onde as partículas de um gás estão confinadas a ocuparem os vértices de uma rede. Visando entender os trabalhos já existentes em redes de geometria retangular, pretende-se investigar o comportamento do sistema em redes de geometria triangular e hexagonal (*honeycomb*). Nos sistemas aqui considerados, as partículas na rede interagem somente por exclusão de vizinhos. Ou seja, as partículas impedem a ocupação de células adjacentes às delas. O modelo mapeia para realidade de maneira direta, por exemplo, na adsorção de gases em superfícies regulares, como redes cristalinas.

A principal ferramenta utilizada para o estudo do sistema é o método de Monte Carlo. A metodologia adotada foi a seguinte: são feitas simulações curtas com sistemas pequenos para identificar os possíveis pontos de transição de fase e a correção dos algoritmos. Posteriormente, são feitas simulações mais longas e com sistemas maiores para se obter dados mais precisos que são utilizados como entrada em métodos conhecidos como repesagem de histogramas. Esses métodos tornam possível utilizar os dados de apenas algumas simulações e interpolar/extrapolar os resultados obtidos, gerando estimativas muito precisas e com um custo computacional menor do que se fossem feitas muitas simulações. Para que se possa caracterizar as diferentes fases dos sistema, desenvolveu-se parâmetros de ordem apropriados para cada simetria presente nas fases ordenadas.

Até o presente momento, foram desenvolvidas as habilidades necessárias trabalhando com modelo de Ising, que já foi amplamente estudado numericamente e possui soluções analíticas importantes para comparação de resultados. Implementou-se os algoritmos de Metropolis e Wolff, os métodos de análise de tempo de correlação, repesagem de histograma único e de histogramas múltiplos, escala de tamanho finito e obtenção de expoentes críticos. Iniciou-se o estudo do gás de rede, propriamente dito, e foram desenvolvidos programas que simulam o gás em uma rede triangular com condições periódicas, sem exclusão de vizinhos (0NN) e com exclusão de primeiros vizinhos (1NN) na rede. Estes últimos utilizam o algoritmo de Metropolis no ensemble grande canônico e apresentam solução analítica no limite termodinâmico. Os casos a serem estudados posteriormente (2NN, 3NN, etc.) não possuem soluções exatas. Os resultados obtidos até o momento estão de acordo com os resultados analíticos conhecidos. Este fato valida a metodologia adotada até agora.