

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

**Fases ordenadas no modelo XY generalizado\***

Gabriel Antônio Canova

Dissertação elaborada sob orientação do Prof. Dr. Jefferson J. Arenzon, co-orientação do Prof. Dr. Yan Levin e apresentada ao Instituto de Física da UFRGS em preenchimento do requisito parcial para obtenção do título de Mestre em Física.

Porto Alegre  
Julho de 2013

---

\* Trabalho financiado pelo Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq)

# Sumário

<b>Resumo</b> . . . . .	3
<b>Abstract</b> . . . . .	4
<b>1. Introdução</b> . . . . .	5
<b>2. Modelo XY</b> . . . . .	7
2.1 Introdução . . . . .	7
2.2 Transição Kosterlitz-Thouless . . . . .	8
2.3 Helicidade . . . . .	11
<b>3. Modelo XY Generalizado</b> . . . . .	16
3.1 Caso $q = 2$ . . . . .	16
3.2 Caso $q = 3$ . . . . .	19
<b>4. Resultados</b> . . . . .	23
4.1 Magnetização e Susceptibilidade . . . . .	23
4.2 Helicidade . . . . .	26
4.3 Cumulante de Binder . . . . .	31
4.4 Diagrama de fases . . . . .	33
<b>5. Conclusões</b> . . . . .	41
<b>Apêndice</b> . . . . .	42
<b>A. Simulação</b> . . . . .	43
A.1 Algoritmo <i>Single-flip</i> . . . . .	43
A.2 Algoritmo de Wolff . . . . .	44
<b>B. Derivação da helicidade</b> . . . . .	45

# Resumo

Embora em um sistema bidimensional com simetria contínua não haja ordem de longo alcance para temperaturas finitas, o modelo XY 2D exibe uma transição de fase de ordem infinita não usual, associada com a dissociação de defeitos topológicos chamados de vórtices-inteiros, e que pertence à classe de universalidade de Kosterlitz-Thouless (KT). Generalizações do modelo XY, incluindo competição entre um termo ferromagnético e um nemático, foram introduzidas e largamente estudadas por diversos autores. Essas interações nemáticas criam novas transições de fases e novos defeitos topológicos, como vórtices semi-inteiros. Neste trabalho, para um caso particular desses modelos generalizados, exploramos as classes de universalidades e o diagrama de fases através de simulações de Monte Carlo, escalonamento de tamanhos finitos e análise da helicidade. Em particular, encontramos que a competição entre os termos ferromagnético e nemático dá origem a uma nova linha de transição, neste caso na classe de universalidade do modelo Potts com 3 estados.

**Palavras-chave:** Modelo XY, transição Kosterlitz Thouless, simulação de Monte Carlo.

# Abstract

Although in a two-dimensional system with continuous symmetry there is no long-range order at finite temperature, the 2D XY model exhibits an unusual infinite order phase transition, associated with the unbinding of topological defects called integer-vortices, and which belongs to the Kosterlitz-Thouless (KT) universality class. Generalizations of the XY model, including competition between a ferromagnetic and a nematic-like term, have been introduced and widely studied by many authors. These nematic-like interactions create new phase transitions and new topological defects, like half-integer-vortices. In this work, for a particular case of these generalized models, we explore the universality classes of the transitions and the phase diagram through Monte Carlo simulations, finite size scaling and helicity analysis. In particular, we find that the competition between the ferromagnetic and nematic terms gives origin to a new transition line belonging, in this case, to the 3 states Potts universality class.

**Keywords:** XY model, Kosterlitz Thouless transition, Monte Carlo simulation.

## Capítulo 1

# Introdução

Em mecânica estatística, sistemas que passam por uma transição de fase são caracterizados por variações qualitativas em suas propriedades macroscópicas mensuráveis. As transições podem ser classificadas como de primeira ordem quando há uma descontinuidade na primeira derivada da energia livre, como o parâmetro de ordem. Quando o parâmetro de ordem decresce continuamente a zero, a transição é de segunda ordem, ou contínua. Além disso, existem transições contínuas de ordem infinita que não estão associadas à quebra de simetrias. No caso de sistemas ferromagnéticos ou antiferromagnéticos, a transição envolve a passagem de um estado desordenado de altas temperaturas para um de baixas temperaturas ordenado, a partir do qual os spins adquirem uma orientação preferencial ferromagnética ou antiferromagnética. Assim, spins vizinhos tendem a ter a mesma orientação no caso ferromagnético ou oposta no caso antiferromagnético, ou seja, em ambos os casos temos ordem de curto alcance. Porém, o que mede a ordem do sistema é o quanto os spins estão correlacionados a longas distâncias. Dizemos que o sistema possui ordem de longo alcance se a correlação entre os spins é independente da distância, e que possui pseudo-ordem de longo alcance se decai a zero como uma lei de potência. Por exemplo, na transição ferromagnética, a ordem de longo alcance ocorre abaixo da temperatura crítica, enquanto que a pseudo-ordem acontece exatamente nessa temperatura.

Mermim e Wagner [1] provaram que sistemas com spins contínuos com fase angular periódica e em duas dimensões, como o XY, não possuem fases com ordem de longo alcance e que também não há magnetização espontânea para qualquer temperatura finita, nem uma transição de fase ferromagnética ou antiferromagnética. Porém, Kosterlitz e Thouless [2, 3] mostraram, através da teoria de grupo de renormalização, a existência de uma transição de fase não usual e mediada por defeitos topológicos chamados de vórtices, diferentemente dos casos ferromagnético e antiferromagnético. Apesar de não haver ordem de longo alcance mesmo para baixas temperaturas, há, entretanto, uma pseudo-ordem de longo alcance onde a correlação

---

entre os spins decai como uma lei de potência. Outro ponto interessante é a transição KT ser uma transição de ordem infinita, não envolvendo, portanto, quebras de simetrias em duas dimensões. Por outro lado, no caso tridimensional, a transição é de segunda ordem e o sistema possui ordem de longo alcance na fase de baixas temperaturas [4].

Por ser o modelo bidimensional de spins contínuos mais simples e, também, o arquétipo para o estudo da transição Kosterlitz-Thouless (KT), o modelo XY vem sendo amplamente estudado analítica e numericamente há mais de três décadas, mas ainda permanece como um paradigma a ser solucionado [5]. Além disso, possui aplicações experimentais em Hélio superfluido [6, 7] e em arranjos de junções Josephson [8, 9].

A transição KT é de grande importância pois abrange muitos outros modelos além do XY. Está presente em modelos com antiferromagnetismo [10, 11], no modelo F de seis vértices [12], além de sistemas com interações de longo alcance [13]. Também foram estudados modelos com diluição (remoção de conexões da rede) por se aproximarem de sistemas reais onde há impurezas não-magnéticas [14, 15]. O que se verificou é que a diluição favorece a formação dos vórtices e, conseqüentemente, aumenta a desordem do sistema reduzindo a temperatura crítica de transição. Somado a isso, foi mostrado que a transição deixa de existir quando o número de sítios vazios se aproxima do limite de percolação da rede [15].

Outros modelos generalizam o XY através da inclusão de campos externos que favorecem a orientação dos spins em um ou mais eixos preferenciais [16, 17], ou com a adição de termos nemáticos que favorecem spins com diferentes alinhamentos [18–25]. No segundo caso, novas fases termodinâmicas aparecem nas quais os spins possuem pseudo-ordem nemática de longo alcance, além de transições em diferentes classes de universalidade como Ising 2D e Potts 3 estados 2D. Também surgem novos defeitos topológicos como vórtices fracionários e paredes de domínios [18]. Portanto, é de grande interesse estudar tais modelos, além de identificar possíveis transições de fase e suas classes de universalidades por meio dos expoentes críticos.

Nosso objetivo neste trabalho é aprimorar os resultados obtidos para um caso particular desses modelos com interações nemáticas, iniciado por Poderoso *et al* [25], e que, recentemente, gerou algumas controvérsias [26]. Para isso, utilizaremos métodos de Monte Carlo e escalamento de tamanhos finitos. Forneceremos um diagrama de fases mais detalhado assim como resultados para outros observáveis do modelo, como a helicidade. Primeiramente revisaremos o modelo XY, a transição Kosterlitz-Thouless e os modelos com interações nemáticas já estudados. Então, mostraremos em seguida os novos resultados e as conclusões que obtivemos de nosso trabalho.

## Capítulo 2

# Modelo XY

Neste capítulo abordaremos os aspectos já bem estudados e entendidos do modelo XY em duas dimensões. Inicialmente, introduziremos o Hamiltoniano e, em seguida, discutiremos a transição Kosterlitz-Thouless bem como alguns dos observáveis do modelo que serão relevantes nos próximos capítulos, como magnetização, susceptibilidade e helicidade.

### 2.1 Introdução

O Hamiltoniano, para um sistema de spins confinados a girar no plano de uma rede quadrada, é dado por

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} \cos(\theta_i - \theta_j) \quad (2.1)$$

onde  $J = 1$  e  $\langle ij \rangle$  representa a soma sobre os primeiros vizinhos da rede. Os spins são contínuos e  $0 \leq \theta < 2\pi$  sendo que  $\theta_i - \theta_j$  é, portanto, a diferença angular entre os spins  $i$  e  $j$ . O Hamiltoniano (2.1) tende a alinhar seus spins e a energia será mínima quando  $\phi \equiv \theta_i - \theta_j = 0$ , ou seja, os spins são todos paralelos. Na fase de altas temperaturas, os spins estão orientados aleatoriamente, mas conforme resfriamos o sistema, passam a se orientar em uma determinada direção. Porém, como mencionado anteriormente, pelo fato do Hamiltoniano (2.1) se enquadrar na condição de spins contínuos bidimensionais, o sistema não possui ordem ferromagnética para nenhuma temperatura finita e, como consequência, não há transição dessa natureza. Porém, há uma transição na classe de universalidade KT [2, 3], a ser descrita na próxima seção.

## 2.2 Transição Kosterlitz-Thouless

Para baixas temperaturas, o Hamiltoniano (2.1) possui excitações do estado fundamental, proporcionais a  $\phi^2$  e chamadas de *spin waves*, que destroem a ordem de longo alcance do sistema. Além disso, como Kosterlitz e Thouless mostraram [2, 3], existem defeitos topológicos que são estados metaestáveis onde os spins formam pares de vórtices-antivórtices inteiros, como mostrado na figura 2.1. Ao escolher uma trajetória fechada no sentido anti-horário sobre os sítios da rede, o valor da soma das diferenças de fase entre os spins é um múltiplo inteiro positivo de  $2\pi$  para os vórtices e um inteiro negativo para os antivórtices. Na fase de baixas temperaturas, os vórtices-antivórtices encontram-se unidos em pares, fazendo com que a função de correlação entre os spins decaia como uma lei de potência com a distância. Conforme aumentamos a temperatura do sistema e entramos na fase desordenada, em  $T_{\text{KT}} \simeq 0.893$ , esses pares se dissociam, a partir do que a função de correlação passa a decair exponencialmente com a distância. Portanto, resumindo, temos que

$$\langle \mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_0 \rangle = \langle \cos[\theta(\mathbf{r}_i) - \theta(\mathbf{r}_0)] \rangle \sim \begin{cases} |r_i - r_0|^{-\eta(T)} & \text{se } T < T_{\text{KT}} \\ e^{-|r_i - r_0|/\xi} & \text{se } T > T_{\text{KT}} \end{cases}$$

onde  $\langle \dots \rangle$  significa uma média térmica e  $\xi$  é o comprimento de correlação. Exata-

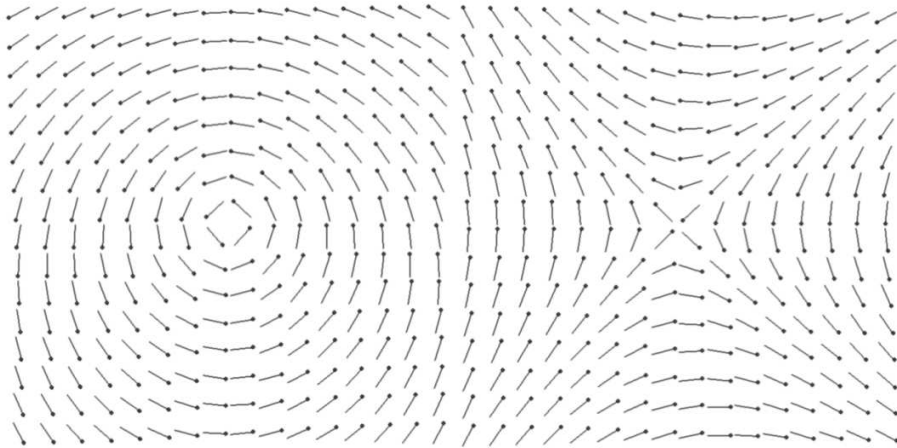


Fig. 2.1: Par vórtice (esquerda) e antivórtice (direita) na fase de baixas temperaturas. Na fase de altas temperaturas,  $T > T_{\text{KT}} \simeq 0.893$ , esses pares se dissociam.

mente na transição,  $\eta = 1/4$ . Relembrando que em uma transição ferromagnética usual, esperamos que na fase de baixas temperaturas a função de correlação seja constante, enquanto que na transição decaia como uma lei de potência. Porém,



neste caso, para qualquer temperatura abaixo da transição, a correlação decai como uma lei de potência. Além disso, de acordo com as Refs. [3, 27], o comprimento de correlação, quando a temperatura diminui na direção de  $T_{\text{KT}}$ , diverge como (singularidade essencial)

$$\xi \sim e^{b/t^{1/2}} \quad (2.2)$$

onde  $t = (T - T_{\text{KT}})/T_{\text{KT}}$  é a temperatura reduzida e  $b > 0$ . Para  $T < T_{\text{KT}}$ , o comprimento de correlação é sempre infinito, o que faz com que a susceptibilidade magnética também seja, pois  $\chi \sim \xi^{2-\eta}$ . Assim, toda fase abaixo de  $T_{\text{KT}}$  é crítica.

Apesar de no limite termodinâmico não haver ordem ferromagnética para qualquer temperatura finita, para tamanhos finitos há, entretanto, uma magnetização espontânea que nas simulações é medida como

$$m = \frac{1}{L^2} \left| \sum_j \exp(i\theta_j) \right| = \frac{1}{L^2} \sqrt{\left( \sum_j \cos \theta_j \right)^2 + \left( \sum_j \sin \theta_j \right)^2} \quad (2.3)$$

e a respectiva susceptibilidade magnética é dada por

$$\chi = \beta L^2 (\langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2). \quad (2.4)$$

Quando uma transição não é do tipo KT, na região próxima à temperatura crítica, as propriedades do sistema podem ser descritas por leis de potência caracterizadas pelos expoentes críticos de cada observável, ou seja,

$$\xi \sim t^{-\nu} \quad (2.5)$$

$$C \sim t^\alpha \quad (2.6)$$

$$m \sim t^\beta \quad (2.7)$$

$$\chi \sim t^{-\gamma} \quad (2.8)$$

onde  $C$  e  $\chi$  são, respectivamente, o calor específico e a susceptibilidade magnética. Além disso, podemos utilizar escalonamento de tamanhos finitos (*finite size scaling-FSS*) para obter os expoentes críticos  $\beta$  e  $\gamma$  através de

$$m = L^{-\beta/\nu} f(tL^{1/\nu}) \quad \text{e} \quad \chi = L^{\gamma/\nu} g(tL^{1/\nu}) \quad (2.9)$$

onde  $f$  e  $g$  são funções de escala. Porém, isso não é válido na transição KT, pois, como vimos, toda fase de baixas temperaturas é crítica e o comprimento de correlação diverge. Contudo, é possível mostrar que na fase de baixas temperaturas a razão entre os expoentes críticos é bem definida e a magnetização e a susceptibilidade escalam com o tamanho do sistema de acordo com

$$m \propto L^{-\beta/\nu} \quad \text{e} \quad \chi \propto L^{\gamma/\nu}, \quad (2.10)$$

onde, exatamente na transição,  $\beta/\nu = 1/8$  e  $\gamma/\nu = 7/4$ , ou seja, a mesma razão entre expoentes que no modelo de Ising 2D. Porém, o que diferencia uma transição tipo KT da tipo Ising, é que na fase de baixa temperatura KT também há FSS, todavia, com expoentes críticos não-universais, ao contrário da Ising que possui apenas na região crítica como toda transição de segunda ordem.

Nas figuras 2.2 e 2.3, temos a magnetização e a susceptibilidade como funções da temperatura para diferentes tamanhos da rede. À medida que aumentamos o tamanho do sistema, a magnetização se aproxima de zero, indicando que no limite termodinâmico será nula, exceto em  $T = 0$ , onde temos todos os spins alinhados. Já o pico na susceptibilidade cresce de acordo com o *scaling* em (2.10). Também podemos notar que ela cresce na fase de baixas temperaturas, porém, se pode mostrar que os expoentes são não-universais.

Vimos que utilizando FSS podemos inferir a classe de universalidade de uma transição. Porém, às vezes, isso pode não ser suficiente para determinar se uma transição é do tipo KT. Desse modo, na próxima seção definiremos o parâmetro de ordem adequado para o modelo XY 2D: a helicidade.

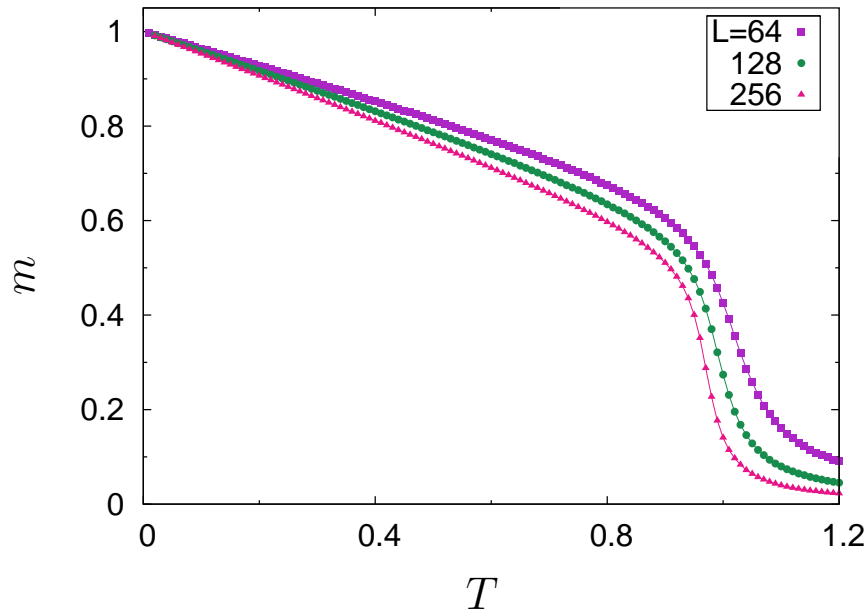


Fig. 2.2: Magnetização no modelo XY, Eq. (2.3), para diferentes tamanhos ( $L$ ) do sistema. As curvas decaem com o tamanho para qualquer temperatura finita.

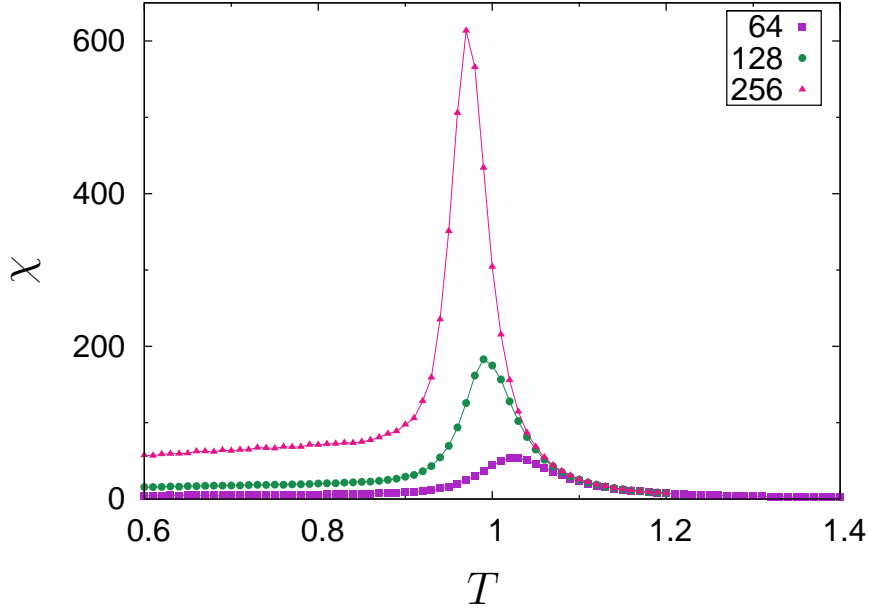


Fig. 2.3: Susceptibilidade magnética do modelo XY, Eq. (2.4), para diferentes tamanhos do sistema. Para  $T < T_{\text{KT}}$ , as curvas sobem e o pico se desloca para esquerda à medida que o tamanho do sistema aumenta.

## 2.3 Helicidade

A helicidade (*helicity modulus*) pode ser entendida como a resposta do sistema quando impomos sobre ele um campo externo global que faça uma pequena torção nos spins. De acordo com a definição nas Refs. [28–30], estamos interessados em medir o acréscimo na energia livre quando introduzimos uma pequena diferença de fase nos spins na direção  $\hat{x}$ , ou seja, fazemos uma substituição no Hamiltoniano tal que

$$\mathcal{H}(\theta_i - \theta_j) \rightarrow \mathcal{H}(\theta_i - \theta_j - \mathbf{r}_{ij} \cdot \hat{x} \delta_x / L) \quad (2.11)$$

sendo  $\mathbf{r}_{ij} = \hat{x}$  ou  $\hat{y}$  e  $\delta_x$  como a soma total da diferença de fase dos spins na direção  $\hat{x}$ . Então, o custo dessa torção na energia livre é dado por

$$\Delta F = F(\delta_x) - F(0) \quad (2.12)$$

onde  $F(\delta_x)$  e  $F(0)$  representam as energias livres perturbada e não-perturbada, respectivamente. Pela simetria do Hamiltoniano (2.1) e devido ao fato do sistema

ser isotrópico, podemos fazer a aproximação para  $\delta_x$  pequeno

$$\Delta F \approx \frac{\delta_x^2}{2!} \frac{\partial^2 F}{\partial \delta_x^2} \Big|_{\delta_x=0} + \frac{\delta_x^4}{4!} \frac{\partial^4 F}{\partial \delta_x^4} \Big|_{\delta_x=0}, \quad (2.13)$$

pois os termos ímpares, tais como os abaixo, serão nulos

$$\frac{\partial F}{\partial \delta_x} \Big|_{\delta_x=0} = \frac{\partial^3 F}{\partial \delta_x^3} \Big|_{\delta_x=0} = 0. \quad (2.14)$$

Definimos a helicidade e a helicidade de quarta ordem como

$$\langle \Upsilon \rangle \equiv \frac{\partial^2 F}{\partial \delta_x^2} \Big|_{\delta_x=0} \quad (2.15)$$

$$\langle \Upsilon_4 \rangle \equiv \frac{\partial^4 F}{\partial \delta_x^4} \Big|_{\delta_x=0}. \quad (2.16)$$

Para um potencial que dependa apenas da diferença dos ângulos entre os spins, de acordo com a Ref. [28], a helicidade é dada por (ver apêndice B)

$$\langle \Upsilon \rangle = \langle e \rangle - L^2 \beta \langle s^2 \rangle, \quad (2.17)$$

por outro lado, a helicidade de quarta ordem é dada por

$$\langle \Upsilon_4 \rangle = \frac{1}{L^2} \langle e'' \rangle - 4\beta \langle s'' s \rangle - 3\beta [\langle \Upsilon^2 \rangle - \langle \Upsilon \rangle^2] + 2\beta^3 L^4 \langle s^4 \rangle, \quad (2.18)$$

sendo

$$e \equiv \frac{1}{L^2} \sum_{\langle ij \rangle_x} \frac{\partial^2 U_{ij}(\phi)}{\partial^2 \phi} \quad (2.19)$$

$$s \equiv \frac{1}{L^2} \sum_{\langle ij \rangle_x} \frac{\partial U_{ij}(\phi)}{\partial \phi} \quad (2.20)$$

e  $U_{ij}(\theta_i - \theta_j)$  a energia de ligação entre pares de sítios. As aspas se referem à derivada em relação a  $\phi$  e  $\langle ij \rangle_x$  é a soma sobre primeiros vizinhos apenas na direção  $\hat{x}$ . Para o Hamiltoniano (2.1), a helicidade é, portanto, medida como [4, 10, 31, 32]

$$\langle \Upsilon \rangle = -\frac{1}{2} \langle u \rangle - \frac{\beta}{L^2} \left\langle \left( \sum_{\langle ij \rangle_x} \sin(\theta_i - \theta_j) \right)^2 \right\rangle. \quad (2.21)$$

onde  $\langle u \rangle$  é a energia interna por spin do sistema.

As equações obtidas através da teoria de grupo de renormalização (RG) por Kosterlitz e Thouless [3, 33, 34] fornecem as propriedades críticas da transição KT e, para o modelo XY, predizem um salto descontínuo da helicidade na transição tal que

$$\lim_{L \rightarrow \infty} \Upsilon(T_{\text{KT}}) = \frac{2T_{\text{KT}}}{\pi}. \quad (2.22)$$

Na figura 2.4, temos a helicidade como função da temperatura para diferentes tamanhos, além da reta  $y = 2T/\pi$ . Para tamanhos finitos, o ponto onde a reta e a helicidade se cruzam fornece um limite superior para o valor de  $T_{\text{KT}}$ . À medida que o tamanho do sistema aumenta, vamos nos aproximando da temperatura crítica real.

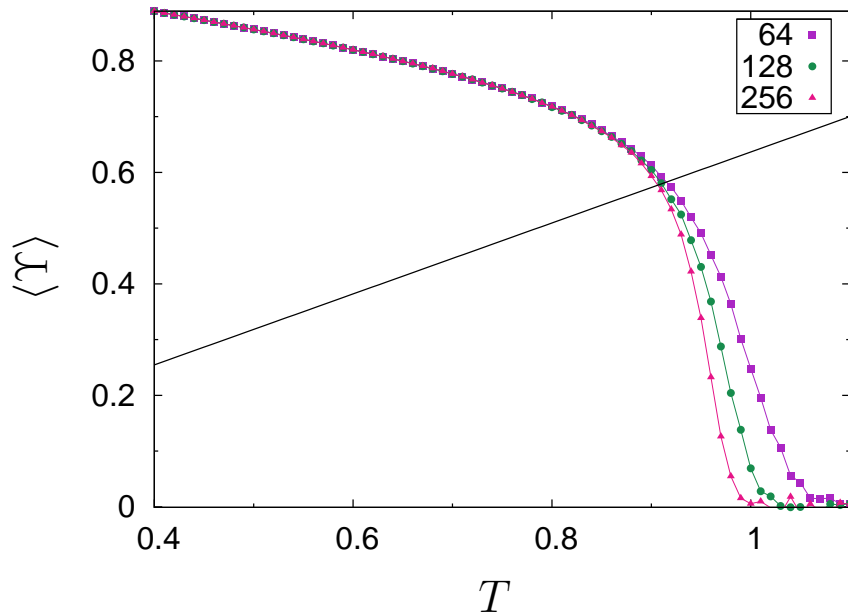


Fig. 2.4: Helicidade para o modelo XY, Eq. (2.21), em função da temperatura para diferentes tamanhos juntamente com a reta  $2T/\pi$ . Conforme  $L$  aumenta, o ponto de cruzamento entre a reta e a helicidade converge para a temperatura crítica.

Weber e Minhagen [35] desenvolveram um método para estimar  $T_{\text{KT}}$  que consiste em achar a temperatura que minimiza o erro quadrático médio do ajuste dos dados com a expressão abaixo que leva em conta correções de tamanho finito

$$\Upsilon(N) = \frac{2T}{\pi} \left( 1 + \frac{1}{2 \ln L + C} \right) \quad (2.23)$$

sendo  $C$  um parâmetro livre. Quando consideramos os resultados da Fig. 2.4, para os diferentes tamanhos, encontramos o menor erro para  $T \simeq 0.89$ , como mostrado na figura 2.5. Logo, uma estimativa consistente com o valor conhecido de  $T_{\text{KT}}$ .

Um problema resultante de sistemas finitos é que, mesmo para tamanhos grandes, ainda não conseguimos observar a descontinuidade em  $\langle \Upsilon \rangle$ . Recorremos, então, à helicidade de ordem mais alta,  $\langle \Upsilon_4 \rangle$ , pois como o mínimo global em  $\Delta F$  ocorre quando todos os spins estão alinhados, ou seja, quando  $\delta_x = 0$ , disso decorre que  $F(\delta_x) \geq F(0)$ , e, portanto,  $\Delta F \geq 0$ . A partir disso, concluímos que se  $\langle \Upsilon_4 \rangle$  for menor do que zero para alguma temperatura,  $\langle \Upsilon \rangle$  apresentará um salto positivo descontínuo para compensar e deixar  $\Delta F \geq 0$ . Isso pode ser verificado na figura 2.6, extraída da Ref. [28], onde temos  $\langle \Upsilon_4 \rangle$  em função da temperatura para diferentes tamanhos. Conforme o tamanho aumenta, a temperatura onde ocorre o pico negativo em  $\langle \Upsilon_4 \rangle$  se aproxima de  $T_{\text{KT}}$ . Assim,  $\langle \Upsilon_4 \rangle$  é mais um observável útil para identificar uma transição KT e sua temperatura crítica.

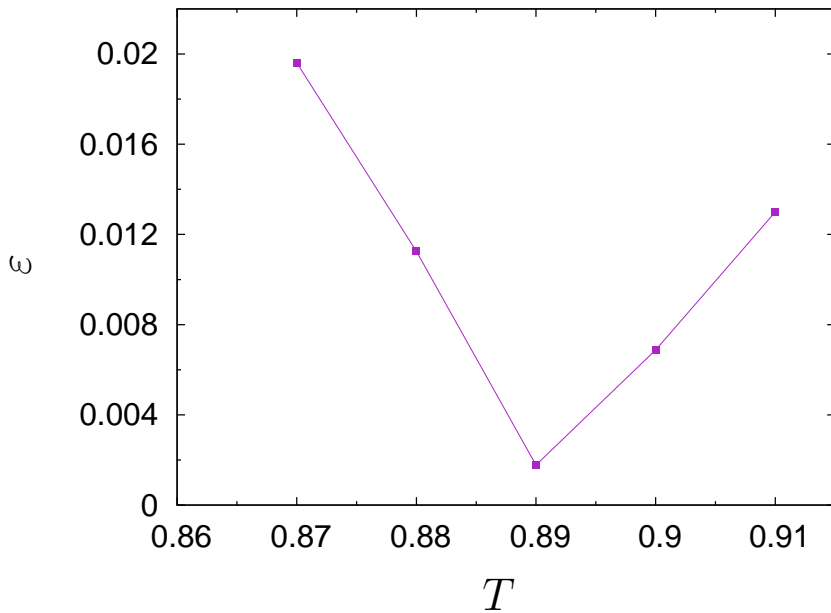


Fig. 2.5: Erro quadrático médio do ajuste Eq. (2.23) em função da temperatura. O mínimo ocorre em torno de  $T \simeq 0.89$ .

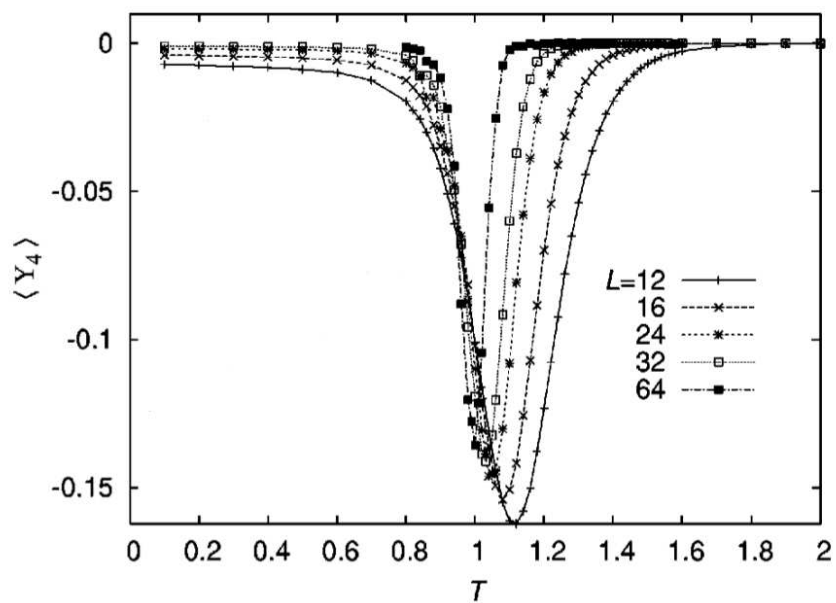


Fig. 2.6: Helicidade de quarta ordem para o modelo XY, Eq. (2.18), em função da temperatura para diferentes tamanhos. Figura retirada da Ref. [28]. Note que o pico negativo ainda dista do valor aceito de  $T_{\text{KT}} \simeq 0.893$  devido aos pequenos tamanhos considerados.

## Capítulo 3

# Modelo XY Generalizado

Para explorar a possibilidade de outros defeitos topológicos e o resultado da competição destes com os pares vórtices-antivórtices presentes no modelo XY, estudamos o Hamiltoniano Eq. (2.1) acrescido de um termo tipo nemático

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle ij \rangle} [\Delta \cos(\theta_i - \theta_j) + (1 - \Delta) \cos(q\theta_i - q\theta_j)] \quad (3.1)$$

sendo  $q$  um inteiro positivo e  $0 \leq \Delta \leq 1$ . Através do parâmetro de acoplamento  $\Delta$  estabelecemos o peso do termo ferromagnético frente ao nemático, onde o último favorece spins com uma diferença de fase  $2k\pi/q$ , com  $k \leq q$ , sendo  $k$  um inteiro. Quando  $\Delta = 0$ , temos um sistema puramente nemático e invariante sob rotações  $\theta_i \rightarrow \theta_i + 2\pi/q$ . Se fizermos uma transformação tal que  $\bar{\theta}_i = q\theta_i$ , assim

$$\bar{\theta}_i \rightarrow \bar{\theta}_i + 2\pi, \quad (3.2)$$

recuperamos a simetria original do modelo XY. Então, a função de partição para o modelo puramente nemático será a mesma e, conseqüentemente, teremos a mesma temperatura crítica  $T_{KT} \simeq 0.893$  do modelo XY. Dessa maneira, é interessante sabermos quais são os efeitos de considerar a competição entre os dois termos, ou seja,  $0 < \Delta < 1$ .

### 3.1 Caso $q = 2$

Para o Hamiltoniano generalizado (3.1), no caso  $q = 2$ , o termo nemático favorece spins antiparalelos, ou seja, defasados por  $\pi$ . Este caso particular foi extensivamente estudado por diversos autores [18–23, 36]. Os principais resultados são mostrados no diagrama de fases da Fig. 3.1, obtido na Ref. [36]. As linhas indicadas por triângulos foram estimadas a partir dos picos no calor específico

$$C(T) = \beta^2 (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2). \quad (3.3)$$



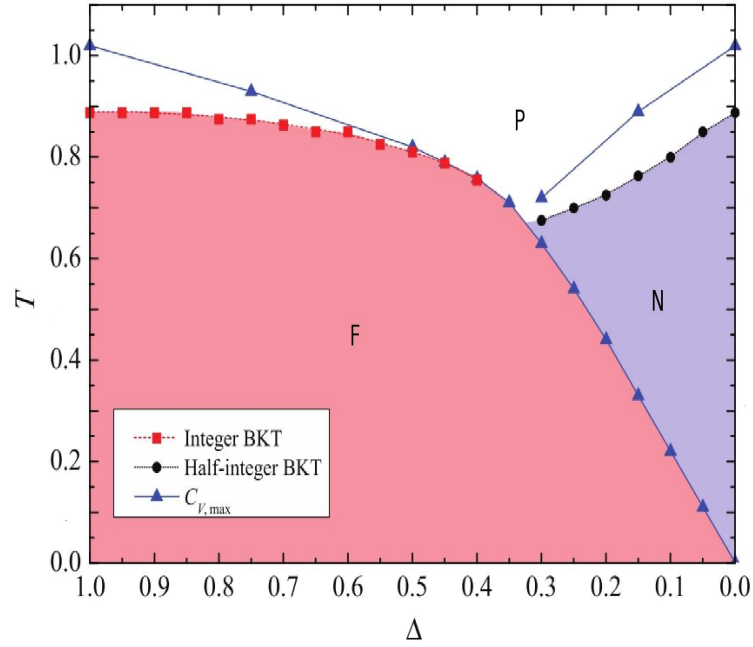


Fig. 3.1: Diagrama de fases para  $q = 2$  [36]. Fase **F**, pseudo-ordem ferromagnética. Fase **N**, pseudo-ordem nemática. Fase **P**, paramagnética. Ponto multicrítico em  $\Delta \simeq 0.3$ .

As linhas representadas por quadrados e círculos foram obtidas com a helicidade. Para altas temperaturas, na fase paramagnética **P**, o estado de equilíbrio é desordenando. Conforme diminuimos a temperatura, o diagrama se bifurca em duas fases que dependem do valor de  $\Delta$ . Na região **F**, temos a fase ferromagnética do modelo XY convencional e sua transição para a fase **P** pertencendo à classe de universalidade KT. Para  $\Delta \lesssim 0.3$ , surge uma nova fase nemática **N** na qual os spins têm orientação preferencial antiparalela. Como na fase **F**, também não há ordenamento de longo alcance para qualquer temperatura finita, por isso denominamos a fase como pseudo-nemática, associada à ordem de curto alcance. Além disso, aparecem novas excitações, como paredes de domínios e vórtices semi-inteiros, mostradas na figura 3.2. A primeira é característica do modelo de Ising 2D, enquanto a segunda é análoga aos vórtices inteiros do modelo XY usual. A transição de **N** para **P** também pertence à classe de universalidade KT e está associada à dissociação de pares de vórtices-antivórtices semi-inteiros onde a função de correlação passa a decair exponencialmente com a distância. Já a transição de **F** para **N**, como há uma quebra de simetria de reflexão, pertence à classe de universalidade Ising 2D, com

a passagem de uma fase com pseudo-ordenamento ferromagnético para outra com pseudo-ordenamento nemático. Resultados semelhantes também foram obtidos em simulações na rede triangular [22].

Por outro lado, em três dimensões o diagrama de fases possui estrutura análoga ao da Fig. 3.1, exceto que a transição **F-N** está na classe de universalidade Ising 3D, enquanto que as transições **F-P** e **N-P** estão na classe de universalidade do modelo XY 3D [23].

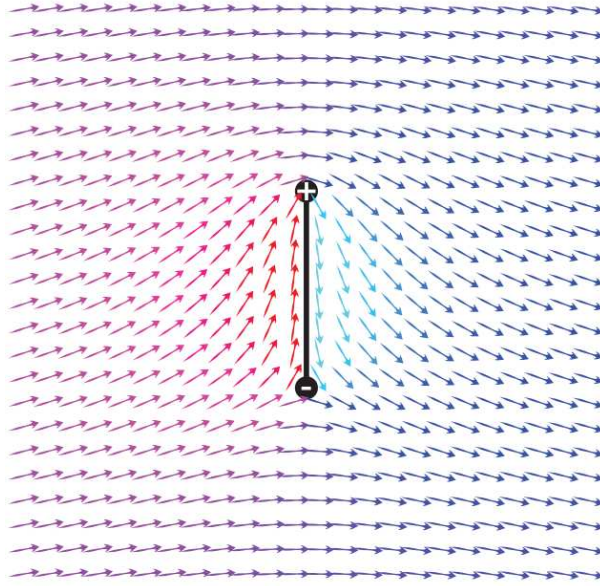


Fig. 3.2: Par semi-vórtice (+) e semi-antivórtice (-) juntamente com a parede de domínio, linha cheia, unindo-os. De modo análogo aos vórtices-antivórtices que se dissociam na transição **F-P**, o par semi-vórtice e semi-antivórtice se dissociam na transição **N-P**. Figura retirada da Ref. [24].

De acordo com as possíveis simetrias do Hamiltoniano (3.1), precisamos generalizar a expressão para a magnetização (2.3) para medirmos a ordem relevante para cada escolha do parâmetro nemático  $q$  e, conseqüentemente, que nos permita identificar outras possíveis transições de fase. Assim, a magnetização generalizada é dada por

$$m_k = \frac{1}{L^2} \left| \sum_j \exp(ik\theta_j) \right| = \frac{1}{L^2} \sqrt{\left( \sum_j \cos(k\theta_j) \right)^2 + \left( \sum_j \sin(k\theta_j) \right)^2} \quad (3.4)$$

onde  $k = 1, \dots, q$ . As respectivas susceptibilidades são dadas por

$$\chi_k = \beta L^2 (\langle m_k^2 \rangle - \langle m_k \rangle^2). \quad (3.5)$$

Como a fase **N** possui pseudo-ordem antiparalela, a magnetização que devemos utilizar é  $m_2$ , pois esperamos que  $m_1 \approx 0$  e  $m_2 > 0$  na fase de baixas temperaturas. Ao fazermos FSS nas transições **N-P** e **F-N**, encontramos que  $m_{1,2} \propto L^{-1/8}$  e  $\chi_{1,2} \propto L^{7/4}$ , respectivamente. Nas figuras 3.3 e 3.4, mostramos a magnetização e susceptibilidade para  $\Delta = 0.25$ . Podemos ver que  $m_1$  tem comportamento semelhante a uma transição tipo Ising, onde a magnetização cai abruptamente a zero, diferentemente de  $m_2$  que, por ser da classe KT, possui comportamento semelhante à magnetização da figura 2.2.

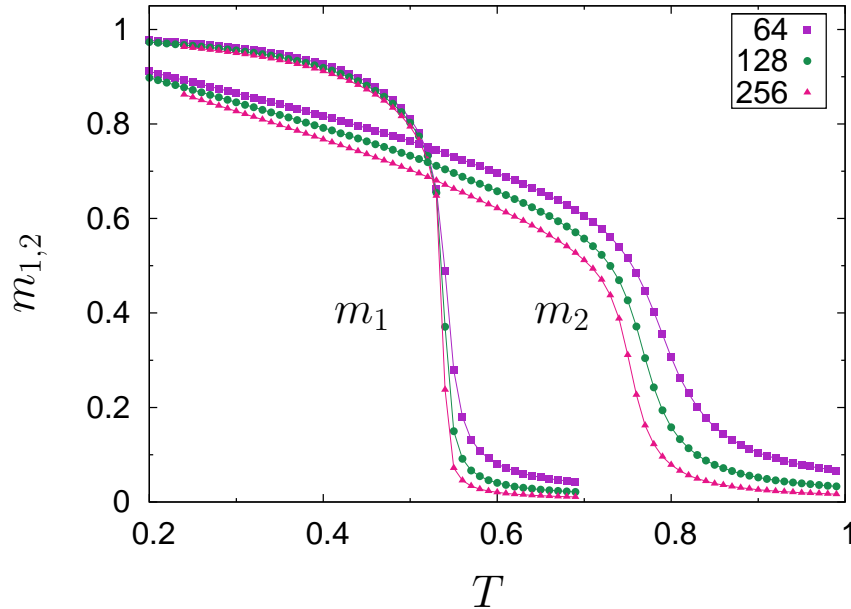


Fig. 3.3: Magnetização para o modelo XY generalizado: caso  $q = 2$  e  $\Delta = 0.25$ . Para a curva  $m_1$ , na transição tipo Ising, temos  $T_c \simeq 0.54$ , enquanto para curva  $m_2$ , na transição tipo KT, temos  $T_c \simeq 0.74$ .

### 3.2 Caso $q = 3$

Recentemente, Poderoso *et al* [25] estudaram o modelo para  $q = 3$ . Embora os resultados sejam similares ao caso  $q = 2$ , na fase nemática, há uma orientação

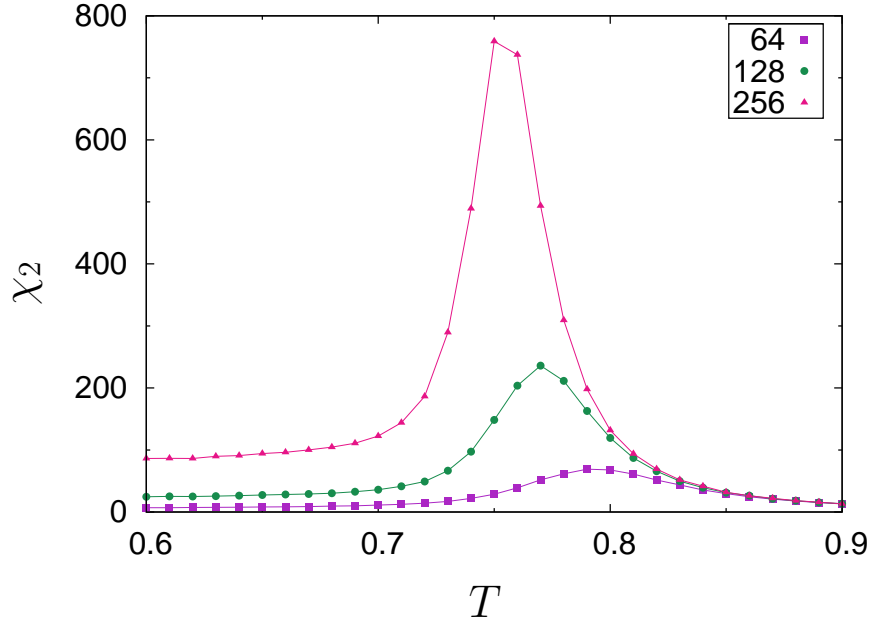


Fig. 3.4: Susceptibilidade para o caso  $q = 2$  e  $\Delta = 0.25$  correspondente à  $m_2$ .

preferencial entre spins defasados por  $\pi/3$ . Ao invés da transição entre as fases **F** e **N** estar na classe de universalidade do modelo de Ising 2D, pertence à classe de universalidade do modelo de Potts 3-estados 2D. Na Fig. 3.5, mostramos o diagrama de fases esquemático para  $q = 3$  obtido na Ref. [25]. Na Fig. 3.6, podemos ver o colapso dos dados para  $m_1$  e  $\chi_1$  na transição **F-N** em  $\Delta = 0.25$ . As curvas para diferentes tamanhos coincidem perfeitamente utilizando os expoentes críticos do modelo de Potts:  $\beta = 1/9$ ,  $\gamma = 13/9$  e  $\nu = 5/6$ .

As linhas no diagrama da Fig. 3.5 foram obtidas analisando-se os picos no calor específico. Por hipótese e analogia com o caso  $q = 2$ , as transições das fases pseudo-ordenadas à fase paramagnética foram tidas como pertencentes à classe de universalidade KT. Porém, sem a apresentação de evidências conclusivas, isso gerou algumas críticas [26], posteriormente removidas devido a este trabalho [37]. Portanto, nosso objetivo é dar suporte a essa suposição com uma análise detalhada das transições, utilizando FSS bem como os novos resultados fornecidos pela helicidade.

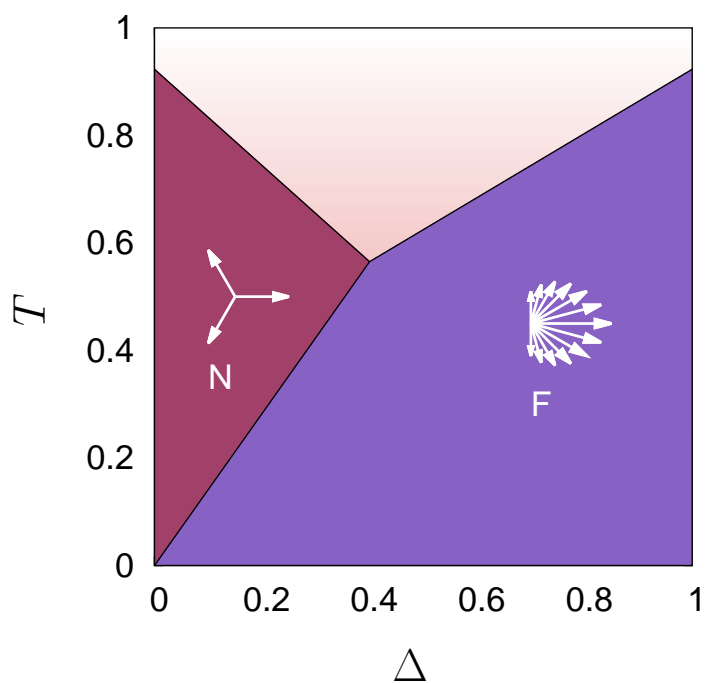


Fig. 3.5: Diagrama de fase esquemático para  $q = 3$  [25]. As linhas são apenas guias para os olhos. O ponto multicrítico ocorre em  $T \simeq 0.4$ . As setas representam as orientações preferenciais dos spins em cada fase.

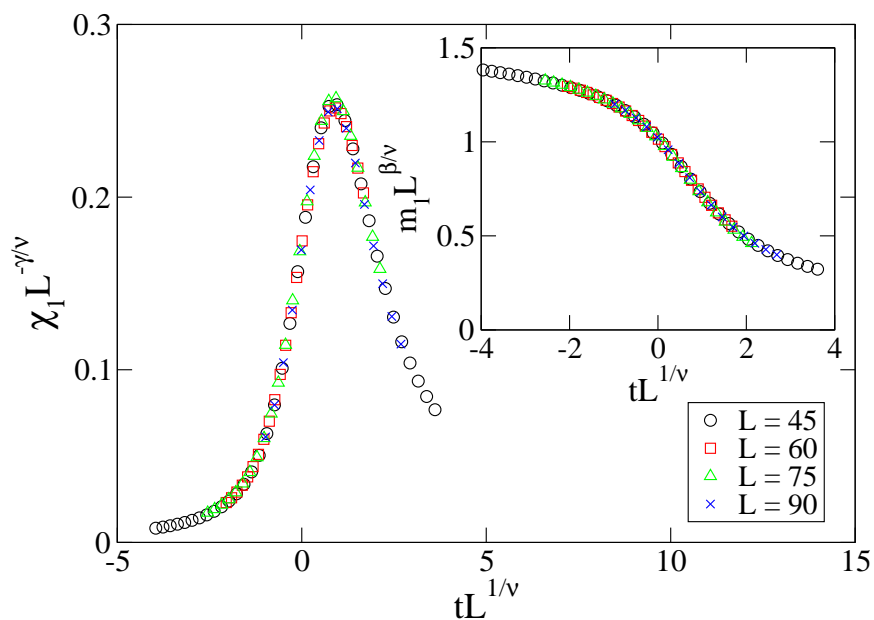


Fig. 3.6: Colapso dos dados para  $\chi_1$  e  $m_1$  (canto superior direito) no modelo XY generalizado: caso  $q = 3$  e  $\Delta = 0.25$ . [25]. Temperatura utilizada no colapso:  $T_c \simeq 0.365$ . Diferentes tamanhos sobrepõem-se na mesma curva quando os expoentes são:  $\beta = 1/9$ ,  $\gamma = 13/9$  e  $\nu = 5/6$ .

## Capítulo 4

# Resultados

Discutiremos neste capítulo os resultados encontrados para a magnetização, susceptibilidade, helicidade e cumulante de quarta ordem de Binder com o objetivo de obter o diagrama de fases detalhado, e com maior precisão, para o caso  $q = 3$ . Os dados foram obtidos através de métodos de Monte Carlo, utilizando o algoritmo de cluster de Wolff [38], e validados através do algoritmo de Metropolis *single-flip* [39], que é menos eficiente neste problema. Os detalhes das simulações e implementações dos algoritmos se encontram no apêndice A.

### 4.1 Magnetização e Susceptibilidade

Nesta seção analisaremos os resultados obtidos para magnetização e susceptibilidade, assim como seus comportamentos na transição com a obtenção dos expoentes críticos via FSS. Começaremos com o caso  $\Delta = 0.25$ , mostrando, na figura 4.1, as magnetizações  $m_1$  e  $m_3$  em função da temperatura. Conforme a temperatura diminui, o sistema passa por duas transições. A primeira, da fase desordenada **P** para nemática **N** em  $T_c \simeq 0.69$ , sinalizada por  $m_3$ , que mede a ordem  $\pi/3$ . A segunda, da nemática para a ferromagnética **F** em  $T_c \simeq 0.365$ , sinalizada por  $m_1$ , que mede a ordem ferromagnética. Vemos que  $m_3$  possui o comportamento típico da magnetização do modelo XY usual, como mostrado na figura 2.2, caindo a zero com o tamanho do sistema para qualquer temperatura finita.

Na figura 4.2, vemos a susceptibilidade correspondente à  $m_3$  para diferentes tamanhos. Conforme aumentamos o tamanho do sistema, a posição do pico tende ao valor assintótico da temperatura crítica no limite termodinâmico e altura do pico na susceptibilidade diverge. Além disso, como acontece na figura 2.3, a susceptibilidade também diverge para todas temperaturas abaixo de  $T_c$ , mas com expoentes não-universais.

Podemos localizar a temperatura crítica medindo, para cada tamanho, o valor da magnetização,  $m_3$ , na temperatura correspondente ao pico de  $\chi_3$ . Esses dados

são mostrados na Fig. 4.3 juntamente com um ajuste do tipo  $\log m_3 = a \log L + b$ . A inclinação nos fornece uma estimativa do valor de  $\beta/\nu$  na transição:  $\beta/\nu = 0.128 \pm 0.006$ . Lembrando que o valor exato é  $1/8 = 0.125$ .

Repetindo o mesmo processo para a susceptibilidade e ajustando com a reta  $\log \chi_3 = a \log L + b$ , como mostrado na figura 4.4, a inclinação da reta nos fornece uma estimativa de  $\gamma/\nu$ :  $1.755 \pm 0.002$ . Quando o valor exato é  $7/4 = 1.75$ .

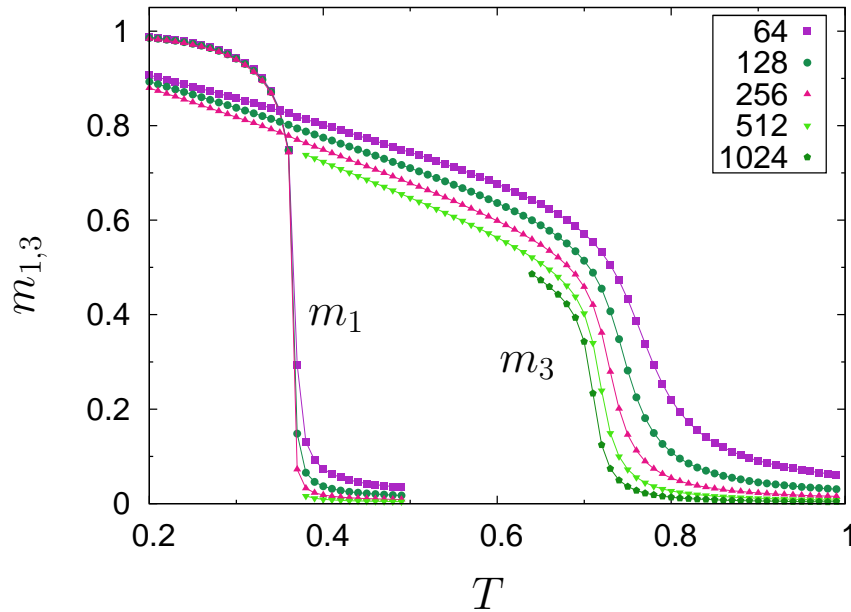


Fig. 4.1: Magnetizações para as ordens ferromagnética e nemática  $\pi/3$  em  $\Delta = 0.25$  para diferentes tamanhos da rede. As curvas  $m_1$  e  $m_3$  mostram as transições **F-N** e **N-P**, respectivamente.

Para  $\Delta = 0.7$ , temos uma única transição, da fase ferromagnética **F** para a paramagnética **P**. Nas figuras 4.5 e 4.6, respectivamente mostramos a magnetização e a susceptibilidade como funções da temperatura para diferentes tamanhos, enquanto os respectivos ajustes são feitos nas figuras 4.7 e 4.8. Procedendo de modo análogo ao caso anterior, encontramos que  $\beta/\nu = 0.131 \pm 0.005$ , enquanto que  $\gamma/\nu = 1.745 \pm 0.001$ .

Na figura 4.9, vemos a temperatura crítica em função do tamanho do sistema para  $\Delta = 0.25$  e  $\Delta = 0.7$ , os dados foram extraídos dos picos das susceptibilidades nas figuras 4.2 e 4.6, respectivamente. Podemos estimar a temperatura crítica assintótica através do ajuste dos dados com a função  $T(L) = aL^b + T_c$ . Dessa maneira, para



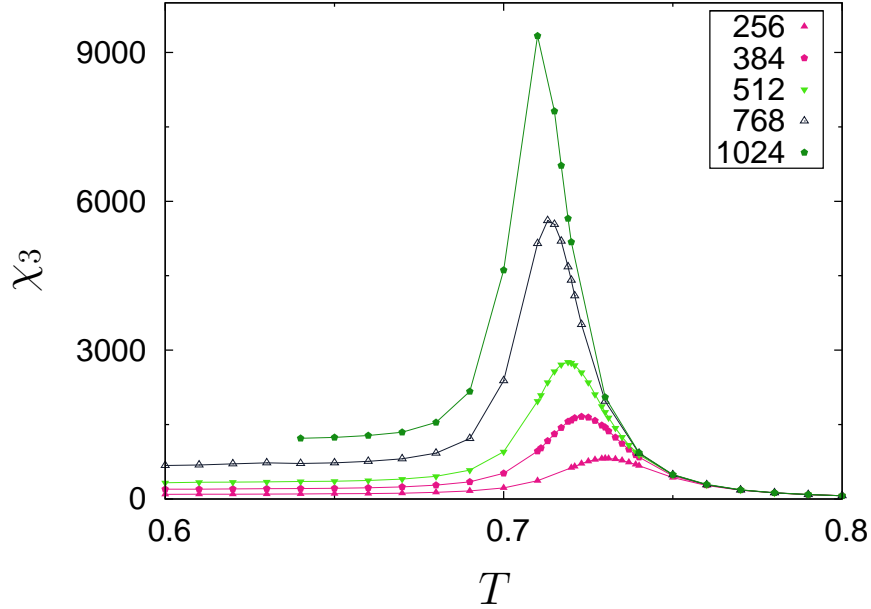


Fig. 4.2: Susceptibilidade magnética correspondente à magnetização  $m_3$  da Fig. 4.1. Para  $T > T_c$ , todas as curvas colapsam. O mesmo não ocorre para  $T < T_c$ , indicando que  $\chi_3$  escala com o tamanho do sistema, mas com expoentes não-universais.

$\Delta = 0.25$  e  $\Delta = 0.7$ , encontramos que  $T_c = 0.692 \pm 0.002$  e  $T_c = 0.756 \pm 0.002$ . Esses resultados serão posteriormente comparados aos resultados da helicidade.

Apesar da pequena margem de erro, os expoentes críticos nas duas transições das fases pseudo-ordenadas com a paramagnética são consistentes com a classe de universalidade KT. Essa disparidade nos expoentes, entre o valor assintótico e o medido, provém de vários fatores. Um deles, recorrente em simulações, é quando utilizamos tamanhos de rede muito pequenos ou muito grandes. No primeiro caso, os efeitos de rede finita se tornam relevantes influenciando no valor das medidas. Já no segundo caso, o sistema demora mais tempo a chegar no estado de equilíbrio, então, o que nos limita a termos boas medidas é o tempo de simulação. Além disso, na obtenção de  $\beta/\nu$ , medimos a magnetização de acordo com o valor do ponto crítico fornecido pelo pico na respectiva susceptibilidade. Se a localização do pico não for muito precisa, isso pode afetar consideravelmente a magnetização medida. Outro problema intrínseco ao modelo é devido ao fato de que há correções logarítmicas ao FSS [40], aqui desconsideradas. Porém, como dispomos de outros mecanismos para verificar a classe de universalidade KT das transições, as pequenas discrepâncias

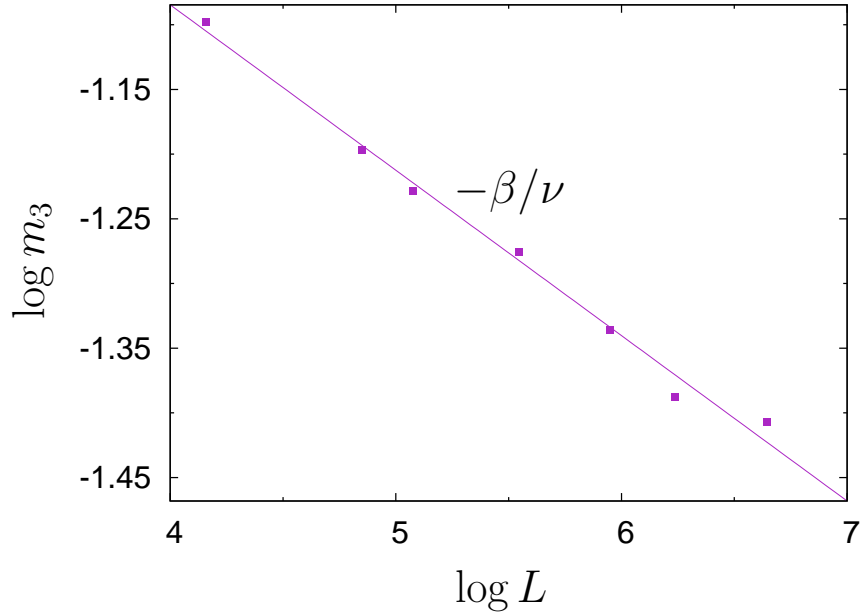


Fig. 4.3: Ajuste da magnetização para  $T_c(L)$  com  $\Delta = 0.25$ . A reta possui inclinação  $-\beta/\nu = -0.128$ .

aqui apresentadas correspondem apenas à dificuldade em obter boas medidas nas simulações.

## 4.2 Helicidade

Para generalizar a expressão (2.21), a helicidade do modelo XY usual, tomamos as derivadas da energia de ligação entre pares de spins de acordo com o Hamiltoniano generalizado Eq. (3.1)

$$U'_{ij} \equiv \frac{\partial U_{ij}}{\partial \phi} = \Delta \sin(\phi) + (1 - \Delta)q \sin(q\phi) \quad (4.1)$$

e

$$U''_{ij} \equiv \frac{\partial^2 U_{ij}}{\partial \phi^2} = \Delta \cos(\phi) + (1 - \Delta)q^2 \cos(q\phi) \quad (4.2)$$

onde  $\phi \equiv \theta_i - \theta_j$ . Utilizando as Eq. (2.19) e Eq. (2.20), identificamos

$$\langle e \rangle = \frac{1}{L^2} \left\langle \sum_{\langle ij \rangle_x} [\Delta \cos(\phi) + q^2(1 - \Delta) \cos(q\phi)] \right\rangle \quad (4.3)$$

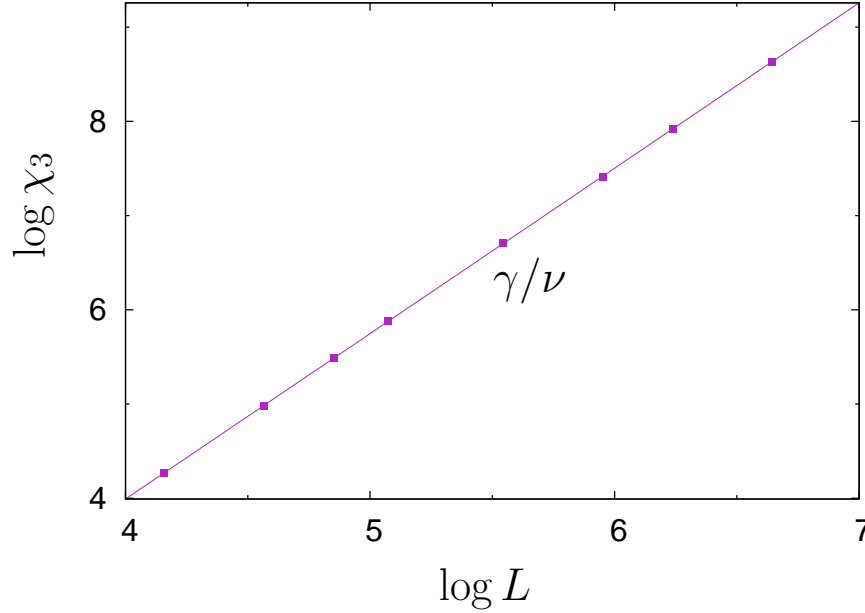


Fig. 4.4: Ajuste da susceptibilidade para  $T_c(L)$  com  $\Delta = 0.25$ . A reta possui inclinação  $\gamma/\nu \simeq 1.755$ .

e

$$\langle s^2 \rangle = \frac{1}{L^2} \left\langle \left( \sum_{\langle ij \rangle_x} [\Delta \sin(\phi) + (1 - \Delta)q \sin(q\phi)] \right)^2 \right\rangle. \quad (4.4)$$

Para estimar a temperatura crítica KT do modelo XY generalizado, incluímos um parâmetro adicional à expressão (2.22) como na Ref [36], assim

$$\lim_{L \rightarrow \infty} \Upsilon(T_{\text{KT}}) = \frac{2T_{\text{KT}}}{\lambda^2 \pi} \quad (4.5)$$

onde o fator  $\lambda$  é chamado de vorticidade dos spins. Na transição **F-P**,  $\lambda = 1$ , enquanto que na transição **N-P**,  $\lambda = 1/q$ . Para  $\Delta = 1$  (modelo XY normal) na transição **F-P**, recuperamos a Eq (2.22) quando  $\lambda = 1$ . Quando  $\Delta = 0$  (modelo puramente nemático) na transição **N-P**, a helicidade nos fornece  $q^2 T_{\text{KT}}$  como temperatura crítica, então normalizamos a Eq (2.22) multiplicando-a por  $q^2$  de modo a recuperar a temperatura crítica KT. Dessa maneira, extrapolamos a Eq (4.5) para a região  $0 < \Delta < 1$ , onde  $\lambda$  depende da fase em que se encontra o sistema. Para o caso  $q = 2$  na Ref [36],  $\lambda = 1/2$  na transição **N-P**, isso está associado à desconexão

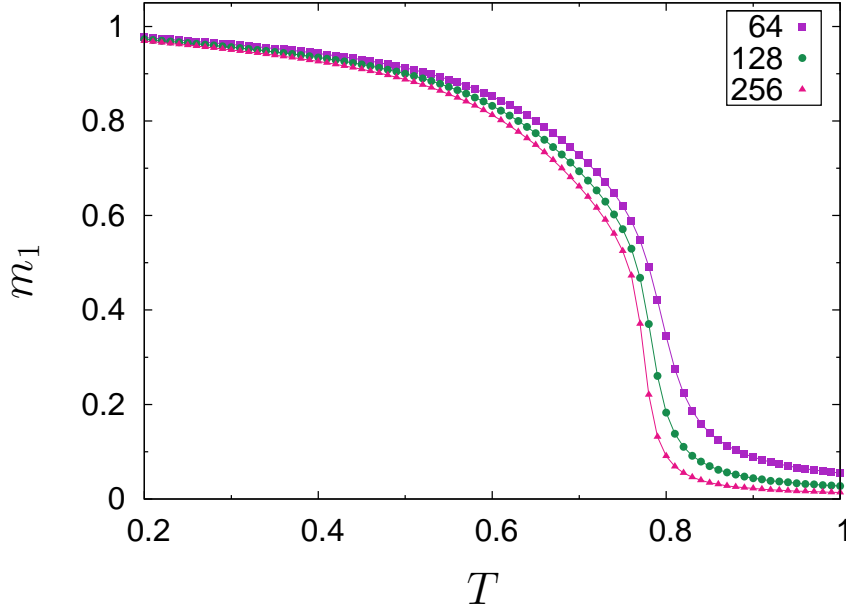


Fig. 4.5: Magnetização para ordem ferromagnética em  $\Delta = 0.7$  para diferentes tamanhos na transição **F-P**.

dos pares semi-vórtices e semi-antivórtices. Assim, na transição **N-P** para  $q = 3$ , supomos que  $\lambda = 1/3$ . A validade da expressão (4.5) pode ser testada com um parâmetro extra de ajuste na função (2.23)

$$\Upsilon(N) = \frac{2TA}{\pi} \left( 1 + \frac{1}{2 \log L + C} \right), \quad (4.6)$$

de modo que  $A$  nos fornece informações sobre a vorticidade do sistema. Quando fazemos o ajuste com a função (4.6) para diferentes temperaturas próximas à transição e utilizando todo o conjunto de tamanhos do sistema, obtemos os parâmetros do ajuste  $A(T)$  e  $C(T)$ . Então, procuramos pela temperatura que minimize o erro quadrático normalizado

$$\varepsilon = \sum_i \left( \frac{\Upsilon(T, L_i) - \Upsilon_{fit}(T, L_i)}{\sigma(T, L_i)} \right)^2 \quad (4.7)$$

onde  $\sigma(T, L_i) = \sqrt{\langle \Upsilon^2 \rangle - \langle \Upsilon \rangle^2}$ . Ou seja, o erro mede o quanto os dados  $\Upsilon(T, L_i)$  se distanciam do valor da helicidade fornecido pelo ajuste  $\Upsilon_{fit}(T, L_i)$ . Uma vez obtida a temperatura que minimize esse erro, simultaneamente encontramos o valor

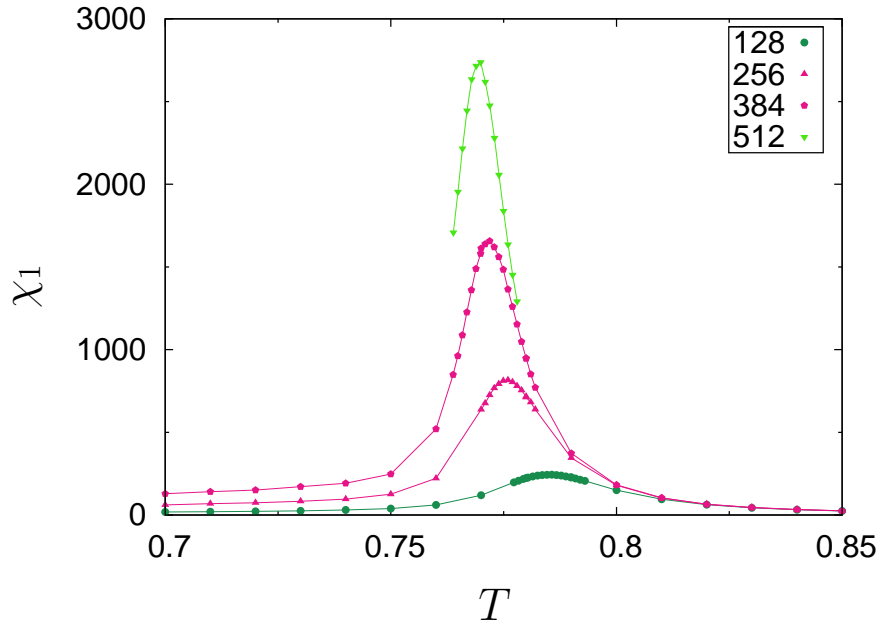


Fig. 4.6: Susceptibilidade magnética correspondente à magnetização  $m_1$  da Fig. 4.5.

da vorticidade devido a sua correlação com a temperatura. Isso se torna evidente ao olharmos para as figuras 4.10 e 4.11, onde temos a vorticidade em função da temperatura para  $\Delta = 0.25$  e  $\Delta = 0.7$ , respectivamente. Também mostramos (no detalhe da figura) a dependência do erro da expressão (4.7) em função da temperatura.

Para  $\Delta = 0.25$ , o menor erro ocorre em  $T = 0.671$ , o que nos fornece  $A \simeq 8.966$ . Para  $\Delta = 0.7$ , o menor erro ocorre em  $T = 0.748$ , o que resulta em  $A \simeq 0.992$ . Portanto, dentro da limitação da precisão dos dados, temos valores para as vorticidades muito próximos aos esperados para as transições **N-P** e **F-P**, ou seja, respectivamente  $1/\lambda^2 = 9$  e  $1/\lambda^2 = 1$ .

Nas figuras 4.12 e 4.13, mostramos a helicidade em função da temperatura para  $\Delta = 0.25$  e  $\Delta = 0.7$ , respectivamente. Também incluímos as retas  $18T/\pi$  e  $2T/\pi$ . Conforme o tamanho do sistema aumenta, o ponto de intersecção da reta com a helicidade se aproxima assintoticamente da temperatura crítica. Podemos comparar, na tabela 4.1, as temperaturas críticas obtidas por meio da helicidade com aquelas obtidas pelos picos na susceptibilidade na figura 4.9. Apesar de uma pequena disparidade, ambas estimativas estão na região de transição. Porém, o método de encontrar  $T_c$  através da susceptibilidade não é muito eficaz se a precisão das medidas não for muito apurada na transição.

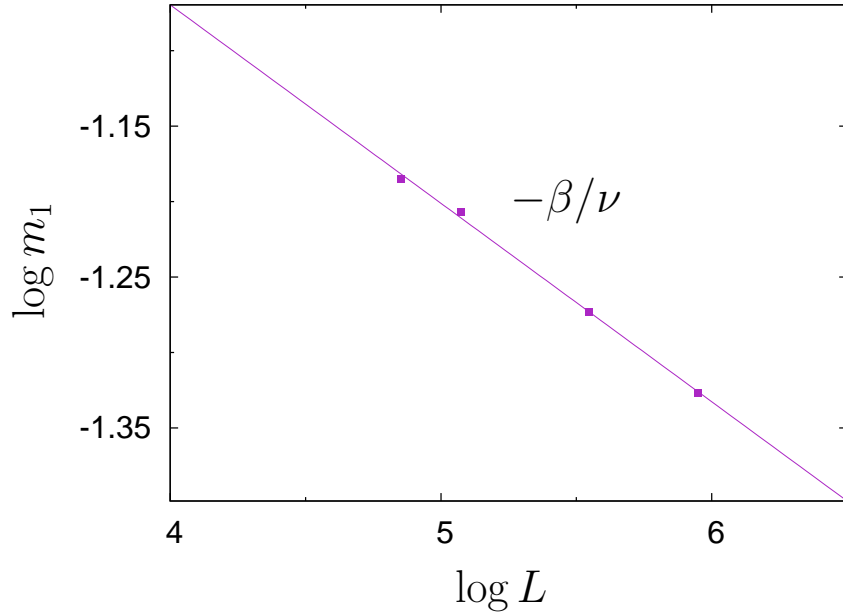


Fig. 4.7: Ajuste da magnetização para  $T_c(L)$  com  $\Delta = 0.7$ . A reta possui inclinação  $-\beta/\nu = -0.131$ .

Na Ref. [41] foi demonstrado que a temperatura crítica é uma função monotônica dos parâmetros de acoplamento dos termos ferromagnético e nemático, e que existe um limite inferior para  $T_c$ , diretamente proporcional ao maior dos termos de acoplamento, ou seja,

$$T_c(\Delta) \geq \begin{cases} \Delta T_{\text{KT}} & \text{se } \Delta \geq 0.5 \\ (1 - \Delta) T_{\text{KT}} & \text{se } \Delta < 0.5 \end{cases} \quad (4.8)$$

onde  $T_{\text{KT}} \simeq 0.893$ . A condição é válida para qualquer valor do parâmetro nemático  $q$ . Então, para  $\Delta = 0.25$  na transição **N-P**, o limite inferior para a temperatura crítica é  $0.75 \times 0.893 \simeq 0.67$ . Se interpolarmos a curva de  $A(T)$  na figura 4.10 de modo que a intersecção com a vorticidade nos forneça uma estimativa de  $T_c$ , obteremos  $T \simeq 0.6705$ . Portanto, temos uma temperatura crítica que está minimamente acima do limite inferior da condição (4.8). Para  $\Delta = 0.7$  na transição **F-P**, o limite inferior é  $0.7 \times 0.893 = 0.625$ , ou seja, a temperatura crítica obtida está bem acima do limite inferior. Isso se deve ao fato do ponto multicrítico não ocorrer em  $\Delta = 0.5$ , e será melhor visualizado na seção 4.4.

Na figura 4.14, vemos a helicidade de quarta ordem para  $\Delta = 0.25$  e  $0.7$ . Pelo fato de ser um observável de quarta ordem e de haver poucas medidas, há uma

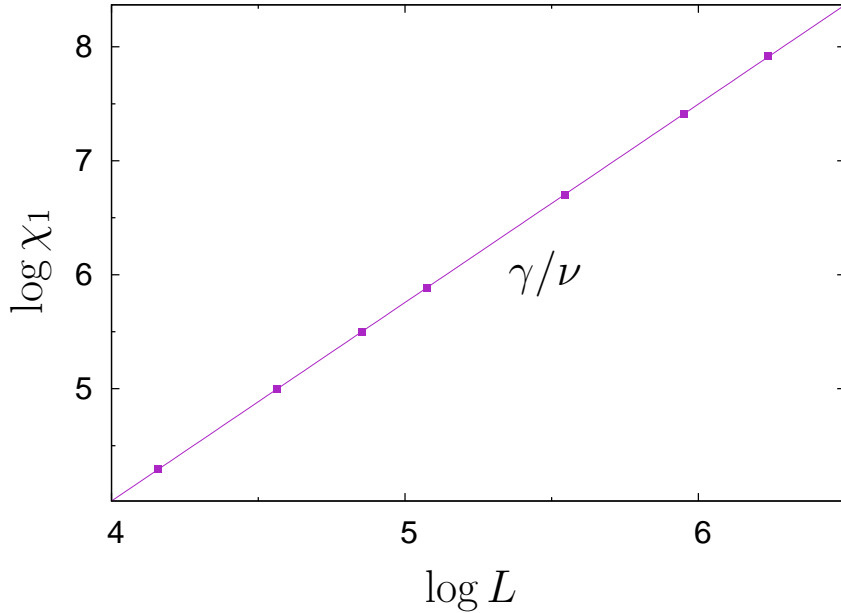


Fig. 4.8: Ajuste da susceptibilidade para  $T_c(L)$  com  $\Delta = 0.25$ . A reta possui inclinação  $\gamma/\nu = 1.745$ .

grande flutuação em  $\langle \Upsilon_4 \rangle$ , e que aumenta com o tamanho do sistema. Então, nos limitamos a mostrar os resultados apenas para  $L = 64$ . Para  $\Delta = 0.25$ , podemos notar um pico negativo no entorno de  $T \simeq 0.75$ . Já para  $\Delta = 0.7$ , o mesmo ocorre em  $T \simeq 0.78$ . As temperaturas onde ocorrem os mínimos em  $\langle \Upsilon_4 \rangle$  estão próximas às temperaturas críticas fornecidas por  $\langle \Upsilon(L = 64) \rangle$  nas figuras 4.12 e 4.13. Acima de  $T_c$ , deveríamos ter  $\langle \Upsilon_4 \rangle = 0$ , como na Ref. [28] e Fig 2.6, porém precisaríamos de mais medidas. Portanto, apenas como um resultado preliminar, verificamos que, de fato, há o salto universal descontínuo em  $\langle \Upsilon \rangle$  nas transições **N-P** e **F-P**. Com melhores medidas de  $\langle \Upsilon_4 \rangle$ , se pode estimar a temperatura crítica assintótica das transições localizando os mínimos em  $\langle \Upsilon_4 \rangle$  e correlacionando seu deslocamento para baixas temperaturas com o tamanho do sistema.

### 4.3 Cumulante de Binder

Como um útil mecanismo na identificação de transições de fase, medimos o cumulante de quarta ordem de Binder [42–45]

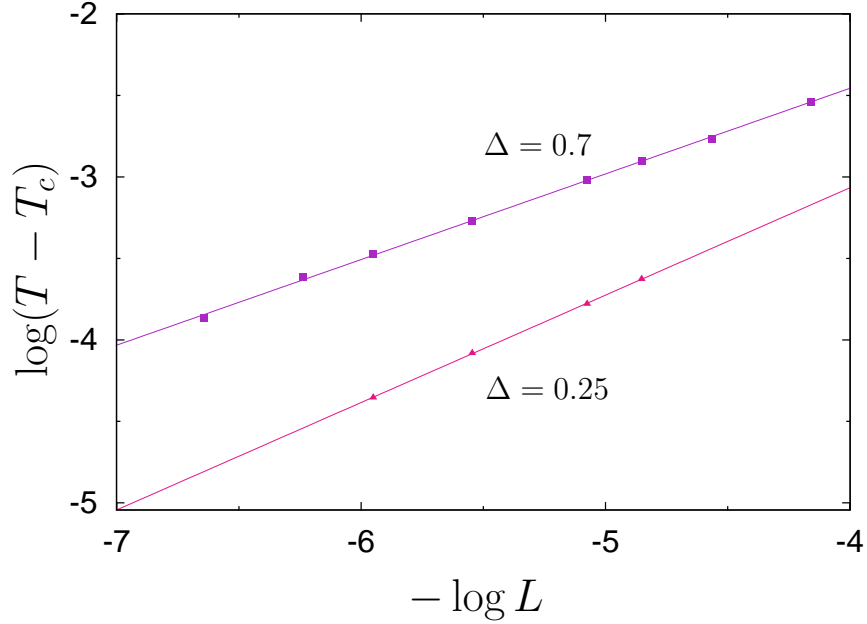


Fig. 4.9: Comportamento assintótico da temperatura crítica em função do tamanho do sistema nas transições **N-P** e **F-P**.  $T_c(\Delta = 0.25) = 0.692 \pm 0.002$  e  $T_c(\Delta = 0.7) = 0.756 \pm 0.002$ .

$$U_k = \frac{\langle m_k^2 \rangle^2}{\langle m_k^4 \rangle}. \quad (4.9)$$

A relevância do cumulante Binder é a sua não dependência com o tamanho do sistema na transição, pois, relembrando a expressão (2.9) para o escalamento da magnetização, notamos que

$$\frac{\langle m^2 \rangle^2}{\langle m^4 \rangle} = \frac{[L^{-2\beta/\nu} f_2(tL^{1/\nu})]^2}{L^{-4\beta/\nu} f_4(tL^{1/\nu})} = f(tL^{1/\nu}) \quad (4.10)$$

onde  $f(tL^{1/\nu})$  é uma nova função de escala que não dependerá do tamanho do sistema exatamente na transição. Utilizando a Eq. (2.5), podemos reescrever  $f(tL^{1/\nu})$  em função do comprimento de correlação com uma nova função de escalonamento  $f_3(L/\xi)$ . Também podemos reescrever o escalamento para a susceptibilidade como  $\chi = L^{2-\eta} g_2(L/\xi)$ , pois  $\gamma/\nu = 2 - \eta$ . Além disso, é possível inverter o escalamento na Eq. (4.10) tal que

$$L/\xi = f_3^{-1}(U_k), \quad (4.11)$$



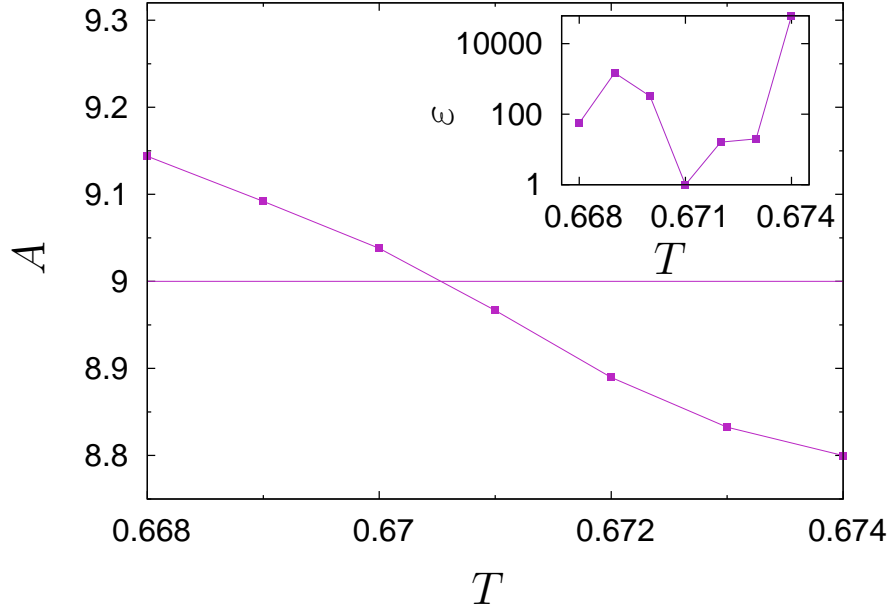


Fig. 4.10: Vorticidade e erro, Eq (4.7), (no detalhe) como funções da temperatura para  $\Delta = 0.25$ . O menor erro ocorre em  $T = 0.671$ , onde  $A \simeq 8.966$ .

assim, chegamos a

$$\chi_k L^{\eta-2} = h(U_k), \quad (4.12)$$

onde  $h$  é uma nova função de escalamento dependente de  $g_2$  e  $p_2^{-1}$ . Então, se graficarmos os dados da susceptibilidade e do cumulante de Binder, escalados de acordo com a Eq. (4.12), estes devem colapsar em uma curva universal. De fato, nas figuras 4.15 e 4.16, respectivamente correspondentes a  $\Delta = 0.25$  e  $\Delta = 0.7$ , observamos que os colapsos são excelentes utilizando, em ambos os casos, o expoente  $\eta = 1/4$ . Portanto, confirmando mais uma vez a universalidade KT das transições entre as fases pseudo-ordenadas com a paramagnética.

## 4.4 Diagrama de fases

Na figura 4.17, mostramos o diagrama de fases reconstruído com os novos resultados. As linhas das transições **F-P** e **N-P** foram obtidas através da helicidade. A linha tracejada mostra a condição, Eq. (4.8), do limite inferior para a transição KT. A transição **F-P** está associada à dissociação de vórtices inteiros, pois encontramos a vorticidade  $\lambda = 1$ . Por outro lado, a transição **N-P** está associada à dissociação de

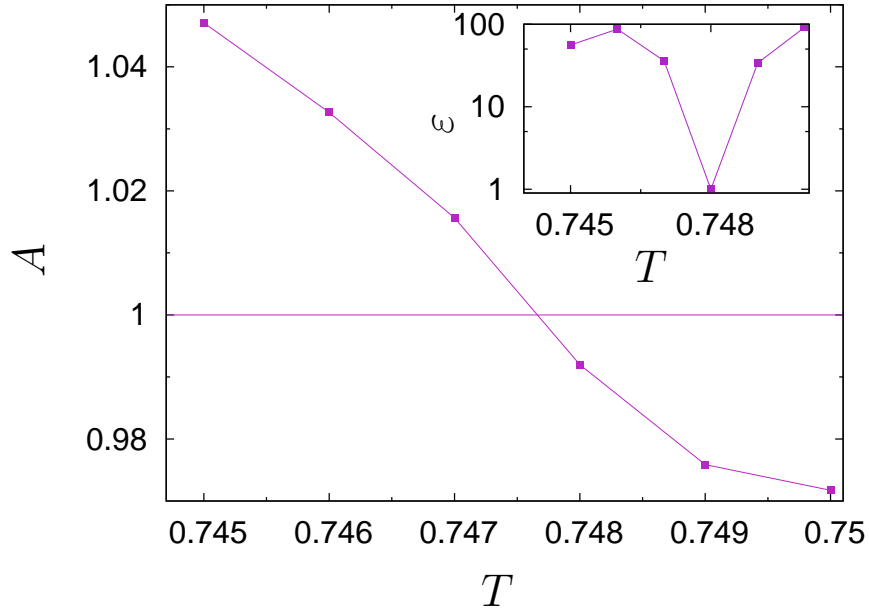


Fig. 4.11: Vorticidade e erro, Eq (4.7), (no detalhe) como funções da temperatura para  $\Delta = 0.7$ . O menor erro ocorre em  $T = 0.748$ , onde  $A \simeq 0.992$ .

vórtices semi-inteiros com vorticidade  $\lambda = 1/3$ . Construimos a linha **N-F** tomando a temperatura crítica dos picos na susceptibilidade  $\chi_1$  (os resultados coincidem com o calor específico) pelo fato da helicidade não nos indicar essa transição.

Nossos resultados mostram, portanto, que o diagrama esquemático, Fig. 3.5, estava essencialmente correto. O ponto multicrítico está próximo ao ponto  $\Delta = 0.4$ , mas nossos resultados não permitem localizá-lo com precisão. Um fato interessante é que a linha de transição **N-P** está bem próxima à linha da condição (4.8), porém o mesmo não acontece na transição **F-P**. Isso se deve ao fato de que o ponto multicrítico ocorre antes de  $\Delta = 0.5$ . Esse resultado também é verificado para  $q = 2$ , no diagrama 3.1. No caso  $q = 8$ , também estudado na Ref. [25], o ponto multicrítico ocorre em  $\Delta \simeq 0.5$ . Assim, percebemos que quanto maior o parâmetro nemático  $q$ , mais as linhas das transições **N-P** e **F-P** se aproximam da condição (4.8). Resultados preliminares de campo médio [46] mostram um diagrama de fases com a mesma estrutura das linhas pontilhadas do diagrama 4.17, apesar da aproximação não capturar corretamente a natureza das transições.

	$\Delta = 0.7$	$\Delta = 0.25$
$T_{min}$	0.625	0.67
$\langle \Upsilon \rangle$	0.748	0.671
$\chi_{1,3}$	0.756	0.692

Tab. 4.1: Comparação entre as temperaturas críticas fornecidas pela condição 4.8, helicidade e susceptibilidade.

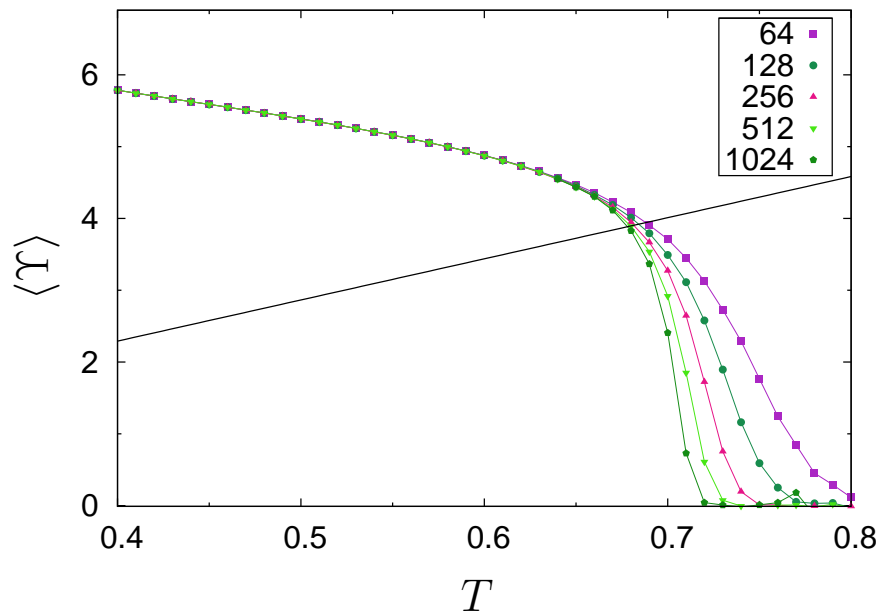


Fig. 4.12: Helicidade em função da temperatura para diferentes tamanhos com  $\Delta = 0.25$ . A linha contínua é  $18T/\pi$ .

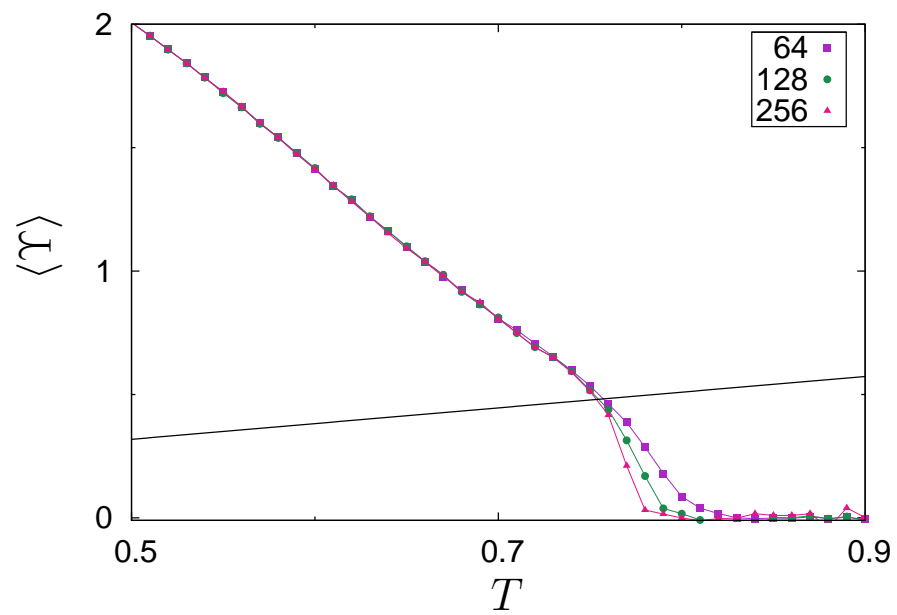


Fig. 4.13: Helicidade em função da temperatura para diferentes tamanhos com  $\Delta = 0.7$ . A linha contínua é  $2T/\pi$ .

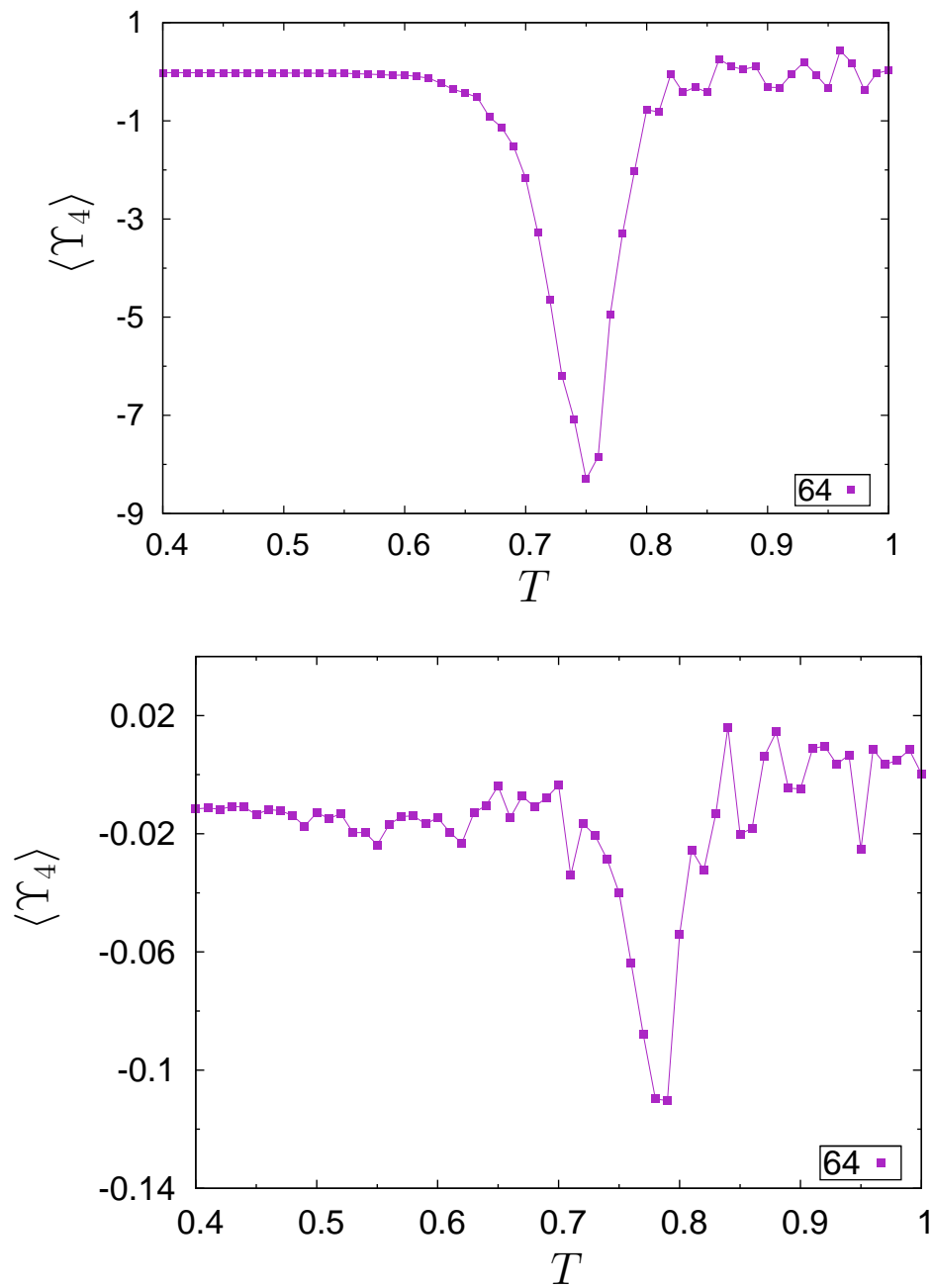


Fig. 4.14: Helicidade de quarta ordem em função da temperatura para  $\Delta = 0.25$  (acima) e  $0.7$  (abaixo), com  $L = 64$ .

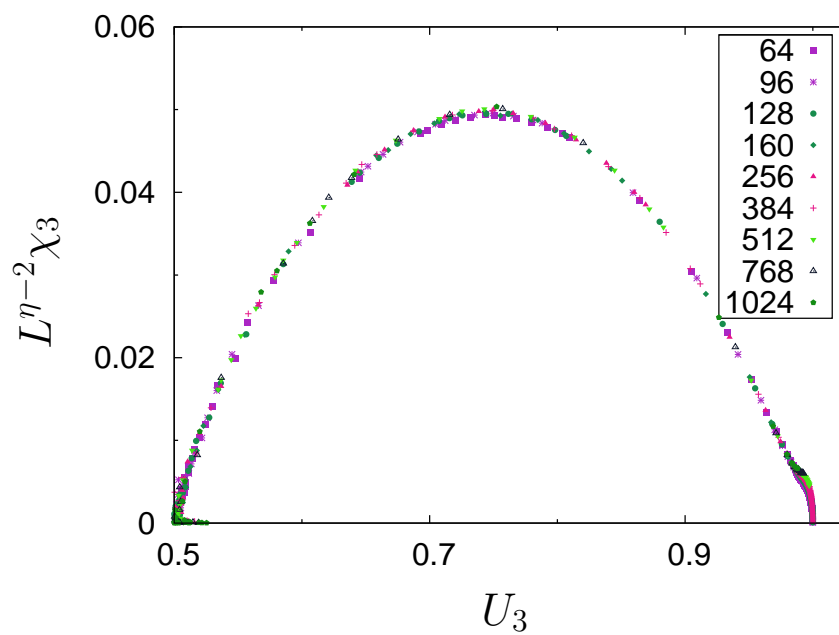


Fig. 4.15: Susceptibilidade em função do cumulante de quarta ordem de Binder para  $\Delta = 0.25$  na transição **N-P**. Dados para diferentes tamanhos colapsam sobre a mesma curva utilizando o expoente  $\eta = 1/4$ .

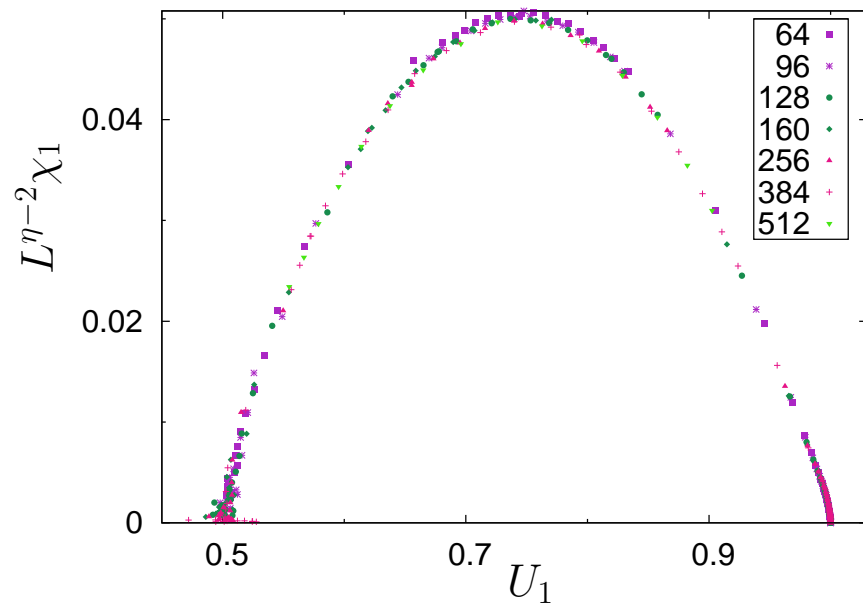


Fig. 4.16: Susceptibilidade em função do cumulante de quarta ordem de Binder para  $\Delta = 0.7$  na transição **F-P**. Dados para diferentes tamanhos colapsam sobre a mesma curva utilizando o expoente  $\eta = 1/4$ .

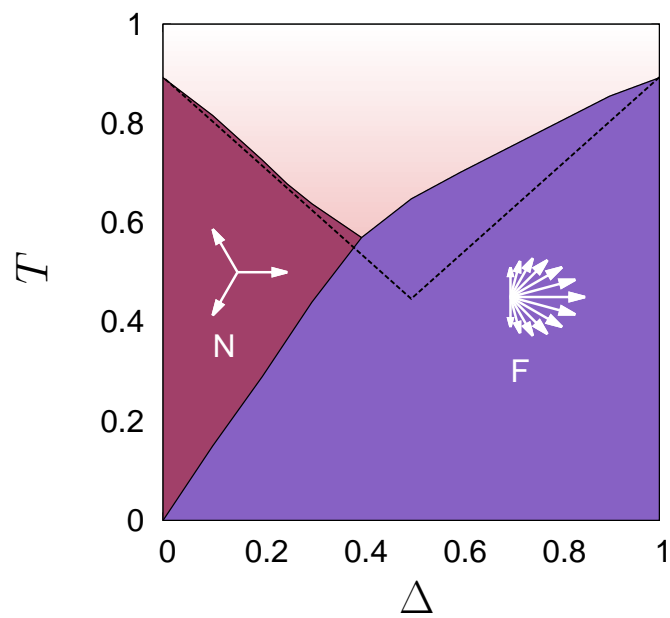


Fig. 4.17: Diagrama de fase obtido com os novos resultados. O ponto multicrítico ocorre em  $\Delta \simeq 0.4$ . Linha pontilhada fornece o limite inferior para  $T_c$ , Eq. (4.8).



## Capítulo 5

# Conclusões

Neste trabalho abordamos uma generalização do modelo XY que inclui interações nemáticas entre os spins. Em particular, o caso em que o Hamiltoniano (3.1) possui  $q = 3$ . Resultados anteriores haviam sido obtidos por Poderoso *et al* [25], deixando incerta, porém, a classe de universalidade das transições entre as fases com pseudo-ordem e a desordenada. Então, coube a esse trabalho clarificar estas questões com resultados muito mais precisos e tamanhos de rede bem maiores que os até então utilizados.

Nos resultados, Cap. 4, recuperamos, dentro de uma pequena margem de erro, os expoentes críticos  $\beta/\nu$  e  $\gamma/\nu$  do modelo XY para ambas as transições, **F-P** em  $\Delta = 0.25$  e **N-P** em  $\Delta = 0.7$ , aplicando escalonamento de tamanhos finitos nos dados para magnetização e susceptibilidade. Também obtivemos um ótimo colapso dos dados para a susceptibilidade em função do cumulante de quarta ordem de Binder nas transições utilizando o expoente crítico  $\eta = 1/4$ . Por meio do cálculo da helicidade, juntamente com o ajuste da função (4.6) e a minimização do erro da expressão (4.7), além de identificar as vorticidades do sistema nas fases **F** e **N**, encontramos as temperaturas críticas das transições com a fase paramagnética. Apesar da fraca estatística, verificamos com a helicidade de quarta ordem o salto universal descontínuo na helicidade. Também mostramos um novo diagrama de fases mais detalhado obtido através da helicidade.

Tomados em conjunto, estes resultados constituem sólidas evidências quanto à classe de universalidade Kosterlitz-Thouless das transições entre as fases pseudo-ordenadas com a paramagnética. Colocando em xeque, portanto, argumentos contrários à existência de tais transições [26].

Poderoso *et al* [25] também estudaram outros casos do parâmetro nemático. No caso  $q = 4$ , o diagrama de fases possui topologia análoga ao diagrama da Fig. 3.5 do caso  $q = 3$ , exceto que a transição entre as fases ferromagnética e nemática pertence à classe de universalidade Ising 2D. Porém, para  $q \geq 5$ , a topologia do diagrama é drasticamente alterada. Além das fases nemática e ferromagnética existentes,

duas novas fases com pseudo-ordenamento ferromagnético aparecem. Para o caso  $q = 8$ , estudado em detalhe na Ref. [25], foi mostrado que as transições entre essas novas fases ferromagnéticas com a fase ferromagnética usual pertencem à classe de universalidade KT. Entretanto, críticas surgiram pelo fato de haver duas transições do tipo KT no interior de fases com pseudo-ordenamento ferromagnético [26]. Então, tendo em mãos úteis ferramentas como a helicidade e a helicidade de quarta ordem, seria interessante, como um trabalho posterior, elucidarmos essas questões quanto à classe de universalidade das transições. Também descobrir os defeitos topológicos que mediarão essas transições pelo estudo da vorticidade.

Outro projeto de nosso interesse é expandir os resultados para o caso tridimensional, não só para  $q = 3$  como para outros valores, obtendo os diagramas de fases, expoentes críticos e a ordem das transições. Além disso, podemos utilizar os já obtidos resultados de campo médio como uma primeira aproximação e compararmos aos resultados das simulações [46]. Resultados preliminares para os casos  $q = 8$  bidimensional e  $q = 3$  tridimensional foram obtidos em simultaneidade a este trabalho e certamente serão alvo de estudo em trabalhos futuros.

## Apêndice A

# Simulação

Nas simulações, os spins foram dispostos nos sítios de uma rede quadrada com condições periódicas de contorno. Cada passo de Monte Carlo corresponde a uma tentativa de construção de um cluster de spins no algoritmo de Wolff [38]. Todas medidas foram tomadas após o sistema chegar ao estado de equilíbrio assintótico. Como condição inicial, começamos com um estado correspondendo a  $T \rightarrow \infty$  onde os spins são orientados aleatoriamente, também utilizamos o estado  $T = 0$  onde os spins são todos paralelos. As médias foram feitas tomando várias medidas para cada condição inicial, tanto resfriando como aquecendo o sistema. Além disso, esperamos tempo suficiente entre cada medida para que o sistema se descorrelacionasse, de modo que podemos dizer que as medidas são praticamente independentes. A seguir descreveremos os algoritmos de *Single-Flip* e de Wolff.

### A.1 Algoritmo *Single-flip*

No algoritmo de *Metropolis* [39], um sítio  $i$  é aleatoriamente escolhido e seu spin,  $\mathbf{s}_i$ , é trocado por um novo valor, também aleatório. A energia desta nova configuração,  $E_\nu$ , é comparada com a energia da configuração original,  $E_\mu$  (na prática, só contribuem os termos associados às interações entre os primeiros vizinhos do sítio  $i$ ). Assim, a diferença de energia entre as duas configurações é

$$\Delta E = E_\nu - E_\mu. \quad (\text{A.1})$$

Quando  $\Delta E < 0$ , a energia da nova configuração é menor que a anterior, portanto, será aceita, pois minimiza a energia do sistema. Quando  $\Delta E > 0$ , existe a possibilidade de aceitá-la com probabilidade

$$P = e^{-\beta\Delta E}. \quad (\text{A.2})$$

Percebemos que a probabilidade será tanto menor quanto maior for a diferença de energia entre as configurações. Um passo de Monte Carlo, nesse caso, corresponde

a  $N$  tentativas aleatórias de atualização dos spins da rede.

## A.2 Algoritmo de Wolff

No algoritmo de Wolff [38], começamos escolhendo aleatoriamente um sítio semente da rede com spin  $\mathbf{s}_i$ , que será o primeiro na construção do cluster. Em seguida, geramos um vetor  $\mathbf{r}$  aleatório. Como em nosso caso os spins são unitários, basta escolher um ângulo randômico  $\alpha$  para que  $\mathbf{r}$  fique definido. Então, fazemos uma reflexão de  $\mathbf{s}_i$  em torno de  $\mathbf{r}$  de acordo com

$$\mathbf{R}(\mathbf{r})\mathbf{s}_i = \mathbf{s}_i - 2(\mathbf{s}_i \cdot \mathbf{r})\mathbf{r} = \mathbf{s}'_i \quad (\text{A.3})$$

onde  $\mathbf{R}(\mathbf{r})$  é o operador reflexão. Do ponto de vista angular, isso corresponde a uma rotação no ângulo do spin  $\mathbf{s}_i$  tal que

$$\theta'_i = \pi + 2\alpha - \theta_i, \quad (\text{A.4})$$

tendo em vista que o novo ângulo gerado deve estar no intervalo  $[0, 2\pi)$ . Então, após a reflexão de  $\mathbf{s}_i$ , já deixando  $\mathbf{s}'_i = \mathbf{s}_i$ , escolhemos um de seus primeiros vizinhos  $\mathbf{s}_j$  e o adicionamos ao cluster com probabilidade dada por

$$P = 1 - \exp\{\min\{0, \beta[\mathbf{s}_i \cdot (1 - \mathbf{R})\mathbf{s}_j]\}\}, \quad (\text{A.5})$$

ou seja,

$$P = 1 - \exp\{\min\{0, \beta[\mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j - \mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}'_j]\}\} \quad (\text{A.6})$$

onde o *min* significa que estamos tomando sempre o valor negativo entre colchetes ou zero quando ele for positivo. Olhando para a probabilidade vemos que

$$h = -\mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j \text{ e } h' = -\mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}'_j, \quad (\text{A.7})$$

sendo  $h$  e  $h'$  as energias das ligações  $\langle ij \rangle$  para o modelo XY normal. Assim,

$$P = 1 - \exp\{\min\{0, \beta[h' - h]\}\}. \quad (\text{A.8})$$

Portanto, percebemos que a probabilidade será tanto maior quanto mais energeticamente favorável for flipar  $\mathbf{s}_j$  em torno de  $\mathbf{r}$ . Este processo se repete para todos os vizinhos de  $\mathbf{s}_i$  e segue recursivamente até não haver mais sítios a adicionar. Para o Hamiltoniano do modelo XY generalizado, Eq (3.1), basta trocar a energia de ligação  $h$  por

$$h = -\Delta \cos(\theta_i - \theta_j) - (1 - \Delta) \cos(q\theta_i - q\theta_j) \quad (\text{A.9})$$

e

$$h' = -\Delta \cos(\theta_i - \theta'_j) - (1 - \Delta) \cos(q\theta_i - q\theta'_j) \quad (\text{A.10})$$

onde  $\theta_j$  e  $\theta'_j$  são os ângulos dos spins  $\mathbf{s}_j$  e  $\mathbf{s}'_j$ , respectivamente.

## Apêndice B

# Derivação da helicidade

Para derivar a Eq. (2.17), partimos da energia livre do sistema perturbado pela torção  $\delta_x$  na direção  $\hat{x}$

$$F(\delta_x, \beta) = -\frac{1}{\beta} \ln Z(\delta_x, \beta) \quad (\text{B.1})$$

onde  $Z(\delta_x, \beta)$  é a função de partição. Assim

$$Z = \text{tr} e^{-\beta\mathcal{H}} = \prod_k \int \frac{d\theta_k}{2\pi} e^{-\beta \sum_{\langle ij \rangle} U_{ij}(\theta_i - \theta_j - \mathbf{r}_{ij} \cdot \hat{x} \delta_x / L)}, \quad (\text{B.2})$$

onde o traço é sobre  $\theta_k$  e  $U_{ij}(\theta_i - \theta_j - \mathbf{r}_{ij} \cdot \hat{x} \delta_x / L)$  é o potencial de interação entre dois spins acrescido da torção. Derivando a energia livre em relação a  $\delta_x$

$$\frac{\partial F}{\partial \delta_x} = -\frac{1}{\beta Z} \frac{\partial Z}{\partial \delta_x} = 0, \quad (\text{B.3})$$

pois assumimos que, devido à simetria do sistema, termos ímpares são nulos. Disso decorre que  $\partial Z / \partial \delta_x = 0$ . Derivando outra vez

$$-\beta \frac{\partial^2 F}{\partial \delta_x^2} = -\left( \frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \delta_x} \right)^2 + \frac{1}{Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial \delta_x^2} = \frac{1}{Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial \delta_x^2}. \quad (\text{B.4})$$

Derivando a função de partição

$$\frac{\partial Z}{\partial \delta_x} = \prod_k \int \frac{d\theta_k}{2\pi} \left\{ -\beta \sum_{\langle ij \rangle_x} \frac{\partial U_{ij}}{\partial \delta_x} e^{-\beta \sum_{\langle ij \rangle} U_{ij}} \right\}, \quad (\text{B.5})$$

e outra vez

$$\frac{\partial^2 Z}{\partial \delta_x^2} = \prod_k \int \frac{d\theta_k}{2\pi} \left\{ -\beta \left( \sum_{\langle ij \rangle_x} \frac{\partial^2 U_{ij}}{\partial \delta_x^2} - \beta \left( \sum_{\langle ij \rangle_x} \frac{\partial U_{ij}}{\partial \delta_x} \right)^2 \right) e^{-\beta \sum_{\langle ij \rangle} U_{ij}} \right\}. \quad (\text{B.6})$$

onde  $\langle ij \rangle_x$  significa que a soma é feita somente entre vizinhos na direção  $\hat{x}$ . Notando que

$$\left. \frac{\partial U}{\partial \delta_x} \right|_{\delta_x=0} = -\frac{1}{L} \frac{\partial U(\phi)}{\partial \phi} \quad \text{e} \quad \left. \frac{\partial^2 U}{\partial \delta_x^2} \right|_{\delta_x=0} = \frac{1}{L^2} \frac{\partial^2 U(\phi)}{\partial \phi^2}, \quad (\text{B.7})$$

assim, cancelando  $-\beta$  em ambos os lados, temos

$$\left. \frac{\partial^2 F}{\partial \delta_x^2} \right|_{\delta_x=0} = \frac{1}{Z} \prod_k \int \frac{d\theta_k}{2\pi} \left\{ \left( \frac{1}{L^2} \sum_{\langle ij \rangle_x} \frac{\partial^2 U_{ij}}{\partial \phi^2} - \beta \left( \frac{1}{L} \sum_{\langle ij \rangle_x} \frac{\partial U_{ij}}{\partial \phi} \right)^2 \right) e^{-\beta \sum_{\langle ij \rangle_x} U_{ij}} \right\},$$

e, portanto

$$\langle \Upsilon \rangle = \frac{1}{L^2} \left\langle \sum_{\langle ij \rangle_x} \frac{\partial^2 U_{ij}}{\partial \phi^2} \right\rangle - \frac{\beta}{L} \left\langle \left( \sum_{\langle ij \rangle_x} \frac{\partial U_{ij}}{\partial \phi} \right)^2 \right\rangle. \quad (\text{B.8})$$

Para chegarmos à expressão (2.18), para helicidade de quarta ordem, começamos derivando a Eq. (B.4)

$$-\beta \frac{\partial^3 F}{\partial \delta_x^3} = \frac{2}{Z^3} \left( \frac{\partial Z}{\partial \delta_x} \right)^3 - \frac{3}{Z^2} \frac{\partial Z}{\partial \delta_x} \frac{\partial^2 Z}{\partial \delta_x^2} + \frac{1}{Z} \frac{\partial^3 Z}{\partial \delta_x^3}, \quad (\text{B.9})$$

e outra vez

$$-\beta \frac{\partial^4 F}{\partial \delta_x^4} = -\frac{6}{Z^4} \left( \frac{\partial Z}{\partial \delta_x} \right)^4 + \frac{12}{Z^3} \left( \frac{\partial Z}{\partial \delta_x} \right)^2 \frac{\partial^2 Z}{\partial \delta_x^2} - \frac{3}{Z^2} \left( \frac{\partial^2 Z}{\partial \delta_x^2} \right)^2 \quad (\text{B.10})$$

$$- \frac{4}{Z^2} \frac{\partial Z}{\partial \delta_x} \frac{\partial^3 Z}{\partial \delta_x^3} + \frac{1}{Z} \frac{\partial^4 Z}{\partial \delta_x^4}. \quad (\text{B.11})$$

Eliminando todos os termos proporcionais a  $\partial Z / \partial \delta_x$  nos sobra

$$-\beta \frac{\partial^4 F}{\partial \delta_x^4} = -\frac{3}{Z^2} \left( \frac{\partial^2 Z}{\partial \delta_x^2} \right)^2 + \frac{1}{Z} \frac{\partial^4 Z}{\partial \delta_x^4}, \quad (\text{B.12})$$

onde o primeiro termo após à igualdade identificamos como  $-3\beta^2 \langle \Upsilon \rangle^2$ . Por economia de notação é conveniente fazermos a seguinte definição para calcular  $\partial^4 Z / \partial \delta_x^4$ , assim

$$v \equiv \sum_{\langle ij \rangle_x} U_{ij}. \quad (\text{B.13})$$

Derivando a Eq. (B.6), temos

$$\frac{\partial^3 Z}{\partial \delta_x^3} = \prod_k \int \frac{d\theta_k}{2\pi} \left\{ -\beta [v''' - 3\beta v'' v' + \beta^2 (v')^3] e^{-\beta \sum_{\langle ij \rangle_x} U_{ij}} \right\}, \quad (\text{B.14})$$

novamente

$$\frac{\partial^4 Z}{\partial \delta_x^4} = \prod_k \int \frac{d\theta_k}{2\pi} \left\{ -\beta \left[ v^{(4)} - 4\beta v''' v' - 3\beta \left( (v'')^2 - 2\beta v'' (v')^2 \right) - \beta^3 (v')^4 \right] e^{-\beta \sum_{\langle ij \rangle} U_{ij}} \right\}. \quad (\text{B.15})$$

onde as aspas significam a derivada em relação a  $\delta_x$ . Completando o quadrado dos termos entre parenteses obtemos

$$\frac{\partial^4 Z}{\partial \delta_x^4} = \prod_k \int \frac{d\theta_k}{2\pi} \left\{ -\beta \left[ v^{(4)} - 4\beta v''' v' - 3\beta \left( v'' - \beta (v')^2 \right)^2 + 2\beta^3 (v')^4 \right] e^{-\beta \sum_{\langle ij \rangle} U_{ij}} \right\} \quad (\text{B.16})$$

onde percebemos que o termo ao quadrado entre parenteses é a helicidade  $\Upsilon$ . De maneira análoga à anterior

$$\left. \frac{\partial^3 U}{\partial \delta_x^3} \right|_{\delta_x=0} = -\frac{1}{L^3} \frac{\partial^3 U}{\partial \phi^3} \quad \text{e} \quad \left. \frac{\partial^4 U}{\partial \delta_x^4} \right|_{\delta_x=0} = \frac{1}{L^4} \frac{\partial^4 U}{\partial \phi^4} \quad (\text{B.17})$$

onde pode ser reduzido a

$$v''' = \frac{1}{L^3} \sum_{\langle ij \rangle_x} \frac{\partial^3 U}{\partial \phi^3} = \frac{1}{L} \frac{\partial^2 s}{\partial \phi^2} \quad \text{e} \quad v^{(4)} = \frac{1}{L^4} \sum_{\langle ij \rangle_x} \frac{\partial^4 U}{\partial \phi^4} = \frac{1}{L^2} \frac{\partial^2 e}{\partial \phi^2}. \quad (\text{B.18})$$

Então, juntando os termos das Eq. (B.12) e Eq. (B.16), obtemos

$$\langle \Upsilon_4 \rangle = \frac{1}{L^2} \left\langle \frac{\partial^2 e}{\partial \phi^2} \right\rangle - \frac{4\beta}{L} \left\langle \frac{\partial^2 s}{\partial \phi^2} s \right\rangle - 3\beta \left( \langle \Upsilon^2 \rangle - \langle \Upsilon \rangle^2 \right) + 2\beta^3 L^4 \langle s^4 \rangle \quad (\text{B.19})$$

Na Eq. (2.14), dissemos que os termos ímpares são nulos devido ao fato do sistema ser isotrópico. Podemos identificar a primeira derivada da energia livre como

$$\left( \frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \delta_x} \right)^2 \propto \langle s \rangle^2 \quad (\text{B.20})$$

onde

$$\langle s \rangle = \frac{\Delta}{L^2} \left\langle \sum_{\langle ij \rangle_x} [\sin(\theta_i - \theta_j) + q(1 - \Delta) \sin(q\theta_i - q\theta_j)] \right\rangle, \quad (\text{B.21})$$

e está relacionado ao fluxo de correlação. Verificamos nas simulações que, de fato,  $\langle s \rangle \simeq 0$ .

Para obtermos as Eq. (2.21) e Eq. (2.18), para o modelo XY normal, basta colocarmos  $\Delta = 1$  nas Eq. (4.3) e Eq. (4.4), assim

$$e = \frac{1}{L^2} \sum_{\langle ij \rangle_x} \cos(\theta_i - \theta_j) \quad e \quad s = \frac{1}{L^2} \sum_{\langle ij \rangle_x} \sin(\theta_i - \theta_j). \quad (\text{B.22})$$

Utilizando a Eq. (2.17), temos

$$\langle \Upsilon \rangle = \frac{1}{L^2} \left\langle \sum_{\langle ij \rangle_x} \cos(\theta_i - \theta_j) \right\rangle - \frac{\beta}{L^2} \left\langle \left( \sum_{\langle ij \rangle_x} \sin(\theta_i - \theta_j) \right)^2 \right\rangle, \quad (\text{B.23})$$

que pode ser reescrita como

$$\langle \Upsilon \rangle = -\frac{1}{2} \langle u \rangle - \frac{\beta}{L^2} \left\langle \left( \sum_{\langle ij \rangle_x} \sin(\theta_i - \theta_j) \right)^2 \right\rangle, \quad (\text{B.24})$$

pois, de acordo com o Hamiltoniano (2.1),  $\langle e \rangle = -\langle u \rangle/2$ , sendo o fator 1/2 devido à soma apenas em uma direção. Para encontrarmos  $\langle \Upsilon_4 \rangle$ , notamos que

$$e'' = -e \quad e \quad s'' = -s \quad (\text{B.25})$$

a partir do que

$$\langle \Upsilon_4 \rangle = -\frac{1}{L^2} \langle e \rangle + 4\beta \langle s^2 \rangle - 3\beta [\langle \Upsilon^2 \rangle - \langle \Upsilon \rangle^2] + 2\beta^3 L^4 \langle s^4 \rangle, \quad (\text{B.26})$$

que pode ser reescrita como

$$\langle L^2 \Upsilon_4 \rangle = -4\langle \Upsilon \rangle + 3 \left[ \langle e \rangle - \frac{L^2}{T} (\langle \Upsilon^2 \rangle - \langle \Upsilon \rangle^2) \right] + 2 \frac{L^6}{T^3} \langle s^4 \rangle \quad (\text{B.27})$$

onde recuperamos, portanto, a expressão obtida por Minnhagen e Kim [28].



# Referências Bibliográficas

- [1] MERMIN, N. D.; WAGNER, H. Absence of ferromagnetism or antiferromagnetism in one- or two-dimensional isotropic Heisenberg models. *Phys. Rev. Lett.*, v. 17, p. 1133–1136, Nov 1966.
- [2] 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.
- [3] KOSTERLITZ, J. M. The critical properties of the two-dimensional XY model. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, v. 7, n. 6, p. 1046, 1974.
- [4] LI, Y.-H.; TEITEL, S. Finite-size scaling study of the three-dimensional classical XY model. *Phys. Rev. B*, v. 40, p. 9122–9125, Nov 1989.
- [5] KENNA, R. The XY Model and the Berezinskii-Kosterlitz-Thouless Phase Transition. *eprint arXiv:cond-mat/0512356*, dez. 2005.
- [6] BISHOP, D. J.; REPPY, J. D. Study of the superfluid transition in two-dimensional  $^4\text{He}$  films. *Phys. Rev. Lett.*, v. 40, p. 1727–1730, Jun 1978.
- [7] FREEMAN, M. R.; RICHARDSON, R. C. Size effects in superfluid  $^3\text{He}$  films. *Phys. Rev. B*, v. 41, p. 11011–11028, Jun 1990.
- [8] ANDERSON, P. W.; ROWELL, J. M. Probable observation of the Josephson superconducting tunneling effect. *Phys. Rev. Lett.*, v. 10, p. 230–232, Mar 1963.
- [9] RESNICK, D. J. et al. Kosterlitz-Thouless transition in proximity-coupled superconducting arrays. *Phys. Rev. Lett.*, v. 47, p. 1542–1545, Nov 1981.
- [10] TEITEL, S.; JAYAPRAKASH, C. Phase transitions in frustrated two-dimensional XY models. *Phys. Rev. B*, v. 27, p. 598–601, Jan 1983.
- [11] CAPRIOTTI, L. et al. Phase transitions induced by easy-plane anisotropy in the classical heisenberg antiferromagnet on a triangular lattice: A monte carlo simulation. *Phys. Rev. B*, v. 58, p. 273–281, Jul 1998.

- 
- [12] WEIGEL, M.; JANKE, W. The square-lattice F model revisited: a loop-cluster update scaling study. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, v. 38, n. 32, p. 7067, 2005.
- [13] ROMANO, S. Computer simulation evidence for Berezinskii–Kosterlitz–Thouless-like transitions in one dimension. *International Journal of Modern Physics B*, v. 11, n. 17, p. 2043–2056, 1997.
- [14] ROMANO, S. Computer simulation evidence for a Berezinskii–Kosterlitz–Thouless-like transition in a two-dimensional lattice-gas model. *International Journal of Modern Physics B*, v. 13, n. 02, p. 191–205, 1999.
- [15] WYSIN, G. M. et al. Extinction of the Berezinskii-Kosterlitz-Thouless phase transition by nonmagnetic disorder in planar symmetry spin models. *Phys. Rev. B*, v. 72, p. 094418, Sep 2005.
- [16] SCHEIDL, S.; LEHNEN, M. XY models with disorder and symmetry-breaking fields in two dimensions. *Phys. Rev. B*, v. 58, p. 8667–8682, Oct 1998.
- [17] JOSÉ, J. V. et al. Renormalization, vortices, and symmetry-breaking perturbations in the two-dimensional planar model. *Phys. Rev. B*, v. 16, p. 1217–1241, Aug 1977.
- [18] LEE, D. H.; GRINSTEIN, G. Strings in two-dimensional classical XY models. *Phys. Rev. Lett.*, v. 55, p. 541–544, Jul 1985.
- [19] CARPENTER, D. B.; CHALKER, J. T. The phase diagram of a generalised XY model. *Journal of Physics: Condensed Matter*, v. 1, n. 30, p. 4907, 1989.
- [20] KORSHUNOV, S. E. Possible splitting of a phase transition in a 2d XY model. *JETP*, v. 41, p. 263, 1985.
- [21] DIAN, M.; HLUBINA, R. Spin-ice phase in a modified XY model. *Phys. Rev. B*, v. 84, p. 224420, Dec 2011.
- [22] PARK, J.-H. et al. Nematic and chiral order for planar spins on a triangular lattice. *Phys. Rev. Lett.*, v. 101, p. 167202, Oct 2008.
- [23] JIAN-PING, L.; QING-HU, C. Phase diagram of XY model with nematic coupling on the simple cubic lattice. *Communications in Theoretical Physics*, v. 57, n. 1, p. 166, 2012.

- 
- [24] BONNES, L.; WESSEL, S. Half-vortex unbinding and Ising transition in constrained superfluids. *Phys. Rev. B*, v. 85, p. 094513, Mar 2012.
- [25] PODEROSO, F. C.; ARENZON, J. J.; LEVIN, Y. New ordered phases in a class of generalized XY models. *Phys. Rev. Lett.*, v. 106, p. 067202, Feb 2011.
- [26] KORSHUNOV, S. Incommensurate vortices and phase transitions in two-dimensional XY models with interaction having auxiliary minima. *arXiv:1207.2349*.
- [27] TOBOCHNIK, J.; CHESTER, G. V. Monte carlo study of the planar spin model. *Phys. Rev. B*, v. 20, p. 3761–3769, Nov 1979.
- [28] MINNHAGEN, P.; KIM, B. J. Direct evidence of the discontinuous character of the Kosterlitz-Thouless jump. *Phys. Rev. B*, v. 67, p. 172509, May 2003.
- [29] BAEK, S. K.; MINNHAGEN, P. Non-Kosterlitz-Thouless transitions for the  $q$ -state clock models. *Phys. Rev. E*, v. 82, p. 031102, Sep 2010.
- [30] LAPILLI, C. M.; PFEIFER, P.; WEXLER, C. Universality away from critical points in two-dimensional phase transitions. *Phys. Rev. Lett.*, v. 96, p. 140603, Apr 2006.
- [31] OLSSON, P. Effective vortex interaction in the two-dimensional XY model. *Phys. Rev. B*, v. 46, p. 14598–14616, Dec 1992.
- [32] FISHER, M. E.; BARBER, M. N.; JASNOW, D. Helicity modulus, superfluidity, and scaling in isotropic systems. *Phys. Rev. A*, v. 8, p. 1111–1124, Aug 1973.
- [33] NELSON, D. R.; KOSTERLITZ, J. M. Universal jump in the superfluid density of two-dimensional superfluids. *Phys. Rev. Lett.*, v. 39, p. 1201–1205, Nov 1977.
- [34] MINNHAGEN, P. The two-dimensional Coulomb gas, vortex unbinding, and superfluid-superconducting films. *Rev. Mod. Phys.*, v. 59, p. 1001–1066, Oct 1987.
- [35] WEBER, H.; MINNHAGEN, P. Monte Carlo determination of the critical temperature for the two-dimensional XY model. *Phys. Rev. B*, v. 37, p. 5986–5989, Apr 1988.
- [36] HÜBSCHER, D. M.; WESSEL, S. Stiffness jump in the generalized XY model on the square lattice. *Phys. Rev. E*, v. 87, p. 062112, Jun 2013.

- 
- [37] Canova, G. A. et al. Reply to "Incommensurate vortices and phase transitions in two-dimensional XY models with interaction having auxiliary minima" by S. E. Korshunov. *arXiv:1207.3447*, jul. 2012.
- [38] WOLFF, U. Collective Monte Carlo updating for spin systems. *Phys. Rev. Lett.*, v. 62, p. 361–364, Jan 1989.
- [39] NEWMAN, E.; BARKEMA, G. *Monte Carlo Methods in Statistical Physics*. [S.l.]: Clarendon Press, 1999.
- [40] HASENBUSCH, M. The two-dimensional XY model at the transition temperature: a high-precision monte carlo study. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, v. 38, n. 26, p. 5869, 2005.
- [41] ROMANO, S. Topological transitions in two-dimensional lattice spin models. *Phys. Rev. E*, v. 73, p. 042701, Apr 2006.
- [42] BINDER, K. Critical properties from Monte Carlo coarse graining and renormalization. *Phys. Rev. Lett.*, v. 47, p. 693–696, Aug 1981.
- [43] LOISON, D. Binder's cumulant for the Kosterlitz-Thouless transition. *Journal of Physics: Condensed Matter*, v. 11, n. 34, p. L401, 1999.
- [44] HASENBUSCH, M. The Binder cumulant at the Kosterlitz–Thouless transition. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, v. 2008, n. 08, p. P08003, 2008.
- [45] VINK, R. L. The isotropic-to-nematic transition in a two-dimensional fluid of hard needles: a finite-size scaling study. *The European Physical Journal B*, v. 72, n. 2, p. 225–231, 2009.
- [46] CANOVA, G. A.; LEVIN, Y.; ARENZON, J. J. A ser publicado.