

Gases de Rede com exclusão de primeiros vizinhos

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

1. Introdução:

Gases de rede são caracterizados como um sistema de partículas localizadas em uma rede cristalina cujas interações se dão entre vizinhos próximos nesta rede.

Um modelo simples que se assemelha a um gás de rede é o modelo ferromagnético de Ising [1], caracterizado por spins, que ocupam todos os sítios da rede, e que podem estar em dois estados diferentes, a saber, +1 e -1. Dada a interação entre vizinhos próximos, quando a temperatura do sistema é diminuída, observa-se uma transição de fase de uma fase paramagnética (altas temperaturas) para uma fase ferromagnética (baixas temperaturas). As propriedades termodinâmicas desta transição de fase situam o modelo em uma classe de universalidade, neste caso, a classe de universalidade do modelo de Ising.

Diferentemente do modelo de Ising, gases de rede não possuem um número fixo de partículas. Estas podem ser adicionadas ou removidas ao sistema, permitindo, com isto, que sua densidade varie ao longo do tempo. Nos casos de interesse, o volume e a temperatura do sistema são mantidos constantes. A única interação entre as partículas do sistema é repulsiva do tipo caroço-duro (*hard-core*) que previne a superposição da partícula com partículas vizinhas[2]. Neste contexto, a temperatura não participa da dinâmica e o sistema é dito atérmico. Por este motivo, a transição de fase se dá pela variação do potencial químico do sistema, o qual controla a densidade.

Neste trabalho, utilizando simulações de Monte Carlo, são estudadas as redes quadrada, triangular e honeycomb com exclusão de vizinhos de primeira ordem, ou seja, sendo um sítio ocupado, os vizinhos de primeira ordem não o poderão ser.

2. Algoritmo de Metropolis:

O algoritmo empregado nas simulações de Monte Carlo foi o de Metropolis[1]. Este algoritmo é importante por unir dois processos que tem influência tanto na qualidade dos resultados como no tempo computacional necessário. Estes processos são a cadeia de Markov e a amostragem por importância.

A cadeia de Markov emprega o processo de levar o sistema de um estado para outro de maneira que o segundo não seja dependente de nenhum outro estado senão o imediatamente anterior. Em outras palavras, o sistema não possui memória.

O segundo processo, amostragem por importância, é extremamente relevante tanto para a redução do tempo de simulação quanto para a sua viabilidade. Permitindo que o sistema explore por mais tempo as configurações relevantes para as propriedades termodinâmicas, reduz-se o tempo gasto em regiões menos relevantes que, geralmente, são mais abrangentes do que as relevantes.

Neste processo, a sequência (cadeia) de estados é percorrida pela simulação de acordo com a probabilidade de Boltzmann, a qual é a distribuição apropriada para sistemas clássicos em equilíbrio[3].

O algoritmo de Metropolis aplicado aos Gases de Rede no ensemble grande canônico (μVT) [3] consiste basicamente em:

- 1 – Escolhe-se um sítio aleatório
- 2 – Sorteia-se um evento (adicionar/remover a partícula do sítio)
- 3 – Calcula-se a taxa de aceitação deste novo estado
- 4 – Caso a taxa de aceitação seja maior que um, o novo estado é automaticamente aceito. Caso contrário, o estado é admitido ou rejeitado de acordo com esta taxa.

3. Primeiros vizinhos e subredes:

Quando são excluídos os primeiros vizinhos de um sítio, formam-se subredes que, quando totalmente preenchidas, correspondem à densidade máxima permitida pelo sistema. As subredes correspondentes a cada tipo de rede estão representadas na Figura 1.

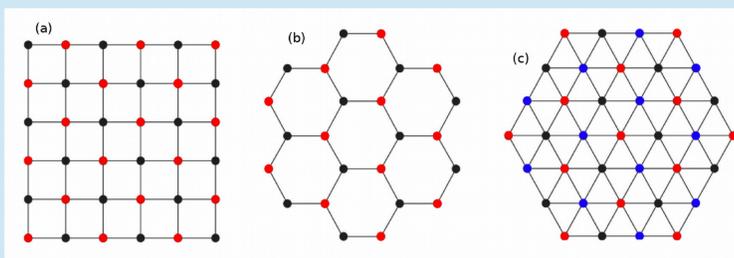


Figura 1: (a) As duas subredes existentes na rede quadrada formam um padrão do tipo tabuleiro de xadrez e levam a uma densidade máxima de 1/2. (b) Na rede honeycomb o padrão é também de tabuleiro de xadrez e a sua densidade máxima é 1/2. (c) A rede triangular possui três subredes, levando a uma densidade máxima de 1/3.

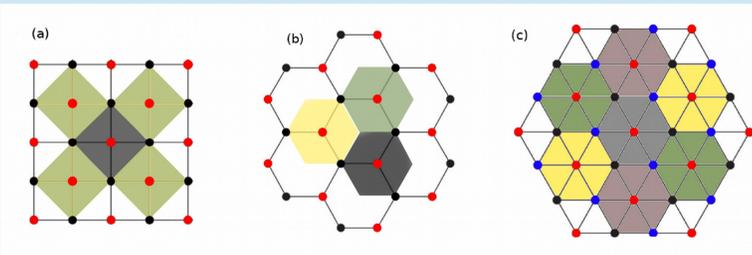


Figura 2: Quando um sítio é ocupado, excluem-se seus vizinhos mais próximos. É possível notar as interações do tipo caroço-duro em cada uma das redes.

4. Análise dos dados: Escala de tamanho finito e repesagem de histogramas

Quando propriedades de um sistema muito grande são analisadas por meio de um sistema finito, surgem efeitos que escalam com o tamanho do sistema estudado[4]. Em um sistema infinito, a susceptibilidade possui valor infinito em uma transição de fase de segunda ordem, porém, quando analisada em um sistema finito, observa-se que quanto menor o sistema, menor é o valor adquirido por ela neste ponto.

A maneira como um sistema escala com seu tamanho situa-o em uma classe de universalidade. Esta classe é determinada a partir dos chamados expoentes críticos da transição de fase, que são obtidos fazendo com que as curvas de um determinado parâmetro para diferentes tamanhos do sistema colapsem em uma única curva. Esta curva é comum a todos os sistemas pertencentes a mesma classe de universalidade.

Devido ao tempo computacional necessário para se obter bons resultados em uma simulação de Monte Carlo, muitas vezes é inviável rodar simulações em todos os pontos próximos à transição de fase. Para reduzir este tempo e melhorar a qualidade dos dados, utiliza-se a técnica de repesagem de histogramas[1], que consiste em rodar uma simulação longa próxima à transição de fase e, a partir de sua série temporal, gerar histogramas, de modo que, atribuindo novos pesos aos estados percorridos, é possível obter o comportamento das grandezas termodinâmicas em uma região em torno da transição de fase. Os resultados apresentados neste trabalho foram obtidos empregando esta técnica.

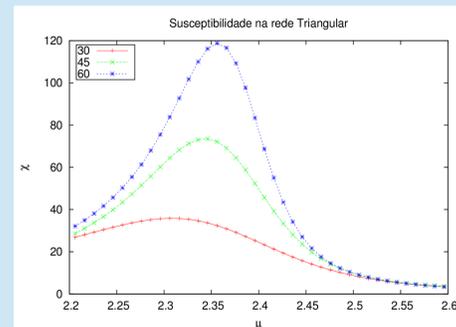


Figura 3: A susceptibilidade na transição de fase escala com o tamanho do sistema, levando à análise de escala de tamanho finito.

5. Resultados:

As transições de fase ocorrem nos potenciais químicos críticos $\mu_c = 1,33$ (rede quadrada), $\mu_c = 2,4$ (rede triangular) e $\mu_c = 1,98$ (rede honeycomb). Em todas as redes, o sistema passa de uma fase desordenada (fase líquida), onde alguns sítios de todas as subredes são ocupadas, para uma fase ordenada (fase sólida), onde apenas uma subrede é preferencialmente ocupada.

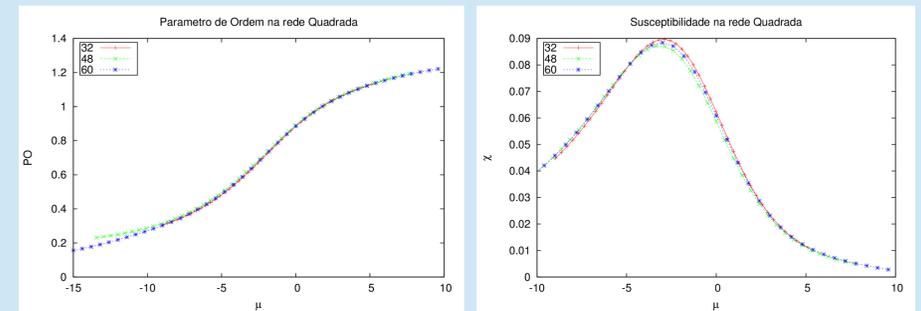


Figura 4: Colapso do parâmetro de ordem (esquerda) e da susceptibilidade (direita) em função do potencial químico para a rede quadrada. Os expoentes utilizados foram: $\beta = 1/8$, $\nu = 1$ e $\gamma = 7/4$.

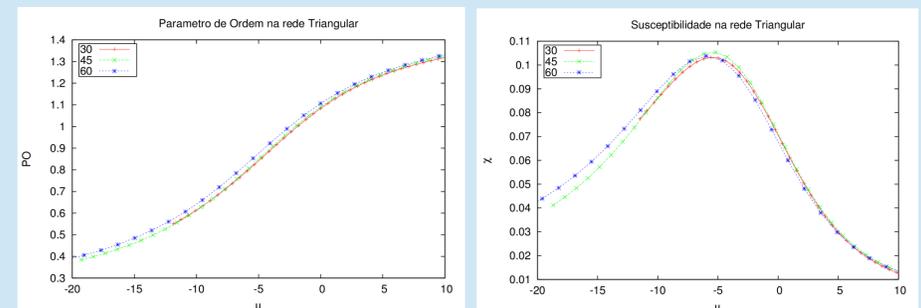


Figura 5: Colapso do parâmetro de ordem (esquerda) e da susceptibilidade (direita) em função do potencial químico para a rede triangular. Os expoentes utilizados foram: $\beta = 1/9$, $\nu = 5/6$ e $\gamma = 13/9$.

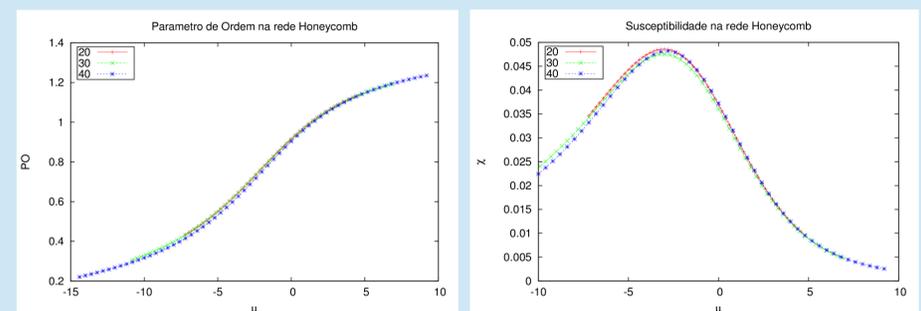


Figura 6: Colapso do parâmetro de ordem (esquerda) e da susceptibilidade (direita) em função do potencial químico para a rede honeycomb. Os expoentes utilizados foram: $\beta = 1/8$, $\nu = 1$ e $\gamma = 7/4$.

6. Conclusões:

Todos os sistemas estudados passam por uma transição de fase contínua de segunda ordem.

As redes quadrada e honeycomb pertencem à classe universal do modelo de Ising, enquanto que a rede triangular pertence à classe universal do Modelo de Potts de três estados como pode ser observado pelos valores utilizados no colapso (ver legendas).

Os resultados obtidos estão de acordo com aqueles encontrados na literatura.

7. Referências:

- [1] – NEWMAN, M. E. J.; BARKEMA, G. T. *Monte Carlo Methods in Statistical Physics chapter 3*. Oxford University Press: New York, USA, 1999.
- [2] – 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.
- [3] – FRENKEL, Daan, and BEREND Smit. *Understanding molecular simulation: from algorithms to applications*. Vol. 1. Academic press, 2001.
- [4] - D. LANDAU AND K. BINDER, *A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics*. Cambridge University Press: Cambridge UK, 2000.