

Gases de Rede com Exclusão de Vizinhos

Filipe da Cunha Thewes
Orientador: Heitor C. M. Fernandes
Instituto de Física - UFRGS

1. Introdução:

Caracterizados pela distribuição discreta de partículas em uma rede cristalina, gases de rede são modelos simplificados de fluidos complexos. Como diferentes classes de universalidade já foram observadas nestes sistemas, dependendo da área de exclusão e da simetria da rede, juntamente com a simplicidade do sistema, gases de rede se mostram ótimos instrumentos para o estudo de transições de fase.

A exclusão de vizinhos se dá no bloqueio de sítios próximos a um sítio ocupado, gerando assim uma área de exclusão para cada partícula na rede, que dão origem à interações do tipo caroço-duro[1].

Neste trabalho serão exploradas as redes triangular com exclusão de segundos e terceiros vizinhos e a rede quadrada com exclusão de terceiros vizinhos.

2. Monte Carlo - Amostragem Grande Canônica e Multicanônica

Para a rede triangular com exclusão de segundos vizinhos foi utilizada a amostragem Grande Canônica (μVT), pois a temperatura se mostra irrelevante em um sistema onde a única interação se dá pela exclusão de vizinhos. Para tal amostragem utilizou-se o algoritmo de Metropolis [2].

Porém, este algoritmo se mostra ineficiente em altas densidades e, quando somado a uma transição de primeira ordem, dificulta a correta amostragem das duas fases coexistentes,

Por isso, nas demais redes foi utilizada a amostragem Multicanônica[3] seguindo o algoritmo de Wang-Landau[4]. Como os resultados obtidos pela amostragem Multicanônica não estão em nenhum *ensemble* específico, pode-se obter os resultados no *ensemble* Grande Canônico pelo método de repesagem de histogramas[1].

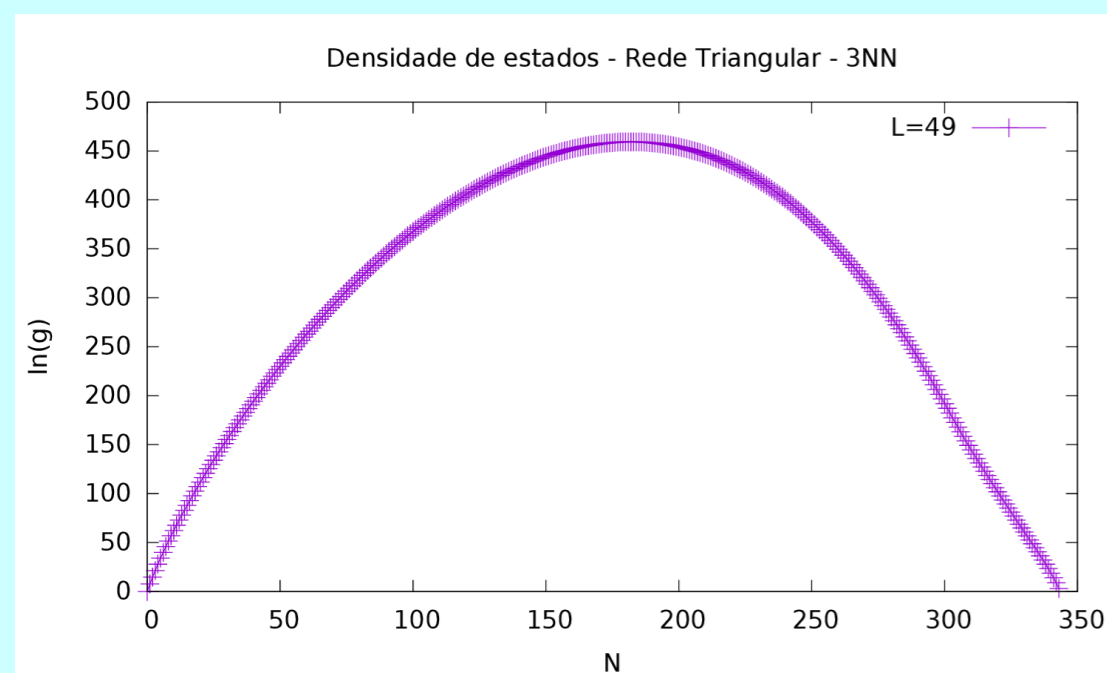


Figura 1: Resultado típico de uma amostragem de Wang-Landau. A densidade de estados $g(N)$ é repesada para se obter os resultados no *ensemble* Grande Canônico.

3. Exclusão de Vizinhos

Os vizinhos excluídos em cada uma das redes estão apresentados na Figura 1.

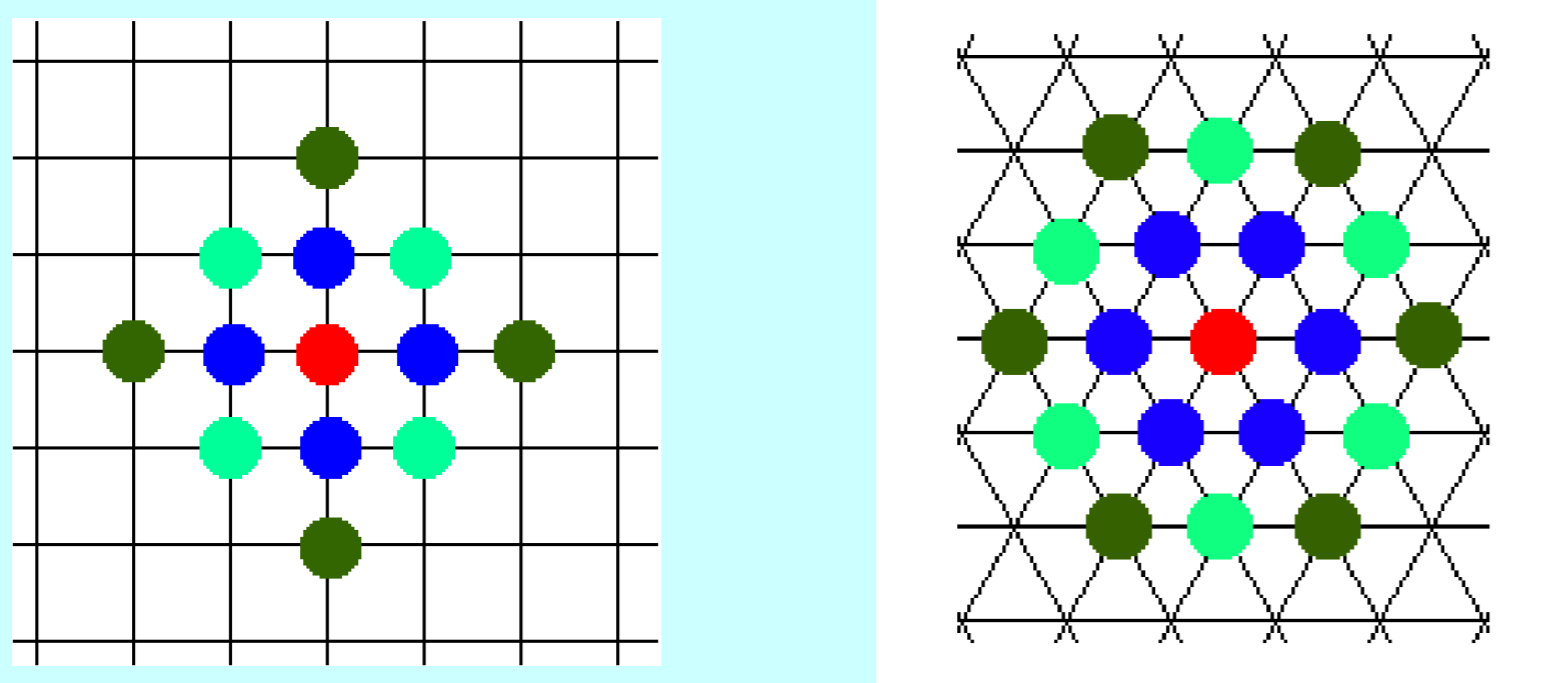


Figura 1: Rede Quadrada (esquerda) e Rede Triangular (direita). Em vermelho, o sítio ocupado, e os vizinhos de primeira, segunda e terceira ordem nas cores azul, verde claro e verde escuro, respectivamente.

4. Resultados:

Os resultados obtidos estão apresentados nas Figuras 3, 4 e 5.

A rede triangular com exclusão de segundos vizinhos apresenta uma transição de fase de segunda ordem na classe de universalidade do modelo de Potts de quatro estados, com expoentes críticos $\nu=7/8$, $\beta=1/12$ e $\nu=2/3$. A transição se dá uma fase líquida (desordenada) para uma fase sólida (ordenada).

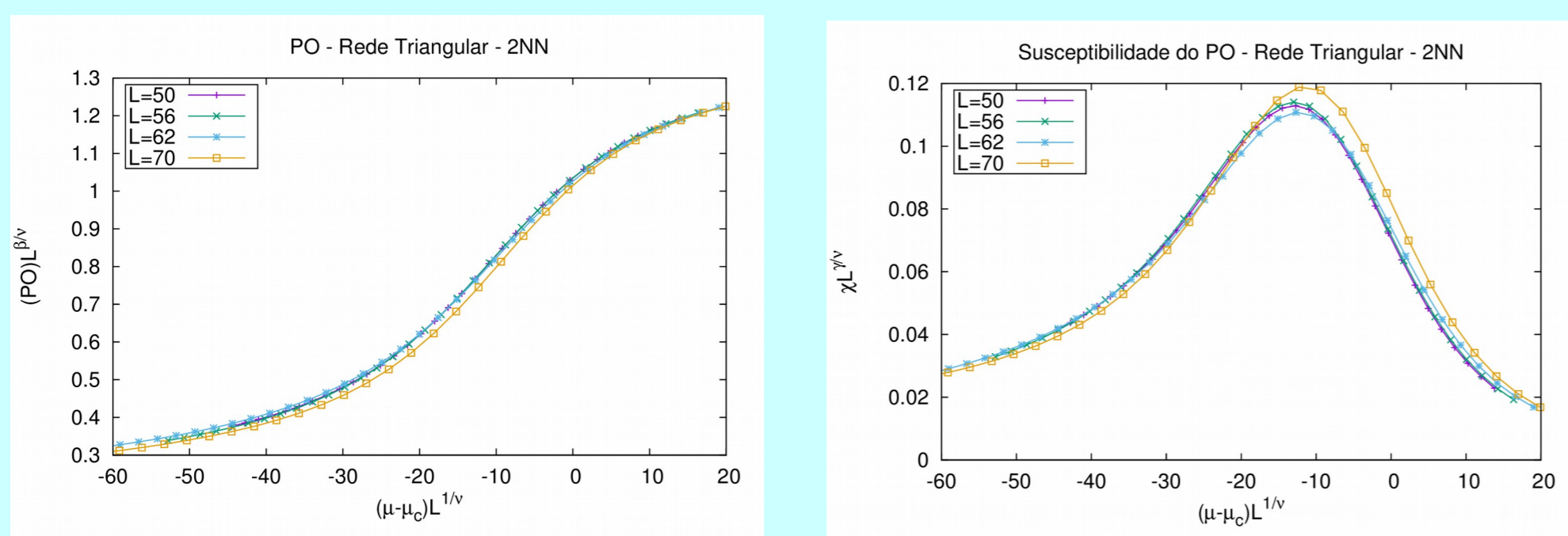


Figura 3: Colapso do parâmetro de ordem (esquerda) e da susceptibilidade (direita) em função do potencial químico para a rede triangular com exclusão de segundos vizinhos. A transição se dá em $\mu_c=1.756$.

Diferentemente dos outros sistemas estudados anteriormente[5], as redes quadrada e triangular com exclusão de terceiros vizinhos apresentam uma transição de fase de primeira ordem. O principal indício desta propriedade está nos dois picos presentes no histograma da densidade em uma simulação com potencial químico próximo à transição.

A medida em que o potencial químico ultrapassa seu valor crítico, a fase mais densa passa a ser dominante sobre a fase menos densa. Este efeito pode ser visto na Figura 4, onde o potencial químico crítico é 3.67.

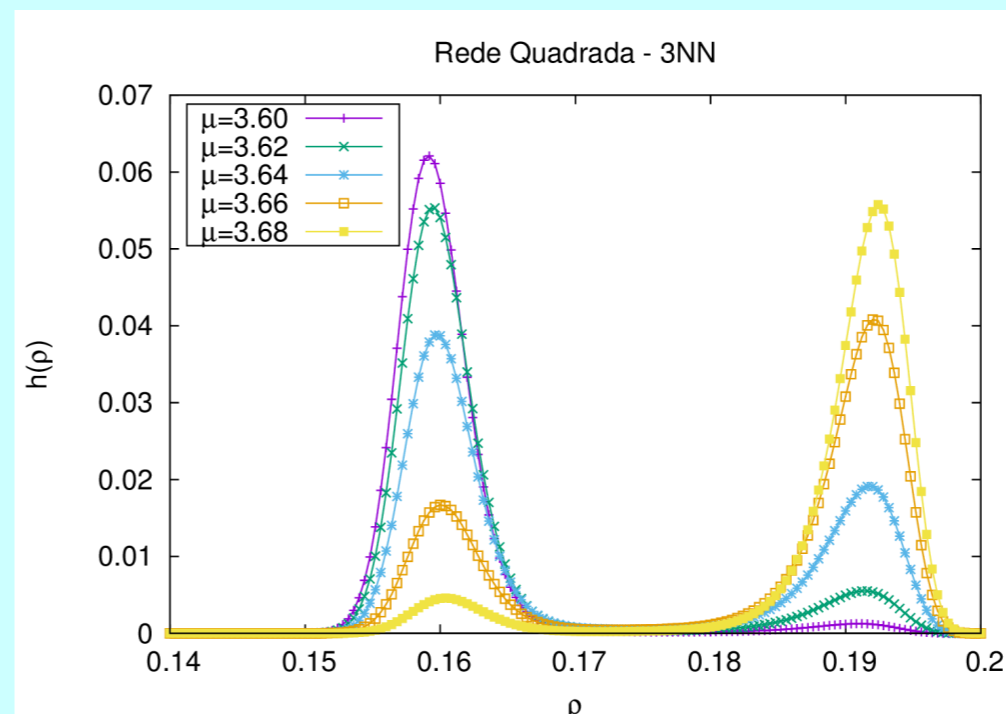


Figura 4: Histograma da densidade na rede quadrada para valores de μ próximos à transição. A fase mais densa se torna mais presente a medida em que o potencial químico aumenta.

Na rede triangular com exclusão de terceiros vizinhos pode-se desenvolver um parâmetro de ordem (P.O.) de maneira a enfatizar a transição de fase. Tal P.O. foi baseado em sub-redes do sistema que surgem por conta da exclusão de vizinhos

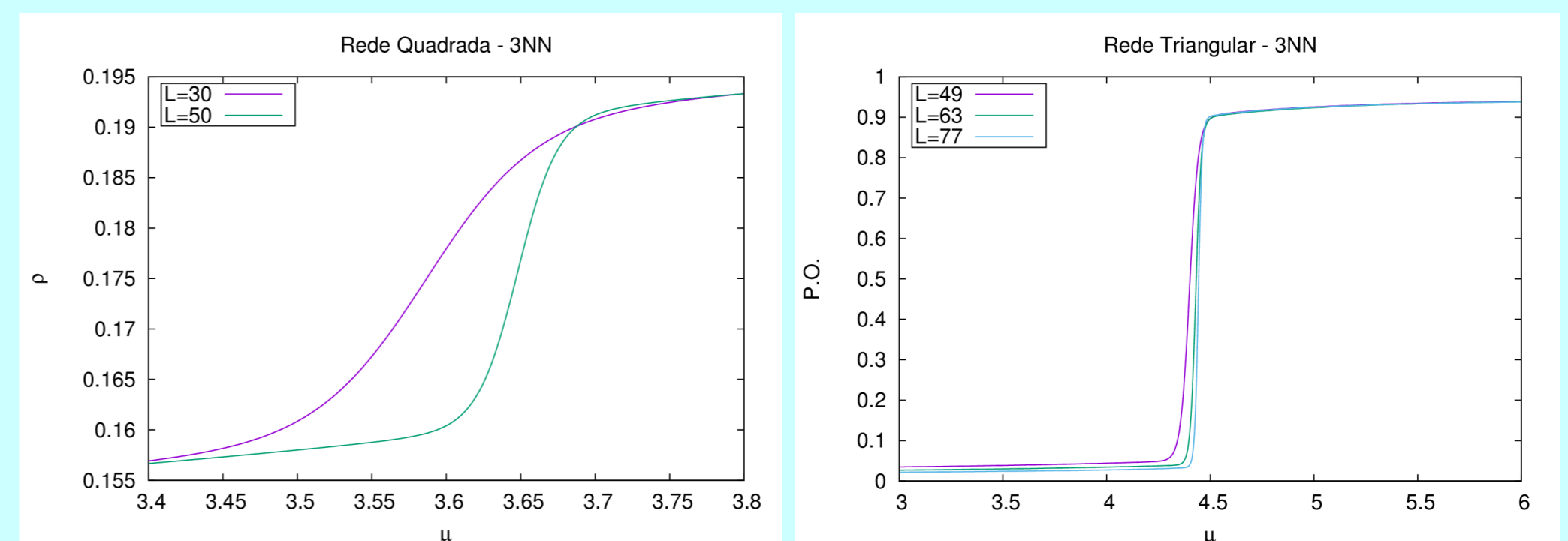


Figura 5: Densidade em função do potencial químico na rede quadrada (esquerda). Parâmetro de ordem em função do potencial químico na rede triangular (direita).

5. Conclusões:

A rede triangular com exclusão de segundos vizinhos apresenta uma transição de fase de segunda ordem, de uma fase líquida para uma fase sólida, em $\mu_c=1.756$, com expoentes críticos correspondentes aos da classe de universalidade do modelo de Potts de quatro estados.

Tanto a rede triangular como a rede quadrada com exclusão de terceiros vizinhos apresentam transição de fase de primeira ordem, explicitadas pela existência de dois picos no histograma da densidade. Por conta disso, uma amostragem Multicanônica se fez necessária de modo a viabilizar o tempo computacional necessário.

Os potenciais químicos de transição foram $\mu_c=3.67$ para a rede quadrada e $\mu_c=4.47$, e estão de acordo com aqueles encontrados na literatura.

6. Referências:

- [1] – FERNANDES, Heitor C. Marques; ARENZON, Jeferson J.; LEVIN, Yan. Monte Carlo simulations of two-dimensional hard core lattice gases. The Journal of chemical physics, v. 126, n. 11, p. 114508, 2007
- [2] - NEWMAN, M. E. J.; BARKEMA, G. T. Monte Carlo Methods in Statistical Physics chapter 3. Oxford University Press: New York, USA, 1999.
- [3] – BERG, Bernd A.; NEUHAUS, Thomas. Multicanonical algorithms for first order phase transitions. Physics Letters B, v. 267, n. 2, p. 249-253, 1991.
- [4] – LANDAU, D. P.; TSAI, Shan-Ho; EXLER, M. A new approach to Monte Carlo simulations in statistical physics: Wang-Landau sampling. American Journal of Physics, v. 72, n. 10, p. 1294-1302, 2004.
- [5] – THEWES, F. C.; FERNANDES, Heitor C. Marques – Gases de Rede com exclusão de primeiros vizinhos. Salão de Iniciação Científica – UFRGS - 2015

O presente trabalho foi realizado com o apoio da Pró-Reitoria de Pesquisa - UFRGS - Brasil