

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

**Interações nemáticas competitivas no modelo XY
generalizado em duas e três dimensões[†]**
**(Competing nematic interactions in the XY
model in two and three dimensions)**

Gabriel Antônio Canova

Tese elaborada sob orientação do Prof. Dr. Jeferson J. Arenzon e apresentada ao Instituto de Física da UFRGS em preenchimento do requisito parcial para obtenção do título de Doutor em Ciências.

Porto Alegre
Setembro de 2017

[†] Trabalho financiado pelo Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq)

Sumário

Resumo	4
Abstract	5
1. Introdução	6
2. O modelo XY	9
2.1 Introdução	9
2.2 Transições contínuas	10
2.3 Transição Kosterlitz-Thouless	10
2.4 Modelo XY tridimensional	20
3. Modelo XY Generalizado	23
3.1 Caso bidimensional com $q = 2$	23
3.2 Caso tridimensional com $q = 2$	28
3.3 Caso bidimensional com $q = 3$	28
3.4 Caso bidimensional com $q = 8$	30
4. Resultados: $q = 3$	32
4.1 Caso bidimensional	32
4.2 Caso tridimensional	41
4.3 Conclusões	45
5. Resultados: $q = 8$	47
5.1 Caso bidimensional	47
5.2 Caso tridimensional	62
5.3 Conclusões	73
6. Conclusões e perspectivas	74
Apêndice	77

A. Simulação	78
A.1 Algoritmo <i>Single-flip</i>	78
A.2 Algoritmos de cluster	79
A.2.1 Wolff	79
A.2.2 Swendsen-Wang	80
B. Vórtices	82
C. Derivação da helicidade	86

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). O modelo XY tridimensional exibe ordem de longo-alcance para baixas temperaturas e, à medida que a temperatura aumenta, passa para o estado desordenado através de uma transição ferromagnética usual. Generalizações do modelo XY, incluindo competição entre um termo ferromagnético e um nemático, foram introduzidas e estudadas por diversos autores. Essas interações nemáticas criam novas transições de fases e novos defeitos topológicos, como vórtices semi-inteiros. Neste trabalho, para casos particulares desses modelos generalizados, exploramos as classes de universalidade e os diagramas de fases em duas e três dimensões através de simulações de Monte Carlo usando algoritmos de cluster em GPUs, escalonamento de tamanhos finitos e análise da helicidade. Em particular, encontramos que a competição entre os termos ferromagnético e nemático dá origem a novas linhas de transição que podem pertencer a uma ampla gama de classes, desde a Kosterlitz-Thouless, 3dXY, Ising, Potts com 3 estados e até mesmo uma transição descontínua.

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, which belongs to the Kosterlitz-Thouless (KT) universality class. The three dimensional XY model exhibits a ferromagnetic long-range order at low temperatures and goes to the disordered state through a usual ferromagnetic transition. Generalizations of the XY model, including competition between a ferromagnetic and a nematic-like term, have been introduced and studied by many authors. These nematic-like interactions create new phase transitions and new topological defects, like half-integer-vortices. In this work, for particular cases of these generalized models, we explore the universality classes of the transitions and the phase diagrams in two and three dimensions through Monte Carlo simulations using clusters algorithms on GPUs, finite size scaling and helicity analysis. In particular, we find that the competition between the ferromagnetic and nematic terms gives origin to new transition lines that can belong to a wide spectrum of classes, ranging from Kosterlitz-Thouless, 3dXY, Ising, 3 states Potts and even a discontinuous transition.

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

Capítulo 1

Introdução

Na física, embora alguns sistemas compostos de muitas partículas, como átomos ou moléculas, possam apresentar um conjunto de equações que descrevam o movimento de cada uma de suas componentes, a resolução dessas equações de movimento resulta ser impraticável dado seu vasto número. A mecânica estatística, por outro lado, se propõe ao estudo de tais sistemas partindo de suas propriedades características microscópicas para obter propriedades macroscópicas. Isso é verificado observando-se fenômenos críticos como transições de fase, onde pequenas variações na temperatura ou pressão podem ocasionar uma completa modificação nas propriedades macroscópicas observáveis, tornando os detalhes microscópicos irrelevantes. Tais propriedades podem ser genericamente descritas por um conjunto de expoentes críticos: distintos modelos, mas que possuam o mesmo conjunto de expoentes, são ditos como pertencentes à mesma classe de universalidade. As transições de fase, por sua vez, podem ser classificadas de acordo com sua ordem. São ditas de primeira ordem ou descontínuas aquelas que apresentam uma descontinuidade na primeira derivada da energia livre, como o parâmetro de ordem. Exemplos recorrentes são as passagens de sólido para líquido e de líquido para vapor em fluídos como a água. Neste caso, o parâmetro de ordem é a diferença entre as densidade em cada fase que, na transição, possui uma descontinuidade. Quando o parâmetro de ordem decresce continuamente a zero ao sistema se aproximar da transição, ela é de segunda ordem ou contínua. O modelo de Ising bidimensional é um exemplo, a magnetização, parâmetro de ordem para este caso, decresce continuamente a zero quando o sistema passa do estado ordenado para o desordenado. Além das transições de segunda ordem contínuas, existem aquelas de ordem infinita e não associadas à quebra de simetrias, as quais serão abordadas adiante.

Em 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, respectivamente. Assim, spins vizinhos

tendem a ter a mesma orientação no caso ferromagnético ou oposta no caso anti-ferromagnético, 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. Em sistemas desordenados, a correlação espacial decai exponencialmente a zero para grandes distâncias. Porém, se decair a um valor constante e diferente de zero, dizemos que sistema possui ordem de longo alcance. Quando decai como uma lei de potência a zero, o sistema possui pseudo-ordem de longo alcance ou ordem de quase-longo alcance. Em transições ferromagnéticas, 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 modelos bidimensionais de spins contínuos com fase angular periódica (grupo de simetria $U(1)$), isotrópicos e com interações de curto alcance, sendo o modelo XY um exemplo, não apresentam ordem de longo alcance para qualquer temperatura finita, o que inviabiliza a existência de uma transição ferromagnética. 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 pela dissociação de defeitos topológicos chamados de vórtices. Apesar de não haver ordem de longo alcance mesmo para baixas temperaturas, há, entretanto, uma pseudo-ordem onde a correlação espacial decai como uma lei de potência. Outro ponto interessante é que a transição KT é de ordem infinita, não envolvendo, portanto, quebras de simetrias em duas dimensões. Por outro lado, no caso tridimensional, o modelo XY apresenta uma transição 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 paradigmática transição KT mediada por defeitos topológicos [5], o modelo XY vem sendo amplamente estudado analítica e numericamente há mais de quatro décadas, mas ainda permanece sem solução analítica. Além disso, possui uma ampla gama de aplicações como em Hélio superfluido [6,7], filmes supercondutores [8], arranjos de junções Josephson [9,10], gás de Coulomb [11] e cristais líquidos [12].

A transição KT é de grande importância, pois abrange muitos outros modelos além do XY. Está presente mesmo em modelos com spins discretos [13–15] e com antiferromagnetismo [16,17], no modelo F de seis vértices [18], assim como em sistemas com interações de longo alcance em uma dimensão [19]. Também foram estudados modelos com diluição (remoção de conexões da rede) por se aproximarem de sistemas reais onde há impurezas não-magnéticas [20,21]. 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 [21]. Outros modelos generalizam o XY através da inclusão de campos externos com alinhamento em distintos eixos preferenciais [22, 23] ou com a introdução de espaços curvilíneos servindo de base aos spins [24], no último caso, curvaturas extrínsecas podem ser encaradas como campos externos que induzem ordem de longo alcance entre os spins destruindo a transição KT. Além disso, as mesmas ideias desenvolvidas por Kosterlitz e Thouless para estudar superfluidos foram propostas para entender o processo de fusão em sistemas bidimensionais compostos por interações repulsivas entre discos duros [25–27].

Uma generalização muito estudada do modelo XY e introduzida [28] para entender o desacoplamento de vórtices semi-inteiros (*half-vortices*), inclui interações nemáticas, como termos harmônicos no Hamiltoniano, que favorecem spins com diferentes orientações [28–35]. Nesse modelo, novas fases termodinâmicas aparecem, as quais possuem pseudo-ordem nemática de longo alcance, além de transições em diferentes classes de universalidade como Ising e Potts 3 estados. Também surgem novos defeitos topológicos como os já mencionados vórtices fracionários e paredes de domínios [29]. Trabalhos recentes [35] exploraram outros casos para o termo nemático, o resultado é que novas fases não triviais e transições apareceram, porém diversos pontos permaneceram em aberto o que, de certo modo, gerou algumas críticas [36]. Além do mais, esta classe de modelos, com interações ferromagnéticas e/ou antiferromagnéticas, foi usada para modelar empacotamento de DNA [37], fases estruturais de polímeros de cianeto [38, 39] e partículas auto-propelentes fora do equilíbrio [40] com um similar, embora dinâmico, diagrama de fases.

O modelo se apresenta como uma fonte inesgotável de particularidades e propriedades interessantes a serem compreendidas e é, portanto, importante estudá-lo mais detalhadamente. O objetivo deste trabalho é aprimorar os resultados obtidos para dois casos particulares desses modelos com interações nemáticas iniciado por Poderoso *et al* [35]. Para isso, utilizaremos métodos de Monte Carlo com o uso de algoritmos de clusters e simulações em GPUS, além de escalonamento de tamanhos finitos. Com resultados para novos observáveis e utilizando sistemas muito maiores, portanto com maior precisão, detalharemos os diagramas de fases presentes na Ref. [35], assim como verificaremos as suposições feitas quanto às classes de universalidade das transições. Além disso, estenderemos os resultados para o caso tridimensional, obtendo os diagramas e as classes de universalidade presentes.

Primeiramente, revisaremos o modelo XY original, a transição Kosterlitz-Thouless assim como os modelos com interações nemáticas já estudados. Então, mostraremos em seguida os novos resultados, as conclusões e as perspectivas do que ainda falta ser compreendido.

Capítulo 2

O modelo XY

Neste capítulo abordaremos alguns aspectos já bem estabelecidos do modelo XY em duas e três dimensões. Após introduzir o Hamiltoniano, abordaremos sucintamente as propriedades de transições contínuas e da 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 restritos a girar no plano, 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. A orientação dos spins é contínua 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 alinhar com seus vizinhos. A dimensão do espaço determina a natureza da transição de fase onde se terá o ordenamento dos spins em baixas temperaturas, quando houver. No caso unidimensional, não há qualquer tipo de ordem e muito menos uma transição de fase. Em duas dimensões, os spins adquirem uma pseudo-ordem ferromagnética de longo alcance em baixas temperaturas e a transição de fase é do tipo Kosterlitz-Thouless. Em três dimensões, os spins possuem ordenamento ferromagnético de longo alcance na fase de baixas temperaturas e sofrem uma transição ferromagnética contínua pertencente à classe de universalidade do modelo XY tridimensional. Essas transições serão descritas na sequência.

2.2 Transições contínuas

Antes de discutirmos as características das classes de universalidade Kosterlitz-Thouless e 3dXY, é necessário revisar as propriedades de transições contínuas usuais. Nessas transições, o comprimento de correlação diverge no ponto crítico, enquanto o parâmetro de ordem e a energia vão a zero continuamente. 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,

$$\xi \sim t^{-\nu} \quad (2.2a)$$

$$C \sim t^{-\alpha} \quad (2.2b)$$

$$m \sim t^\beta \quad (2.2c)$$

$$\chi \sim t^{-\gamma} \quad (2.2d)$$

sendo $t \equiv (T - T_c)/T_c$, $T > T_c$, a temperatura reduzida. Os observáveis ξ , C , m e χ são, respectivamente, o comprimento de correlação, calor específico, magnetização e a susceptibilidade magnética associada.

Em simulações com sistemas finitos, o comprimento de correlação fica limitado pelo tamanho linear, L , da rede. Como consequência, a susceptibilidade magnética será finita e apresentará picos na temperatura pseudo-crítica¹ proporcionais a $L^{-\gamma/\nu}$. Porém, utilizando escalonamento de tamanhos finitos (*finite size scaling*-FSS) se pode mostrar [41] que

$$\xi = L^{1/\nu} \mathcal{Z}_0(tL^{1/\nu}) \quad (2.3a)$$

$$C = L^{\alpha/\nu} \mathcal{C}_0(tL^{1/\nu}) \quad (2.3b)$$

$$m = L^{-\beta/\nu} \mathcal{M}_0(tL^{1/\nu}) \quad (2.3c)$$

$$\chi = L^{\gamma/\nu} \mathcal{X}_0(tL^{1/\nu}) \quad (2.3d)$$

onde $\mathcal{Z}, \mathcal{C}, \mathcal{M}$ e \mathcal{X} são funções de escala universais. Desse modo, através de resultados em sistemas finitos, podemos obter uma estimativa dos expoentes críticos e da temperatura de transição no limite termodinâmico.

2.3 Transição Kosterlitz-Thouless

Em duas dimensões, o Hamiltoniano (2.1) não apresenta ordem de longo-alcance nem uma transição ferromagnética. Porém, há um outro tipo de transição puramente

¹ À medida que o tamanho do sistema aumenta, a temperatura pseudo-crítica se aproxima à temperatura crítica do limite termodinâmico.

topológica denominada Kosterlitz-Thouless [2, 3]. À diferença de spins discretos, no caso contínuo é possível ter, com pouco custo energético, um pequeno $\Delta\theta$ entre spins vizinhos, formando uma onda de spin (*spin waves*), como mostrado na Fig. 2.1. Mesmo para baixas temperaturas, o sistema é dominado por essas excitações as quais são responsáveis pela destruição da ordem de longo-alcance e consequente decaimento como lei de potência da correlação espacial entre os spins. Porém, elas não estão relacionadas com a transição e não possuem comportamento crítico para qualquer temperatura.

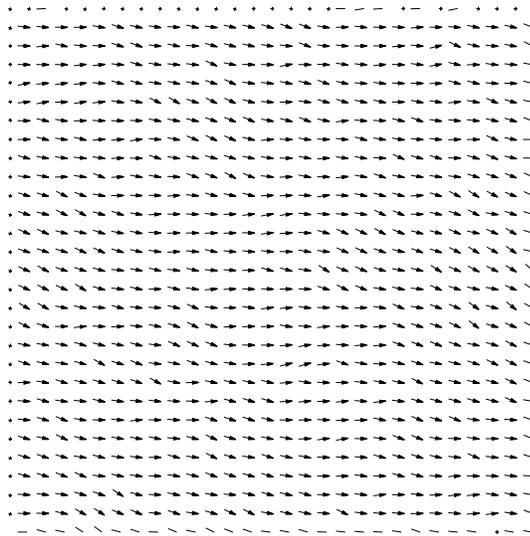


Fig. 2.1: Configuração dos spins no modelo XY em $T = 0.05$ na rede quadrada. Mesmo a essa temperatura muito baixa, o sistema possui flutuações que destroem a ordem de longo alcance.

À medida que a temperatura aumenta, criam-se excitações topológicas onde os spins formam pares de vórtices-antivórtices, como mostrado na figura 2.2, e que serão responsáveis pela destruição da pseudo-ordem de longo alcance e consequente transição de fase. Ao escolhermos uma trajetória fechada sobre os sítios da rede, no sentido anti-horário e ao redor de um vórtice (antivórtice), o valor da soma das diferenças de fase entre os spins é um múltiplo inteiro positivo (negativo) de 2π , denominado *winding number*, e que indica o número de voltas que o spin efetua ao longo dessa trajetória (ver apêndice B para mais detalhes).

Em completa analogia ao gás de Coulomb bidimensional, os defeitos topológicos podem ser encarados como cargas. Na fase de baixas temperaturas, pares de cargas de sinais opostos encontram-se acopladas e se aniquilam, mas, à medida que a

temperatura aumenta, tais pares se dissociam e o sistema entra na fase desordenada em $T_{\text{KT}} \simeq 0.893$ (para rede quadrada) [42]. O custo energético para se criar um par vórtice-antivórtice cresce logaritmicamente com a distância entre seus respectivos centros, para baixas temperaturas, isso previne sua formação espontânea e a energia livre é alta e positiva. Porém, quanto maior a distância entre eles, maior a entropia que eles adicionam no sistema, já que aumenta o número de possibilidades onde eles podem ser posicionados. Conforme a temperatura aumenta, o termo entrópico faz a energia livre diminuir e mudar de sinal em T_{KT} , a partir do qual os vórtices se proliferam e a função de correlação passa a decair exponencialmente com a distância. Na Fig. 2.3 as densidades de vórtices e antivórtices podem ser vistas em função da temperatura. Portanto, resumindo, a correlação entre os spins localizados em \mathbf{r}_i e \mathbf{r}_0 obedece

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

onde $\langle \dots \rangle$ significa uma média térmica e $\mathbf{r} = |\vec{r}_i - \vec{r}_0|$. É importante notar que

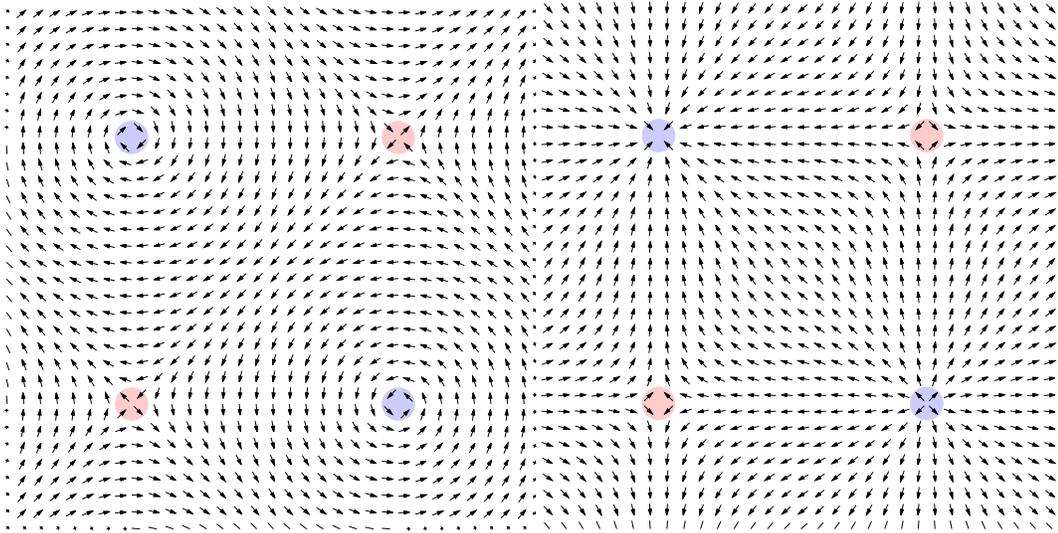


Fig. 2.2: Exemplos de vórtices (círculos azuis) e antivórtices (círculos vermelhos) presentes no modelo XY bidimensional na rede quadrada.

o expoente η é dependente da temperatura e seu valor, na transição, é $\eta(T_{\text{KT}}) = 1/4$ [3]. Relembrando que em uma transição ferromagnética usual, esperamos que na fase de baixas temperaturas a função de correlação decaia a um valor finito com a distância, enquanto que na transição decaia a zero como uma lei de potência. Porém,

no modelo XY bidimensional, a correlação decai como uma lei de potência para qualquer temperatura abaixo da transição. Além disso, de acordo com as Refs. [3,43], o comprimento de correlação, quando a temperatura diminui, se aproximando de T_{KT}^+ , diverge como (singularidade essencial)

$$\xi \sim e^{b/t^{1/2}}, \quad b \simeq 1.5. \quad (2.4)$$

Diferentemente das transições contínuas usuais, Eq. (2.3), onde a divergência segue uma lei de potência, para $T < T_{\text{KT}}$, o comprimento de correlação é sempre infinito, o que faz com que a susceptibilidade magnética também seja, pois $\chi \sim \xi^{2-\eta(T)}$. Desse modo, toda fase abaixo de T_{KT} é crítica.

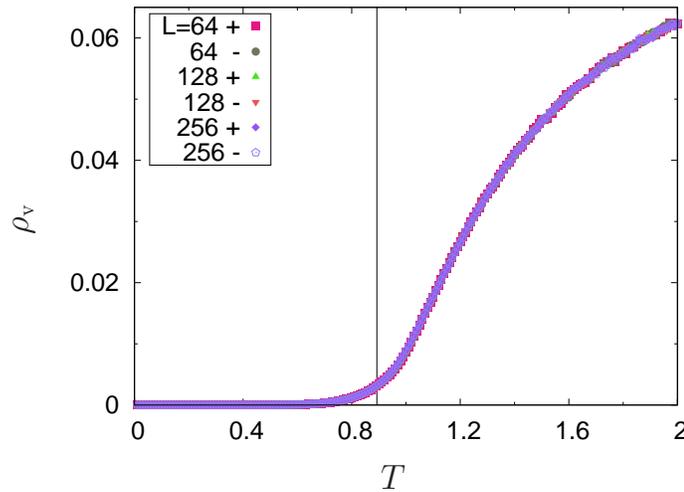


Fig. 2.3: Densidade de vórtices e antivórtices em função da temperatura para diferentes tamanhos. Abaixo de T_{KT} , a densidade é baixa, mas após a transição, os vórtices se proliferam e ρ_v cresce rapidamente.

Como a magnetização vai a zero e a susceptibilidade diverge para o modelo XY bidimensional no limite termodinâmico, precisamos de outro observável para caracterizar a transição KT. Para tal, introduzimos a helicidade (*helicity modulus*), que pode ser entendida como a resposta do sistema a um campo externo que exerça uma pequena torção em cada spin (ao contrário da susceptibilidade, que mede a resposta da magnetização ao se aplicar um campo externo uniforme). De acordo com a definição nas Refs. [13, 14, 44], estamos interessados em medir o acréscimo na energia livre quando induzimos uma pequena diferença de fase nos spins ao longo de uma direção, digamos \hat{x} , como mostrado na Fig 2.4. Ou seja, fazemos uma

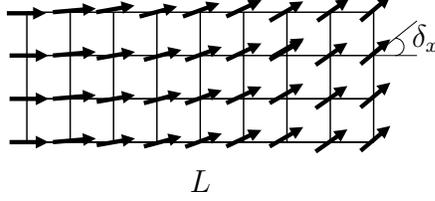


Fig. 2.4: Ao aplicar uma torção nos spins na direção \hat{x} , a diferença de fase total δ_x está uniformemente distribuída de modo que cada spin está defasado δ_x/L de seu vizinho.

substituição no Hamiltoniano tal que

$$\mathcal{H}(\theta_i - \theta_j) \rightarrow \mathcal{H}(\theta_i - \theta_j - \mathbf{r}_{ij} \cdot \hat{x} \delta_x / L) \quad (2.5)$$

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

$$\Delta F = F(\delta_x) - F(0) \quad (2.6)$$

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 δ_x pequeno

$$\Delta F \approx \frac{\delta_x^2}{2!} \frac{\partial^2 F}{\partial \delta_x^2} \Big|_{\delta_x=0} + \frac{\delta_x^4}{4!} \frac{\partial^4 F}{\partial \delta_x^4} \Big|_{\delta_x=0}, \quad (2.7)$$

pois os termos ímpares serão nulos

$$\frac{\partial F}{\partial \delta_x} \Big|_{\delta_x=0} = \frac{\partial^3 F}{\partial \delta_x^3} \Big|_{\delta_x=0} = 0. \quad (2.8)$$

Definimos a helicidade e a helicidade de quarta ordem como

$$\langle \Upsilon \rangle \equiv \frac{\partial^2 F}{\partial \delta_x^2} \Big|_{\delta_x=0} \quad (2.9)$$

$$\langle \Upsilon_4 \rangle \equiv \frac{\partial^4 F}{\partial \delta_x^4} \Big|_{\delta_x=0}. \quad (2.10)$$

Para um potencial dependente apenas da diferença angular entre os spins, de acordo com a Ref. [44], essas expressões podem ser descritas como (ver apêndice C)

$$\langle \Upsilon \rangle = \langle e \rangle - L^2 \beta \langle s^2 \rangle, \quad (2.11)$$

$$\langle \Upsilon_4 \rangle = \frac{1}{L^2} \langle e'' \rangle - 4\beta \langle s'' s \rangle - 3\beta [\langle \Upsilon^2 \rangle - \langle \Upsilon \rangle^2] + 2\beta^3 L^4 \langle s^4 \rangle, \quad (2.12)$$

sendo

$$e \equiv \frac{1}{L^2} \sum_{\langle ij \rangle_x} \frac{\partial^2 U_{ij}(\phi)}{\partial^2 \phi}, \quad (2.13)$$

$$s \equiv \frac{1}{L^2} \sum_{\langle ij \rangle_x} \frac{\partial U_{ij}(\phi)}{\partial \phi} \quad (2.14)$$

e $U_{ij}(\phi)$ a energia de ligação entre pares de spins vizinhos. As aspas se referem à derivada em relação a ϕ 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, 16, 45, 46]

$$\langle \Upsilon \rangle = -\frac{1}{2} \langle u \rangle - \frac{\beta}{L^2} \left\langle \left(\sum_{\langle ij \rangle_x} \sin(\theta_i - \theta_j) \right)^2 \right\rangle, \quad (2.15)$$

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, 47, 48] para o modelo XY fornecem as propriedades críticas para qualquer transição pertencente à classe de universalidade KT. A temperatura crítica T_{KT} pode diferir para cada modelo, porém a quantidade

$$\lim_{L \rightarrow \infty} \Upsilon(T_{KT})/T_{KT} = 2/\pi \quad (2.16)$$

é universal para todos os sistemas. Pelo fato de $\Upsilon(T_{KT}^+) = 0$, nos referimos à Eq. 2.16 como salto universal.

Na figura 2.5 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_{KT} . À medida que o tamanho do sistema aumenta, vamos nos aproximando da temperatura crítica real.

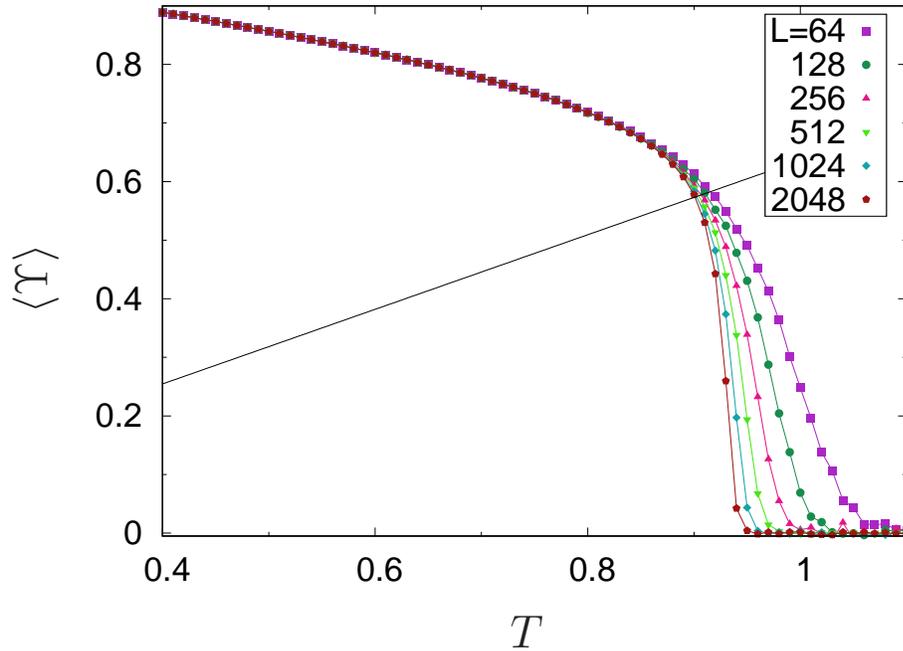


Fig. 2.5: Helicidade para o modelo XY bidimensional na rede quadrada com condições periódicas de contorno, Eq. (2.15), em função da temperatura para diferentes tamanhos juntamente com a reta $2T/\pi$. Conforme L aumenta, o ponto de cruzamento entre a reta e a helicidade converge para a temperatura crítica.

Weber e Minhagen [49] desenvolveram um método para estimar T_{KT} , levando em conta correções de tamanho finito, que consiste em achar a temperatura que minimiza o erro quadrático médio do ajuste dos dados com a expressão

$$\Upsilon(N) = \frac{2T}{\pi} \left(1 + \frac{1}{2 \ln L + C} \right), \quad (2.17)$$

sendo C um parâmetro livre. Quando consideramos os resultados da Fig. 2.5, para os diferentes tamanhos, encontramos o menor erro para $T \simeq 0.89$, como mostrado na figura 2.6. Logo, uma estimativa consistente com o valor conhecido de T_{KT} .

Um problema resultante de sistemas finitos é que, mesmo para tamanhos grandes, ainda não é possível 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 ΔF 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 do qual, 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 manter $\Delta F \geq 0$. Isso pode ser verificado na figura 2.7,

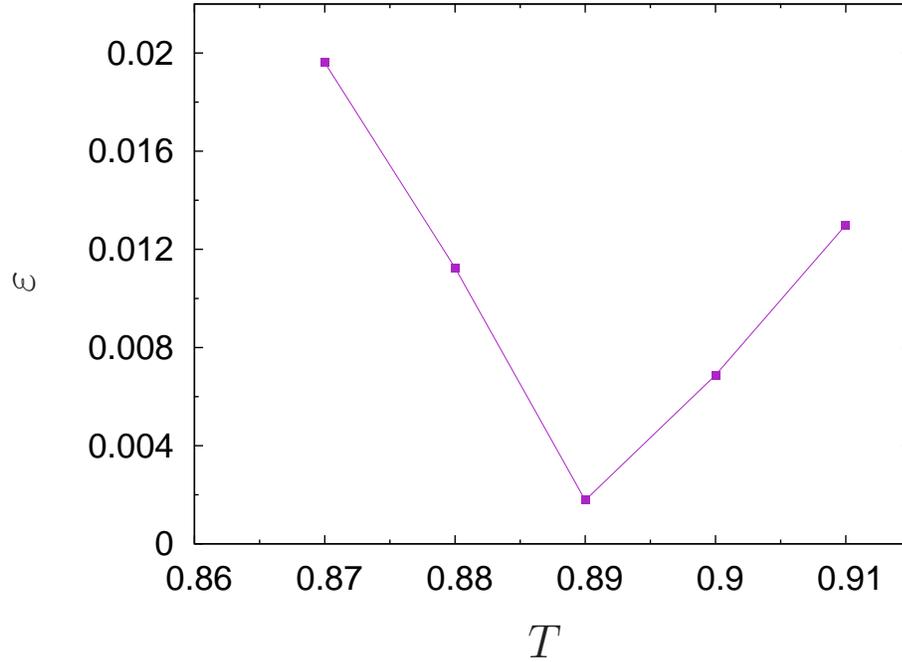


Fig. 2.6: Erro quadrático médio do ajuste Eq. (2.17) em função da temperatura. O mínimo ocorre em torno de $T \simeq 0.89$.

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_{KT} . Desse modo, $\langle \Upsilon_4 \rangle$ é mais um observável útil para identificar uma transição KT e sua temperatura crítica.

Apesar de no limite termodinâmico não haver ordem ferromagnética para qualquer temperatura finita, esta aparece para tamanhos finitos. E definimos a magnetização espontânea como $\mathbf{m} = 1/N \sum_i \mathbf{m}_i$, cujo módulo é

$$m = \frac{1}{N} \left| \sum_j \exp(i\theta_j) \right| = \frac{1}{N} \sqrt{\left(\sum_j \cos \theta_j \right)^2 + \left(\sum_j \sin \theta_j \right)^2} \quad (2.18)$$

e a respectiva susceptibilidade é dada por

$$\chi = \beta N (\langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2). \quad (2.19)$$

Embora não possamos utilizar as expressões (2.3) de escalonamento de tamanhos finitos no modelo XY 2d, é possível mostrar que na fase de baixas temperaturas a

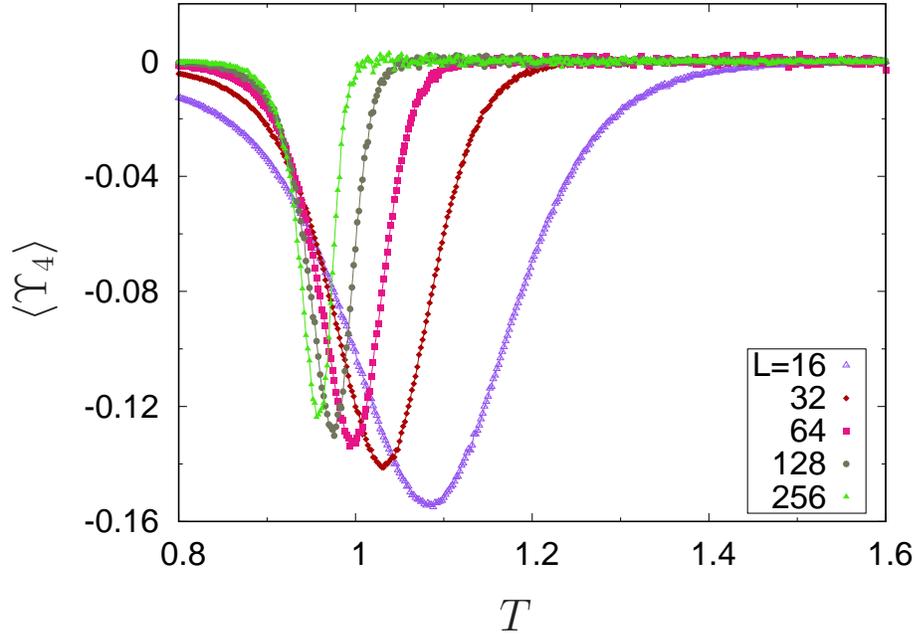


Fig. 2.7: (Helicidade de quarta ordem para o modelo XY, Eq. (2.12), em função da temperatura para diferentes tamanhos. À medida que o tamanho aumenta, o pico negativo diminui sua profundidade e se aproxima de $T_{KT} \simeq 0.893$.

razão entre os expoentes críticos é bem definida e a magnetização e a susceptibilidade escalam com o tamanho do sistema de acordo com

$$m \propto L^{-\beta/\nu} \quad \text{e} \quad \chi \propto L^{\gamma/\nu}, \quad (2.20)$$

onde, exatamente na transição, $\beta/\nu = 1/8$ e $\gamma/\nu = 7/4$, ou seja, a mesma razão entre expoentes do 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 transição Ising que, como toda transição contínua, possui tal comportamento apenas na região crítica.

Nas figuras 2.8 e 2.9 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 escalonamento em (2.20). Também podemos notar que ela cresce na fase de baixas temperaturas, porém, com expoentes não-universais.

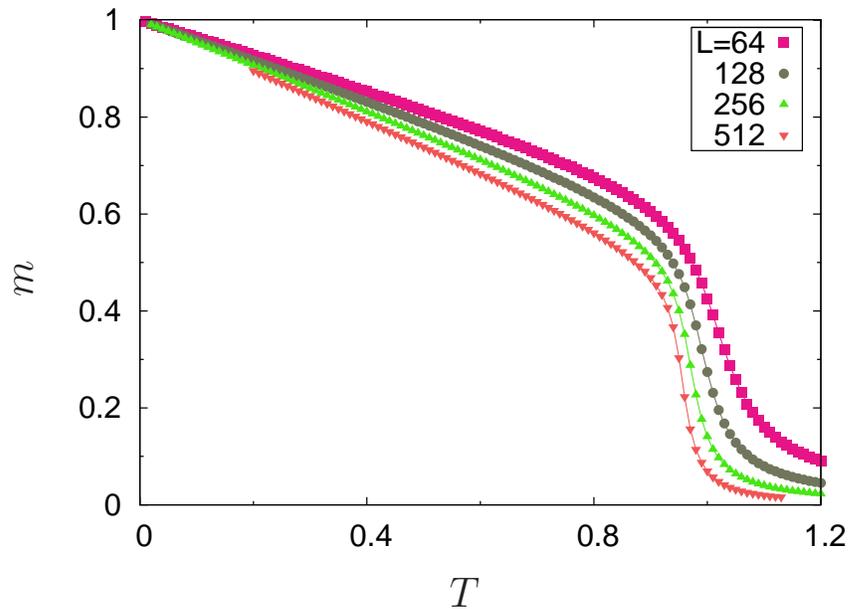


Fig. 2.8: Magnetização no modelo XY bidimensional, Eq. (2.18), para diferentes tamanhos (L) do sistema. As curvas decaem com o tamanho para qualquer temperatura finita.

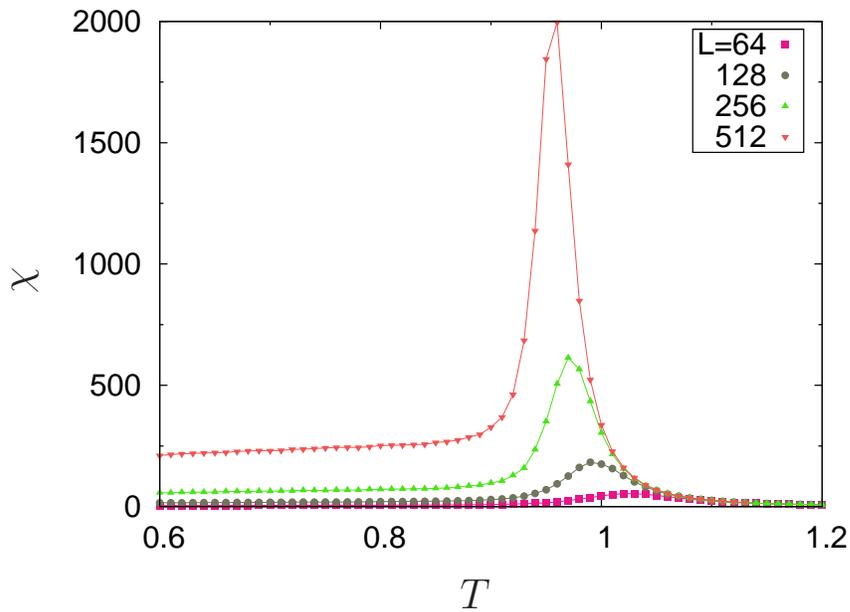


Fig. 2.9: Susceptibilidade magnética do modelo XY, Eq. (2.19), para diferentes tamanhos do sistema. Para $T < T_{KT}$, as curvas sobem e o pico se desloca para esquerda à medida que o tamanho do sistema aumenta.

2.4 Modelo XY tridimensional

O modelo XY em três dimensões apresenta uma magnetização espontânea não-nula para baixas temperaturas no limite termodinâmico. À medida que a temperatura aumenta, o sistema sofre uma transição contínua para um estado desordenado em $T_c \simeq 2.2018$ [50–52]. Além disso, para baixas temperaturas, a correlação espacial entre os spins decai a um valor não-nulo

$$\langle \mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_0 \rangle \sim e^{-\text{const.}T},$$

quando $r \rightarrow \infty$. Isso indica que o sistema possui ordem de longo-alcance e um certo grau de alinhamento entre os spins. Logo, é possível utilizar todas as ferramentas de escalonamento finito Eq.(2.3), inviáveis para o caso bidimensional, o que torna o modelo mais simples de ser estudado.

Nas Figs. 2.10 e 2.11 temos, respectivamente, a magnetização e a correspondente susceptibilidade magnética como funções da temperatura. Ao contrário do modelo XY2d, a magnetização só escala com o tamanho na região crítica no entorno da transição, sendo $m \propto L^{-\beta/\nu}$ com $\beta/\nu \simeq 0.2653$ [50–52]. Da mesma forma, a susceptibilidade só escala na região crítica de acordo com $\chi \propto L^{-\gamma/\nu}$, sendo $\gamma/\nu = 1.9638$.

A helicidade, Eq. (2.15), também é um observável útil no caso tridimensional [46, 50, 52, 53] e seu comportamento na região crítica é dado por uma lei de potência tal como os observáveis para transições contínuas Eq. (2.2)

$$\Upsilon \sim t^v \tag{2.21}$$

onde v é o expoente crítico associado. Podemos construir uma função de escala universal de modo que

$$\Upsilon(T, L) = L^{-v/\nu} \mathcal{U}_0(tL^{1/\nu}), \tag{2.22}$$

porém, de acordo com a lei de escala $v/\nu = d - 2 = 1$ [46, 50], a quantidade $L\Upsilon(T, L) = \mathcal{U}_0(0)$ deve ser independente do tamanho do sistema no ponto de transição. A Fig. 2.12 mostra a helicidade reescalada como função da temperatura, com as curvas para diferentes tamanhos cruzando em $T_c \simeq 2.203$, um valor consistente com a melhor estimativa da temperatura crítica [51].

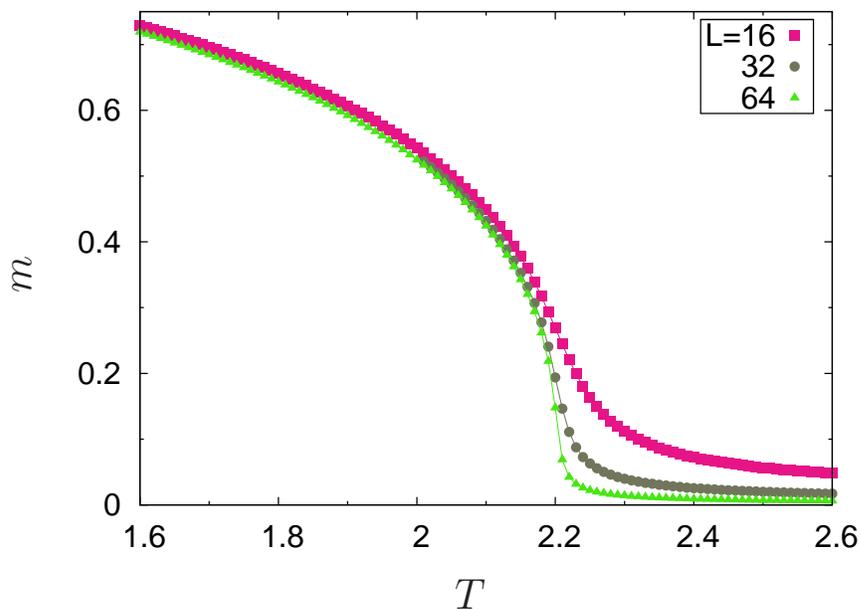


Fig. 2.10: Magnetização no modelo XY tridimensional, Eq. (2.18), em função da temperatura para diferentes tamanhos do sistema. A magnetização só escala na região crítica.

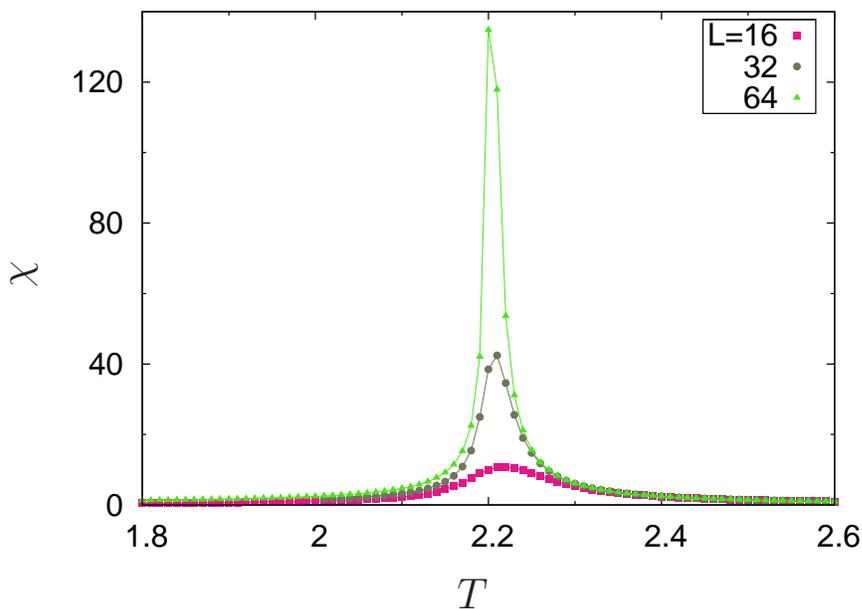


Fig. 2.11: Susceptibilidade magnética para modelo XY tridimensional, Eq. (2.19), em função da temperatura para diferentes tamanhos do sistema. O pico se desloca para esquerda à medida que o tamanho do sistema aumenta. Ao contrário do caso bidimensional, as curvas escalam somente na região crítica.

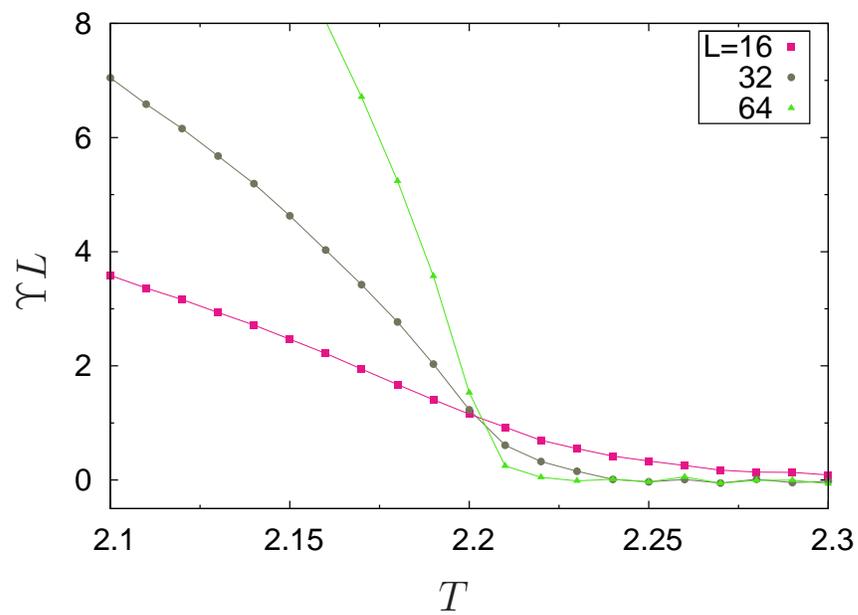


Fig. 2.12: Módulo da helicidade no modelo XY tridimensional, Eq. (2.15), em função da temperatura para diferentes tamanhos do sistema. Em $T_c \simeq 2.203$, a quantidade ΥL independe do tamanho do sistema.

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 Δ , 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. Se $\Delta = 1$ ou $q = 1$, recaímos no modelo XY original. 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 $\bar{\theta}_i = q\theta_i$, recuperamos a simetria original do modelo XY

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

então, a função de partição para os dois modelos será a mesma. Conseqüentemente, teremos a mesma temperatura crítica $T_{KT} \simeq 0.893$ do modelo XY. Dessa maneira, é interessante saber quais são os efeitos de considerar a competição entre os dois termos, ou seja, $0 < \Delta < 1$.

3.1 Caso bidimensional com $q = 2$

Para o Hamiltoniano generalizado (3.1), no caso $q = 2$, o termo nemático favorece tanto spins paralelos quanto antiparalelos, ou seja, defasados por π . Este caso particular foi extensivamente estudado em duas dimensões por diversos autores [28–33, 54]. Os principais resultados são mostrados no diagrama de fases da Fig. 3.1, com os pontos obtidos na Ref. [54]. As linhas separando as fases pseudo-ordenadas

F e **N** da fase paramagnética **P** foram obtidas por meio da helicidade, enquanto a linha separando as fases **F** e **N** foi obtida por meio dos picos no calor específico

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

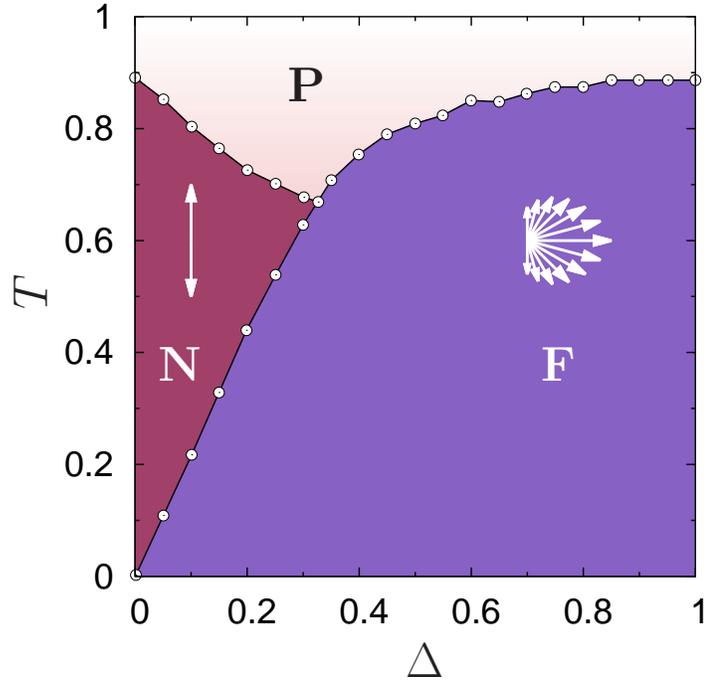


Fig. 3.1: Diagrama de fases para $q = 2$ [54]. Fase **F**, pseudo-ordem ferromagnética. Fase **N**, pseudo-ordem nemática. Fase **P**, paramagnética. Ponto multicrítico em $\Delta \simeq 0.3$. As setas representam as orientações preferenciais dos spins em cada fase.

Para altas temperaturas, na fase paramagnética **P**, o estado de equilíbrio é desordenado. Conforme diminuimos a temperatura, o diagrama se bifurca em duas fases que dependem do valor de Δ . Na região **F**, temos a fase pseudo-ferromagnética do modelo XY convencional e sua transição para a fase **P** pertencendo à classe de universalidade KT¹. Para $\Delta \lesssim 0.3$, surge a 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

¹ Na Ref. [55] há uma reivindicação de que a linha **F-N** se estende para além do ponto multicrítico.

pseudo-nemática, devido à pseudo-ordem de longo 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, porém, ao fazermos uma trajetória englobando um semi-vórtice (semi-anti-vórtice), a soma das diferenças de fase entre os spins será um múltiplo de π ($-\pi$). 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. Na passagem da fase **N** para a **F**, os spins são forçados a se orientar em um dos dois semiplanos, há, portanto, uma quebra na simetria de reflexão e, como consequência, a transição pertence à classe de universalidade Ising 2d. Também existe uma troca no tipo de carga topológica, os pares de vórtices inteiros se desacoplam dando lugar aos pares de semi-vórtices unidos pela parede de domínio. Resultados semelhantes também foram obtidos em simulações na rede triangular [32].

De acordo com as simetrias das possíveis fases do Hamiltoniano (3.1), precisamos generalizar a magnetização, Eq. (2.18), para medir a ordem relevante para cada escolha do parâmetro nemático q e, conseqüentemente, identificar outras possíveis transições de fase. Assim, a magnetização generalizada é dada por

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

e as respectivas susceptibilidades

$$\chi_k = \beta N (\langle m_k^2 \rangle - \langle m_k \rangle^2), \quad (3.5)$$

onde $k = 1, \dots, q$.

Na fase paramagnética, como o sistema é desordenado, $m_1 = m_2 = 0$. Ao entrar na fase **N** com pseudo-ordem nemática, $m_2 \neq 0$, e, devido ao fato de as projeções em cada semiplano se cancelarem, $m_1 = 0$. Diminuindo ainda mais a temperatura, entramos na fase **F**, onde $m_1 \neq 0$ e $m_2 \neq 0$. Ao fazermos FSS nas transições **F-N** e **N-P**, encontramos que $m_{1,2} \propto L^{-1/8}$ e $\chi_{1,2} \propto L^{7/4}$. Nas figuras 3.3 e 3.4, mostramos a magnetização e susceptibilidade para $\Delta = 0.25$. Podemos ver que m_1 tem comportamento característico de uma transição tipo Ising, onde a magnetização cai rapidamente a zero, diferentemente de m_2 que, por ser da classe KT, possui comportamento semelhante à magnetização da figura 2.8.

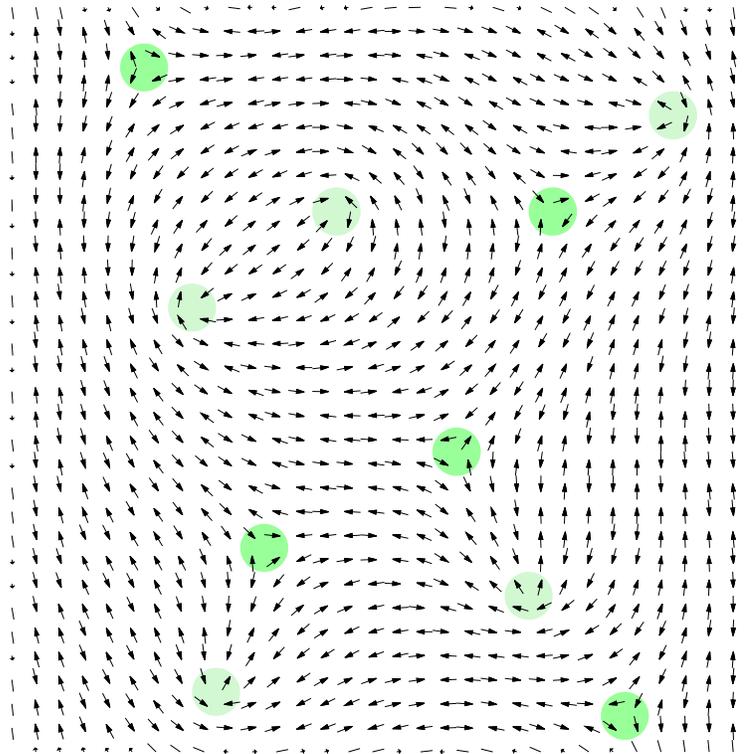


Fig. 3.2: Semi-vórtices (círculos verdes) e semi-antivórtices (círculos verde-claros) para o caso puramente nemático ($\Delta = 0$) com $q = 2$. A configuração foi obtida após um resfriamento para $T = 0$ vindo de $T \rightarrow \infty$, de forma que o sistema ainda encontra-se fora do equilíbrio termodinâmico. De modo análogo aos vórtices-antivórtices que se dissociam na transição **F-P**, o par semi-vórtice e semi-antivórtice se dissocia na transição **N-P**. Observando-se cuidadosamente se pode verificar que paredes de domínio unem os pares de cargas opostas (embora no modelo de Ising 2d as paredes formam caminhos fechados, aqui estão limitadas entre os pares).

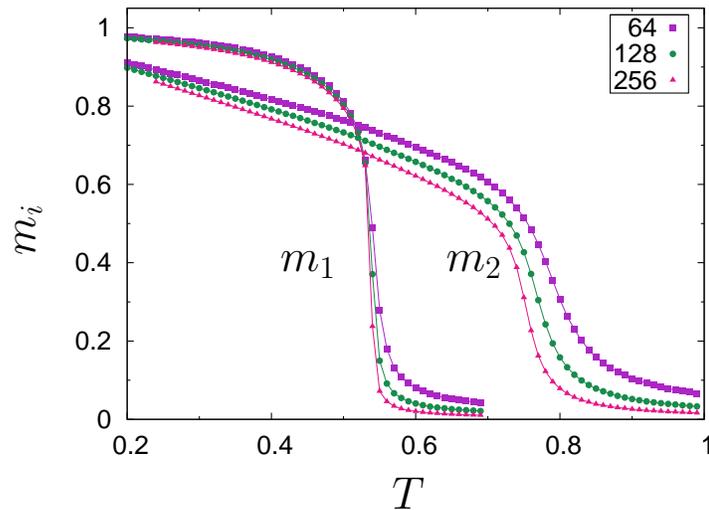


Fig. 3.3: Magnetização para o modelo XY bidimensional generalizado com $q = 2$ e $\Delta = 0.25$. Para a curva m_1 , na transição tipo Ising, temos $T_c \simeq 0.54$, enquanto que para a curva m_2 , na transição tipo KT, temos $T_{KT} \simeq 0.74$.

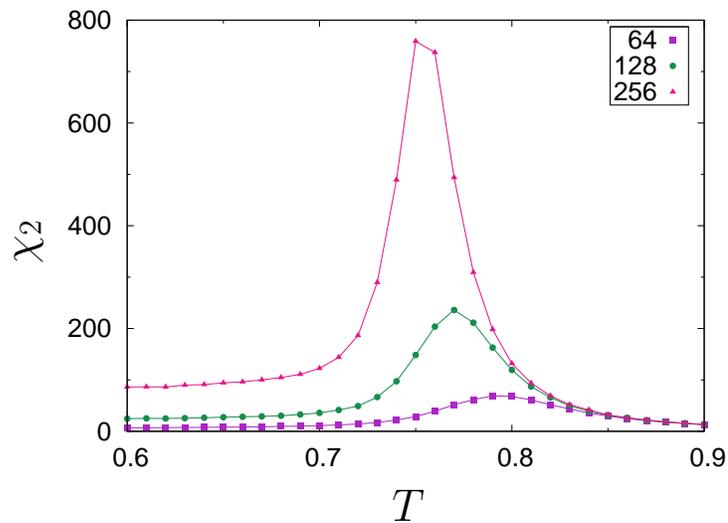


Fig. 3.4: Susceptibilidade correspondente à m_2 para o caso $q = 2$ e $\Delta = 0.25$. Da mesma maneira que χ_1 no modelo XY normal, χ_2 também escala para baixas temperaturas com expoentes não-universais.

3.2 Caso tridimensional com $q = 2$

O diagrama de fases para o caso tridimensional com $q = 2$ pode ser visto na Fig. 3.5. Nas fases **F** e **N**, o sistema possui ordens de longo-alcance ferromagnética e nemática, respectivamente. As transições dessas fases com a paramagnética pertencem à classe de universalidade do modelo XY tridimensional. O diagrama é similar ao caso bidimensional, porém o ponto multicrítico está em $\Delta \simeq 0.4$ e a transição **F-N** pertence à classe de universalidade do modelo de Ising tridimensional [33]. Nos extremos $\Delta = 1$ e $\Delta = 0$ temos a temperatura crítica $T_c \simeq 2.2018$ do modelo XY3d.

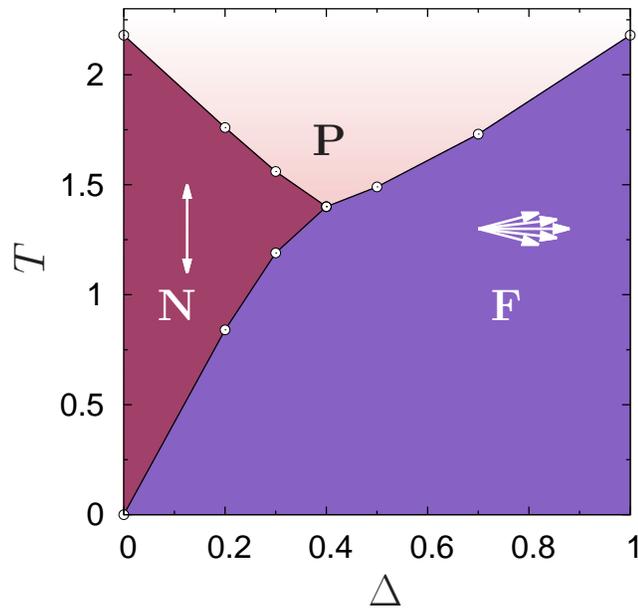


Fig. 3.5: Diagrama de fase para o caso tridimensional com $q = 2$. As linhas foram obtidas através dos picos no calor específico para $L = 16$. O ponto multicrítico ocorre em $\Delta \simeq 0.4$. As setas representam as orientações preferenciais dos spins em cada fase.

3.3 Caso bidimensional com $q = 3$

Recentemente, Poderoso *et al* [35] estudaram o modelo para $q = 3$. Como mostrado na Fig. 3.6, o diagrama de fases esquemático obtido é bastante similar ao caso $q = 2$. Na fase nemática, porém, há uma orientação preferencial entre spins defasados por $\pi/3$ e a transição entre as fases **F** e **N**, ao invés de estar na classe de universalidade

do modelo de Ising 2d, agora pertence à classe de universalidade do modelo de Potts 2d com três estados.

As linhas no diagrama da Fig. 3.6 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 [36] posteriormente removidas com os novos resultados das Refs. [56, 57]. Durante o mestrado [57], nosso objetivo foi dar suporte a essa suposição com uma análise detalhada das transições, utilizando escalonamento de tamanhos finitos bem como os novos resultados fornecidos pela helicidade. Como parte dos resultados, assim como a publicação dos mesmos [58], foram feitos durante o desenvolvimento desta tese, no próximo capítulo mostraremos, portanto, uma síntese dos resultados obtidos para o caso $q = 3$ bidimensional e a extensão dos mesmos para o caso tridimensional.

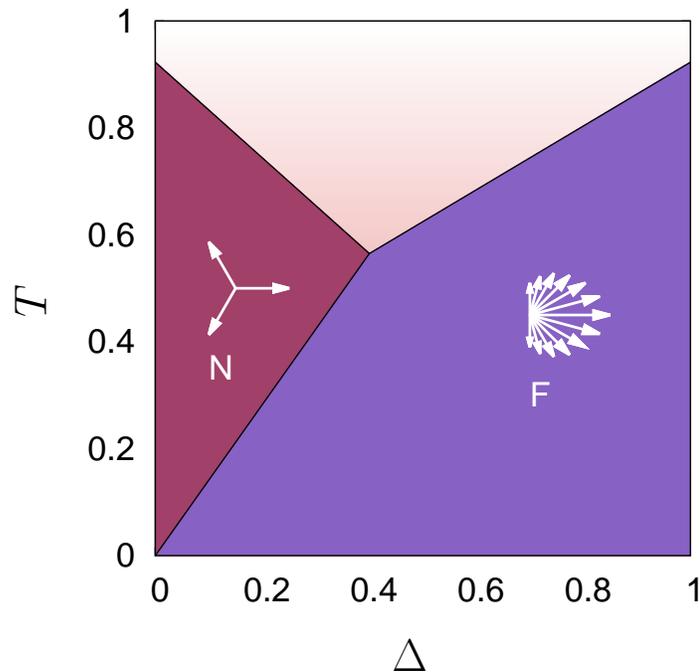


Fig. 3.6: Diagrama de fase esquemático para $q = 3$ [35]. As linhas são apenas guias para os olhos. O ponto multicrítico ocorre em $\Delta \simeq 0.4$. As setas representam as orientações preferenciais dos spins em cada fase.

3.4 Caso bidimensional com $q = 8$

Na Ref. [35], também foi estudado o caso $q = 8$. Em contraste com os casos anteriores, para $q = 8$, o diagrama de fases mostrado na Fig. 3.7 é totalmente diferente. A competição entre os termos ferromagnético e nemático leva à criação de duas novas fases ferromagnéticas \mathbf{F}_1 e \mathbf{F}_2 além da fase ferromagnética usual \mathbf{F} , e o ponto multicrítico se desloca para $\Delta \simeq 0.5$. Na fase \mathbf{N} , há uma pseudo-ordem nemática de longo-alcance com oito direções preferenciais entre os spins. As fases \mathbf{F}_2 , \mathbf{F}_1 e \mathbf{F} possuem pseudo-ordem ferromagnética de longo-alcance, as setas no diagrama Fig. 3.7 dão uma noção de como são as orientações preferenciais entre os spins em cada fase.

Ainda de acordo com a Ref. [35], as transições $\mathbf{N}\text{-}\mathbf{F}_2$ e $\mathbf{F}_2\text{-}\mathbf{F}_1$ foram tidas como pertencentes à classe de universalidade Ising 2d, porém as evidências não foram conclusivas devido aos pequenos tamanhos utilizados nas simulações. Além disso, foi suposto que as transições $\mathbf{UF}\text{-}\mathbf{F}_2$ e $\mathbf{UF}\text{-}\mathbf{F}_1$ pertenceriam à classe de universalidade KT valendo-se do fato de que o escalamento da susceptibilidade dentro dessas fases é não-universal e assume o expoente $\gamma/\nu = 1.75$ exatamente no ponto crítico. Contudo, isso também virou alvo de críticas (as mesmas do caso $q = 3$, Ref. [36]). Portanto, este trabalho também tem por objetivo um estudo detalhado das transições supostamente pertencentes à classe KT por meio da helicidade, o observável mais adequado nesse caso, assim como, para as transições contínuas, fornecer resultados mais precisos e para sistemas maiores que possam confirmar suas classes de universalidade. Ademais, estender os resultados para três dimensões.

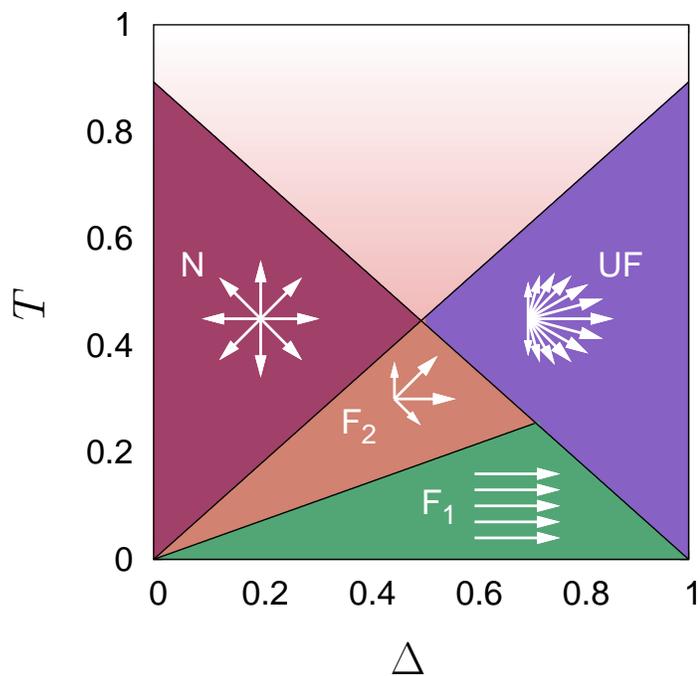


Fig. 3.7: Diagrama de fase esquemático para o caso bidimensional com $q = 8$ [35]. As linhas são apenas guias para os olhos e foram obtidas através dos picos no calor específico. O ponto multicrítico ocorre em $\Delta \simeq 0.5$. As setas representam as orientações preferenciais dos spins em cada fase.

Capítulo 4

Resultados: $q = 3$

Discutiremos neste capítulo os novos resultados encontrados para a helicidade, magnetização e susceptibilidade magnética para o caso $q = 3$ em duas e três dimensões. No caso bidimensional, o objetivo é obter um diagrama de fases mais detalhado e com maior precisão, além de mostrar evidências sólidas quanto à classe de universalidade KT das transições entre as fases pseudo-ordenadas e a paramagnética. Também em três dimensões, obter o diagrama de fases e determinar a natureza de cada transição. Os dados foram obtidos através de métodos de Monte Carlo utilizando o algoritmo de cluster de Wolff [59] e do algoritmo de Metropolis *single-flip* [41], que é menos eficiente neste problema. No intuito de obter resultados para sistemas maiores e com maior precisão, também implementamos o algoritmo de Swendsen-Wang [60] na linguagem CUDA (*Compute Unified Device Architecture*) para simulações em GPU (*Graphics Processing Unit*). Todos os resultados são para a rede quadrada no caso bidimensional e rede cúbica no tridimensional, ambas com condições periódicas de contorno. Os detalhes das simulações e implementações dos algoritmos se encontram no apêndice A.

4.1 Caso bidimensional

Antes de apresentar os resultados para a helicidade, Eq. (2.15), precisamos estendê-la para o modelo XY generalizado. Tomamos as derivadas da energia de ligação entre pares de spins de acordo com o Hamiltoniano 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 Eqs. (2.13) e (2.14), identificamos

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

e

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

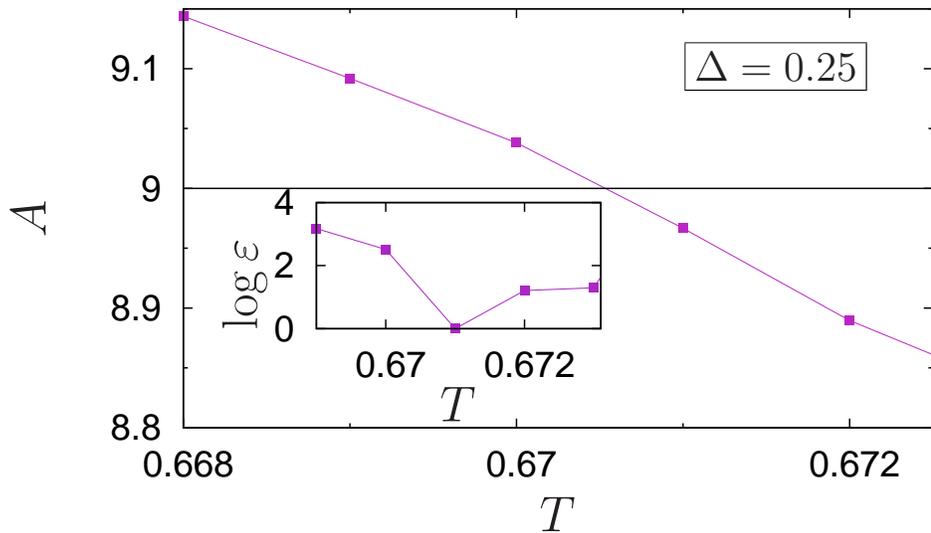


Fig. 4.1: Vorticidade e erro, Eq. (4.7), (no detalhe) como funções da temperatura para $\Delta = 0.25$. O menor erro ocorre em $T = 0.671$, onde $A \simeq 8.966$.

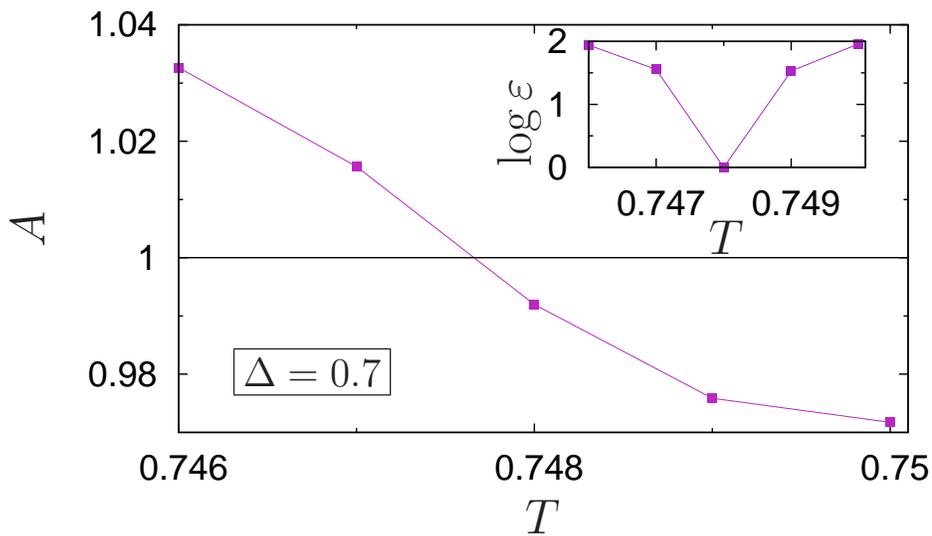


Fig. 4.2: Vorticidade e erro, Eq. (4.7), (no detalhe) como funções da temperatura para $\Delta = 0.7$. O menor erro ocorre em $T = 0.748$, onde $A \simeq 0.992$.

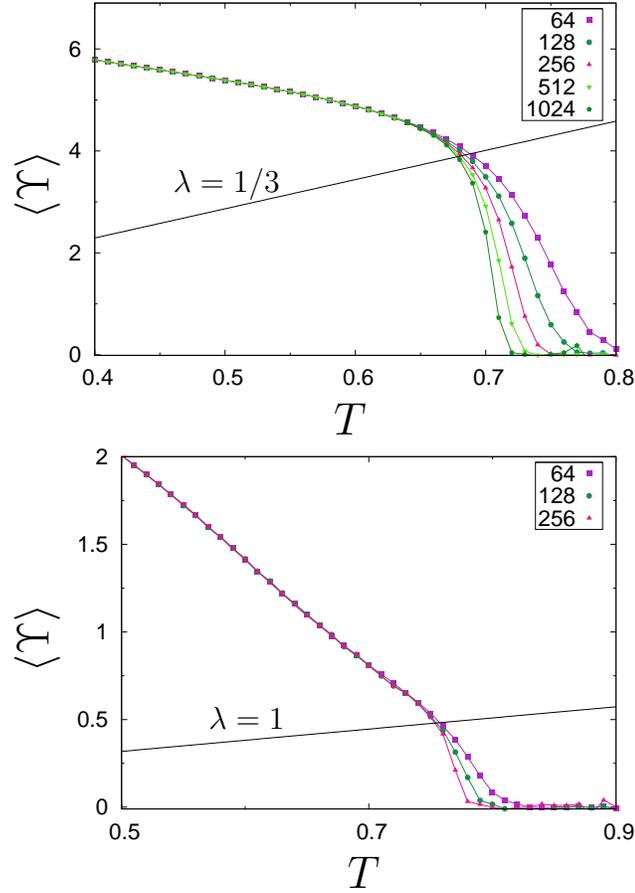


Fig. 4.3: Helicidade em função da temperatura em $\Delta = 0.25$ (acima) e $\Delta = 0.7$ (abaixo) para diferentes tamanhos. As linhas contínuas são $18T/\pi$ (acima) e $2T/\pi$ (abaixo).

Para estimar a temperatura da transição KT do modelo XY generalizado, incluímos um parâmetro adicional à expressão (2.16), como na Ref. [54]. Assim

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

onde o fator λ é chamado de vorticidade e está relacionado com a carga do defeito topológico presente em uma determinada fase. Para $\Delta = 1$ (modelo XY usual), na transição **F-P**, recuperamos a condição do salto universal, Eq. (2.16), 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. (2.16)

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 λ depende da fase em que se encontra o sistema. Para o caso $q = 2$, na Ref. [54], $\lambda = 1/2$ na transição **N-P**, o que está associado ao desacoplamento dos pares semi-vórtices e semi-antivórtices. Assim, na transição **N-P** para $q = 3$, supomos que $\lambda = 1/3$. Na transição **F-P**, independentemente do valor de q , fazemos a suposição de que $\lambda = 1$ devido ao desacoplamento dos vórtices inteiros.

A validade da expressão (4.5) pode ser testada com um parâmetro extra de ajuste na função (2.17)

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

de modo que A nos fornece informações sobre a vorticidade do sistema, ou seja, $A = 1/\lambda^2$. Ao fazer 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 de 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 da vorticidade devido à sua correlação com a temperatura. Isso é evidente nas figuras 4.1 e 4.2, onde temos a vorticidade em função da temperatura para $\Delta = 0.25$ e $\Delta = 0.7$, respectivamente. Também mostramos, no detalhe de cada 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 dos limites da precisão dos dados, os valores da vorticidade estão próximos aos esperados para as transições **N-P** e **F-P**, ou seja, $1/\lambda^2 = 9$ e 1 , respectivamente.

Na Fig. 4.3, mostramos a helicidade como função da temperatura para $\Delta = 0.25$ (acima) e $\Delta = 0.7$ (abaixo). Também incluímos as retas $18T/\pi$ e $2T/\pi$ relacionadas, respectivamente, aos defeitos topológicos com carga $\lambda = 1/3$ e 1 . Conforme o tamanho do sistema aumenta, o ponto de intersecção de cada reta com a helicidade se aproxima assintoticamente da temperatura crítica de cada transição. Embora para um estado fora do equilíbrio, na Fig. 4.4 podemos visualizar os vórtices fracionários com $\lambda = 1/3$.

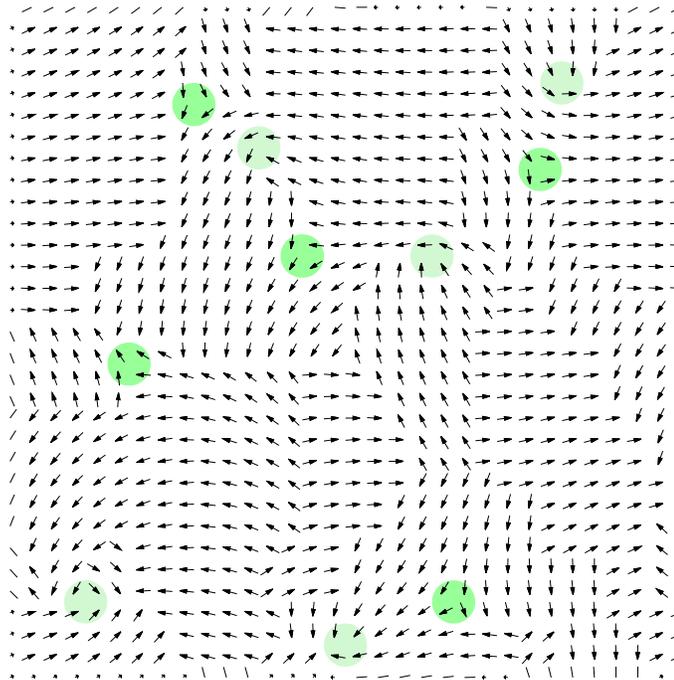


Fig. 4.4: Semi-vórtices (círculos verdes) e semi-antivórtices (círculos verde-claros) para o caso $q = 3$ dentro da fase \mathbf{N} em $\Delta = 0.01$. A configuração corresponde a um estado fora do equilíbrio e foi obtida após um resfriamento vindo de $T \rightarrow \infty$. Há muita semelhança com o caso $q = 2$, porém, agora, os vórtices são formados pelo encontro de três paredes de domínios com diferença de fase de $\pi/3$.

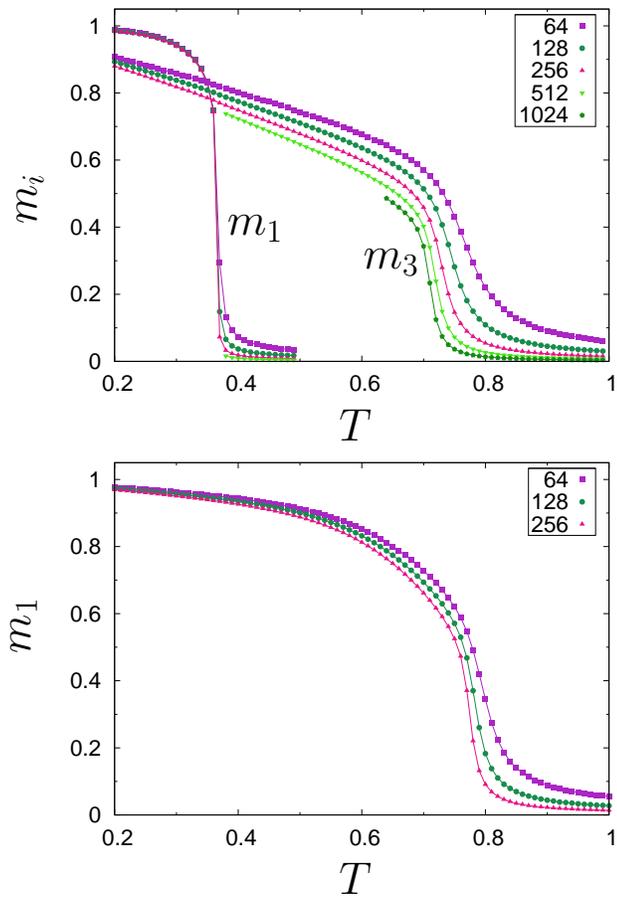


Fig. 4.5: Magnetizações em função da temperatura para as ordens ferromagnética e nemática $\pi/3$ em $\Delta = 0.25$ (acima) e $\Delta = 0.7$ (abaixo) para diferentes tamanhos da rede. As curvas de m_3 mostram a transição **N-P**, enquanto as curvas m_1 mostram as transições **F-N** (acima) e **F-P** (abaixo).

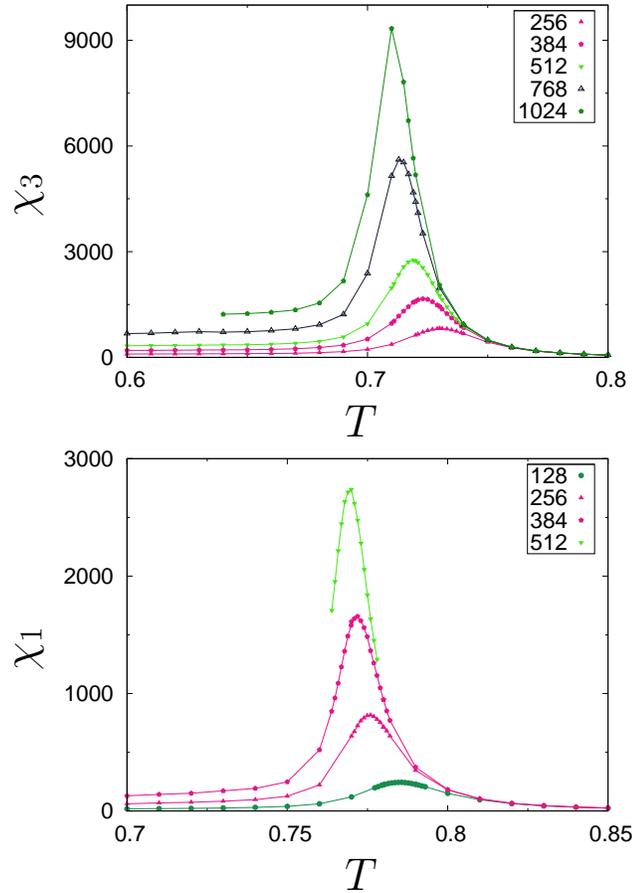


Fig. 4.6: Susceptibilidade magnética em função da temperatura para $\Delta = 0.25$ (acima) e $\Delta = 0.7$ (abaixo) correspondente às magnetizações m_3 e m_1 da Fig. 4.5. Nas transições **N-P** e **F-N**, $\chi_3 \sim L^{1.755}$ e $\chi_1 \sim L^{1.745}$, respectivamente. Note que abaixo de T_{KT} também há escalamento, mas com expoentes não-universais.

Agora analisaremos os resultados obtidos para magnetização e susceptibilidade, assim como seus comportamentos na transição com a obtenção dos expoentes críticos via FSS. Na figura 4.5, são mostradas as magnetizações m_1 e m_3 em função da temperatura para $\Delta = 0.25$ (acima) e $\Delta = 0.7$ (abaixo).

Em $\Delta = 0.25$, conforme a temperatura diminui, o sistema passa por duas transições: a primeira, da fase desordenada **P** para a nemática **N** em $T_c \simeq 0.692$, sinalizada por m_3 , que mede a ordem nemática entre spins defasados por $\pi/3$ ou paralelos, a segunda, da nemática **N** para a ferromagnética **F** em $T_c \simeq 0.756$, sinalizada por m_1 , que mede a ordem ferromagnética.

Na figura 4.6, vemos as susceptibilidades correspondentes à m_3 em $\Delta = 0.25$ (acima) e à m_1 (abaixo) para diferentes tamanhos. Conforme aumentamos o tamanho do sistema, a posição do pico tende ao valor da temperatura crítica e a altura do pico diverge no limite termodinâmico. Além disso, como acontece na figura 2.9, a susceptibilidade também diverge para todas temperaturas abaixo de T_{KT} , mas com expoentes não-universais.

Podemos determinar o expoente crítico da magnetização na transição medindo, para cada tamanho, seu valor na temperatura correspondente ao pico da respectiva susceptibilidade e, então, aplicamos as relações de escalonamento finito, Eq. (2.3). Para m_3 , na transição **N-P**, temos que $\beta/\nu = 0.128 \pm 0.006$, lembrando que o valor exato é $1/8 = 0.125$. Para m_1 , na transição **F-P**, temos $\beta/\nu = 0.131 \pm 0.005$.

Da mesma forma, podemos encontrar o expoente crítico para susceptibilidade tomando seu valor no pico para cada tamanho e aplicando as relações (2.3). Para χ_3 , na transição **N-P**, encontramos que $\gamma/\nu = 1.755 \pm 0.002$, lembrando que o valor exato é $7/4 = 1.75$. Para χ_1 , na transição **F-P**, temos que $\gamma/\nu = 1.745 \pm 0.001$. Os detalhes da obtenção dos expoentes, assim como as temperaturas de transição, podem ser encontrados na Ref. [57].

Os expoentes críticos nas duas transições das fases pseudo-ordenadas com a paramagnética são consistentes com a classe de universalidade KT. A incerteza nos expoentes 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 o valor das medidas. Já no segundo caso, o sistema demora mais tempo a chegar no estado de equilíbrio, então, o tempo de simulação é o fator limitante. Além disso, na obtenção de β/ν , 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 [42], aqui desconsideradas. Porém, como a helicidade é uma evidência forte na confirmação da classe KT das transições **F-P** e **N-P**, as pequenas discrepâncias aqui apresentadas correspondem apenas à dificuldade em obter boas medidas nas simulações.

Na figura 4.7, 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 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 vórtices semi-inteiros com vorticidade $\lambda = 1/3$. Construímos a linha **N-F** tomando a temperatura crítica dos picos na susceptibilidade χ_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. 3.6, estava es-

sencialmente correto. O ponto multicrítico está próximo a $\Delta = 0.4$, mas nossos resultados não permitem localizá-lo com precisão. A linha tracejada mostra o limite inferior para a transição KT. Como demonstrado na Ref. [61], a temperatura crítica é uma função monotônica dos parâmetros de acoplamento dos termos ferromagnético e nemático, e 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 . Olhando para o diagrama 4.7 vemos, então, que nenhuma das transições viola a condição acima. Além disso, um fato interessante é a linha de transição **N-P** estar bem próxima à linha da condição (4.8), porém o mesmo não acontece na transição **F-P**. Esse resultado também é verificado para $q = 2$, no diagrama 3.1.

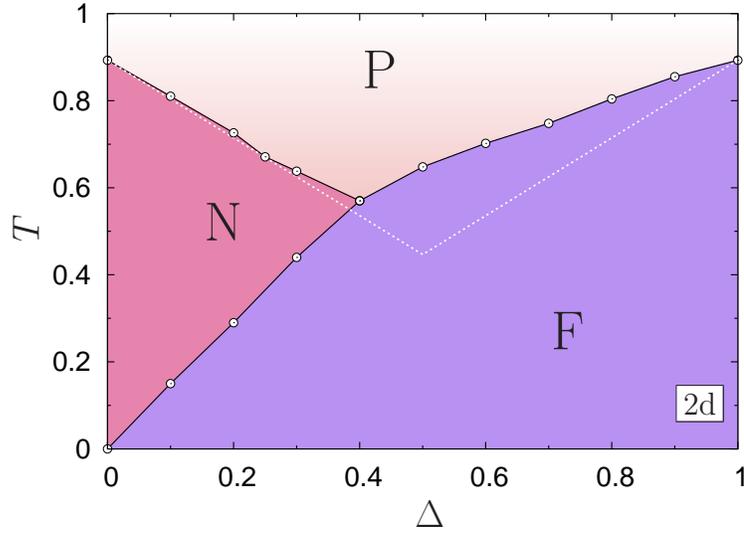


Fig. 4.7: Diagrama de fase obtido com os novos resultados [62]. O ponto multicrítico ocorre em $\Delta \simeq 0.4$. A linha pontilhada, Ref. [61], fornece o limite inferior para a transição, Eq. (4.8).

4.2 Caso tridimensional

Na Fig. 4.8 mostramos o diagrama de fases para o modelo XY em três dimensões para $q = 3$. Em comparação com o caso bidimensional, o diagrama possui a mesma estrutura, porém o ponto multicrítico agora está nas proximidades de $\Delta = 0.5$. A fase **F**

possui ordem ferromagnética enquanto a fase **N** possui ordenamento nemático, ambos de longo-alcance. As transições dessas fases para a paramagnética são contínuas e pertencem à classe de universalidade 3dXY. A transição entre as duas fases ordenadas (**F** e **N**) é descontínua, assim como a transição no modelo de Potts com três estados tridimensional [63].

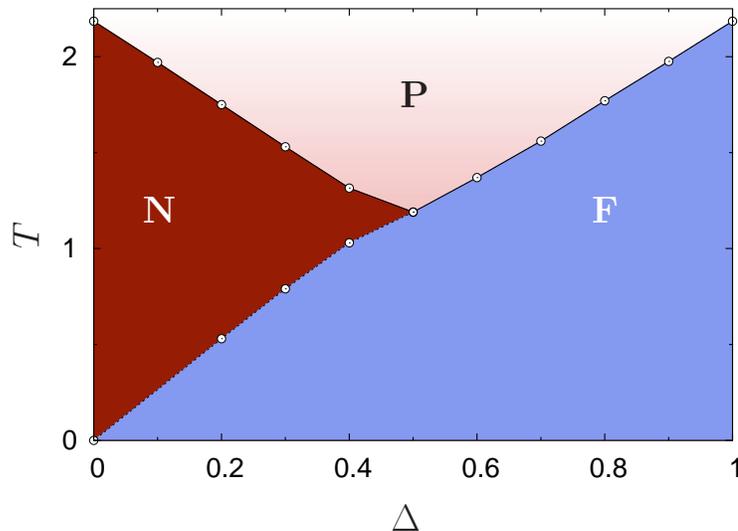


Fig. 4.8: Diagrama de fases para o modelo XY tridimensional com $q = 3$ [64]. Os pontos foram obtidos tomando o pico do calor específico para $L = 20$. O ponto multicrítico ocorre em $\Delta \simeq 0.5$. A linha tracejada **N-P** mostra uma transição descontínua.

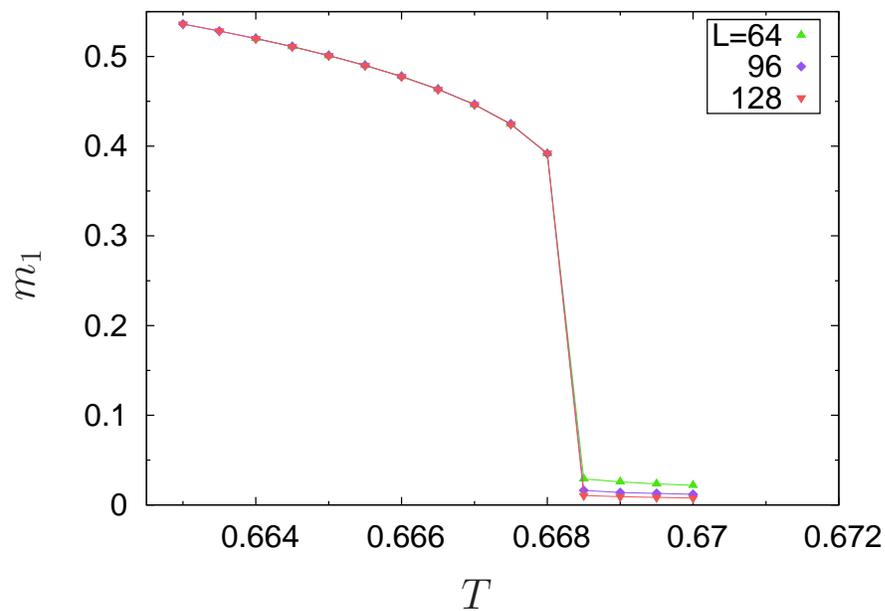


Fig. 4.9: Magnetização m_1 em função da temperatura na transição **F-N** em $\Delta = 0.25$ para diferentes tamanhos. No ponto de coexistência $T \simeq 0.668$, há um salto descontínuo para todos tamanhos. Note o pequeno intervalo de temperaturas.

Pode ser visto na Fig. 4.9 o comportamento da magnetização (m_1), a qual responde à ordem ferromagnética, para diferentes tamanhos na transição da fase **F** para **N**. À medida que aquecemos o sistema, há uma queda descontínua na magnetização em $T \simeq 0.668$, indicando uma transição descontínua.

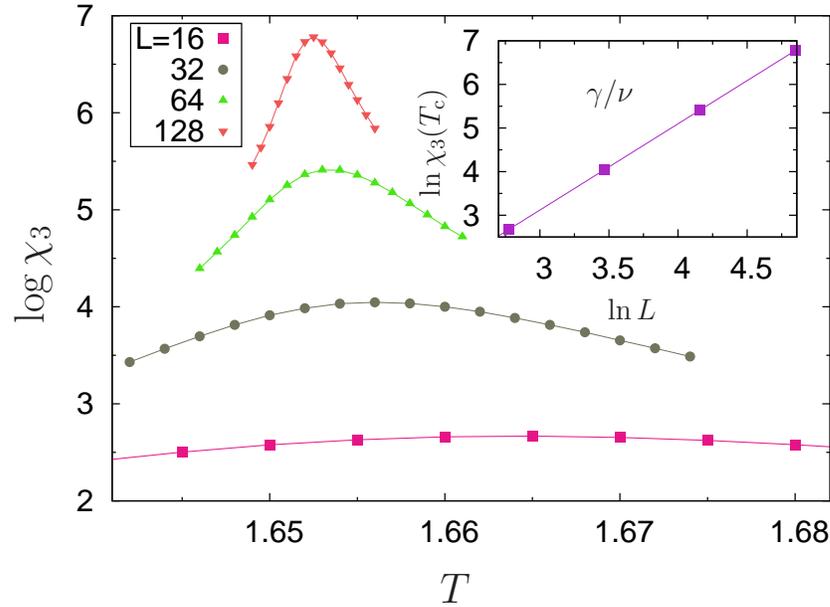


Fig. 4.10: Susceptibilidade magnética respectiva à m_3 em função da temperatura na transição **F-N** em $\Delta = 0.25$. No detalhe mostramos o comportamento do pico na transição: $\chi_3(L) \sim L^{1.977(3)}$. Note a escala logarítmica.

O comportamento da susceptibilidade em função da temperatura pode ser visto na Fig. 4.10 para a transição da fase nemática à paramagnética. O detalhe mostra o valor de $\chi_3(T_c)$ em função do tamanho do sistema. Ajustando os dados com a reta $\log \chi_3 = a \log L + b$, determinamos o expoente crítico γ/ν através de sua inclinação. No caso, encontramos $\gamma/\nu \simeq 1.977 \pm 0.003$. Apesar da pequena discrepância, um valor consistente com a classe de universalidade do modelo XY tridimensional. Também podemos estimar a temperatura crítica assintótica através do ajuste dos dados com a função $T(L) = aL^b + T_c$. Para a transição N-P, encontramos $T_c \simeq 1.652 \pm 0.001$.

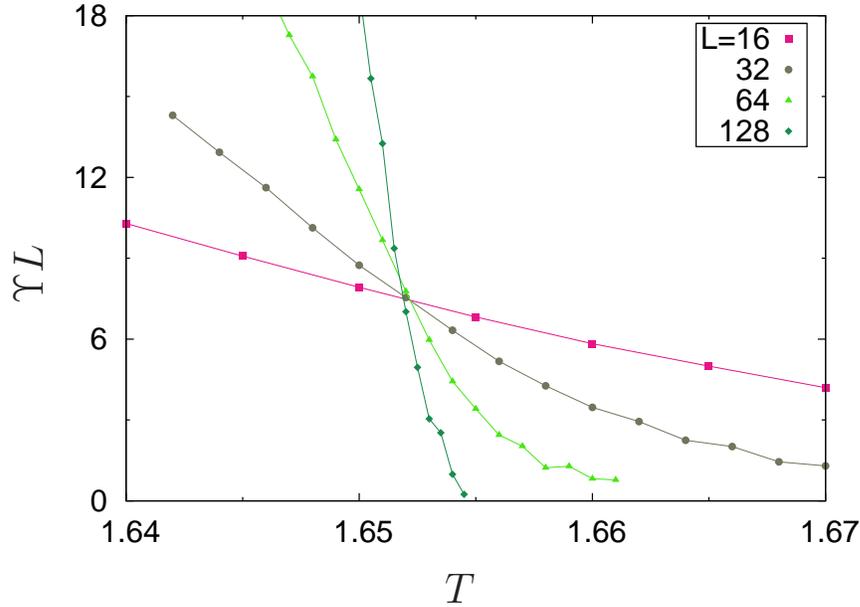


Fig. 4.11: Helicidade *vs* temperatura para 3dXY com $q = 3$ na transição **F-N** em $\Delta = 0.25$. As curvas para diferentes tamanhos se interseccionam em $T_c \simeq 1.652 \pm 0.0005$.

Na Fig 4.11 temos a helicidade reescalada em função da temperatura para $\Delta = 0.25$ e diferentes tamanhos. Lembrando que $\Upsilon(T, L)L$ deve ser independente do tamanho do sistema no ponto crítico. Observamos que as curvas para diferentes tamanhos de fato se cruzam em $T_c \simeq 1.652 \pm 0.0005$ na transição **N-P**. Portanto, em concordância com o resultado obtido pela susceptibilidade, assim como a confirmação da classe 3dXY dessa transição. Como já esperamos que a transição **F-P** pertença à classe de universalidade XY3d, omitimos os resultados para ela.

4.3 Conclusões

Estudamos, neste capítulo, o caso particular em que o Hamiltoniano (3.1) possui o termo nemático $q = 3$ em duas e três dimensões. Resultados anteriores obtidos por Poderoso *et al* [35] não foram conclusivos quanto à qual classe de universalidade pertenceriam as transições entre as fases com pseudo-ordem e a desordenada. Com resultados mais precisos e tamanhos de rede maiores, coube à primeira parte deste trabalho clarificar estas questões. 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. Também recuperamos, dentro de uma pequena margem de erro, os expoentes críticos β/ν e γ/ν 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. Na Ref. [57], são encontrados evidências adicionais para o cumulante de Binder [65] e helicidade de quarta ordem que, somadas às apresentadas aqui, constituem sólidas evidências a favor da classe de universalidade ser Kosterlitz-Thouless das transições entre as fases pseudo-ordenadas com a paramagnética. Colocando em xeque, portanto, argumentos contrários à existência de tais transições [36].

Vimos que o diagrama de fases em três dimensões possui a mesma estrutura que o caso 2d com leves diferenças. A transição entre as fases ordenadas é de primeira ordem como indicado pela descontinuidade na magnetização, similarmente à transição do modelo de Potts tridimensional com três estados. Na transição entre a fase nematicamente ordenada com a desordenada, por meio de escalonamento de tamanhos finitos, recuperamos o expoente γ/ν do modelo XY tridimensional e, além disso, encontramos a temperatura crítica por meio do reescalamo da helicidade.

Capítulo 5

Resultados: $q = 8$

Mostraremos, neste capítulo, os resultados para susceptibilidade magnética, helicidade e cumulante de Binder para o caso $q = 8$ em duas e três dimensões. Procuramos esclarecer, com evidências sólidas, as classes de universalidade das transições presentes no diagrama 3.7, além de estendê-lo para o caso tridimensional e descobrir a quais classes de universalidade suas transições pertencem.

5.1 Caso bidimensional

Para auxiliar na visualização das transições de fases descritas a seguir, na Fig. 5.1 pode ser visto o novo diagrama de fases para o caso $q = 8$, que é essencialmente o mesmo que o anterior 3.7 obtido por Poderoso *et al* [35], porém mais detalhado com pontos obtidos através dos picos na susceptibilidade magnética. Começamos a descrição de cada transição através da helicidade, mostrando na sequência, resultados para a susceptibilidade magnética e cumulante de Binder.

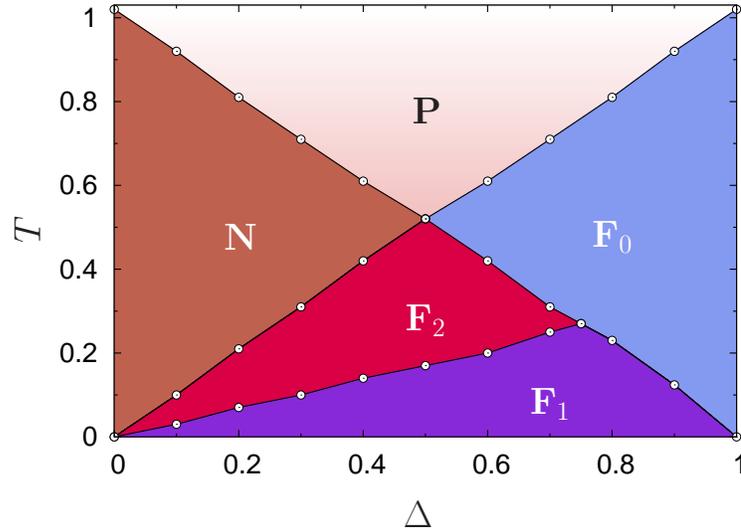


Fig. 5.1: Diagrama de fases para o modelo XY bidimensional generalizado, com $q = 8$ [64]. Os pontos foram obtidos com os picos na susceptibilidade magnética.

Na Fig. 5.2 mostramos a helicidade como função da temperatura ao longo da linha $\Delta = 0.2$ para diferentes tamanhos. Nas proximidades da transição **N-P**, a helicidade decai a zero devido à dissociação dos pares vórtices-antivórtices fracionários. Como, em geral, a carga topológica na fase **N** é $\lambda = 1/q$, a carga topológica para o caso $q = 8$ é $\lambda = 1/8$. Desse modo, o ponto crítico é dado pelo cruzamento da helicidade com a reta $2T/\lambda^2\pi$, sendo $T_{\text{KT}}(0.2) \simeq 0.725$. Esta transição com carga fracionária ocorre para toda região $\Delta < \Delta_{\text{mult}}$. Apesar de não ser visível com a escala logarítmica da Fig. 5.2, no entorno da transição **F₂-N** em $T_c \simeq 0.2$, existe uma pequena perturbação no valor da helicidade. Há um decréscimo devido à contribuição energética da união entre vórtices-antivórtices inteiros que se desfaz. Porém, como a Eq (2.11) é dominada pelo termo q^2 , essa diminuição é quase imperceptível.

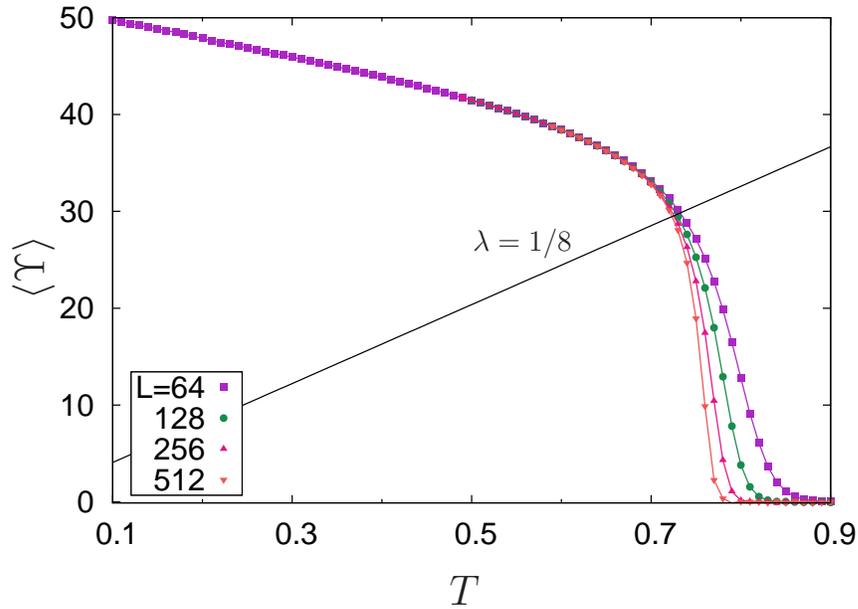


Fig. 5.2: Helicidade em função da temperatura em $\Delta = 0.2$ para diferentes tamanhos. O ponto de cruzamento da helicidade com a reta $2T/\lambda^2\pi$ onde $\lambda = 1/8$ representa a transição **N-P**.

Na Fig. 5.3, pode ser vista a helicidade em função da temperatura para $\Delta = 0.6$. À medida que a temperatura aumenta, a helicidade passa por dois abruptos decréscimos. O primeiro, no entorno da transição $\mathbf{F}_2\text{-}\mathbf{F}_0$ em $T_{\text{KT}}(0.6) \simeq 0.359$, está relacionado à dissociação de vórtices fracionários com carga $\lambda = 1/8$. O segundo, no entorno da transição $\mathbf{F}_0\text{-}\mathbf{P}$ em $T_{\text{KT}}(0.6) \simeq 0.543$, está relacionado à dissociação de vórtices inteiros com carga $\lambda = 1$. É importante notar que ambos os saltos dependem do tamanho do sistema, como esperado para transições na classe de universalidade KT. Ajustando a helicidade no entorno da transição $\mathbf{F}_2\text{-}\mathbf{F}_0$ por meio da Eq. (4.6), encontramos $T_c \simeq 0.359$ e $A = 63.825$ como sendo os parâmetros que minimizam o erro quadrático da Eq. (4.7), o que é mostrado na Fig. 5.4. Apesar das flutuações, o erro é quatro ordens de grandeza menor na região no entorno de T_{KT} . A vorticidade está muito próxima de 64, o que indica, portanto, que a transição é guiada pela dissociação de vórtices com carga $1/8$.

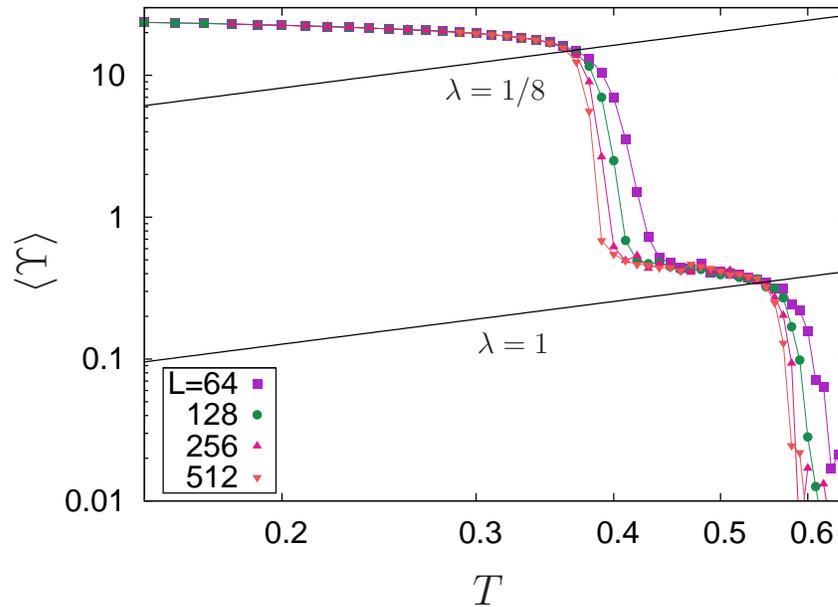


Fig. 5.3: Helicidade *vs* temperatura em $\Delta = 0.6$. Os pontos de cruzamento das retas $2T/\lambda^2\pi$ com $\lambda = 1$ e $1/8$ com a helicidade representam, respectivamente, as transições $\mathbf{F}_2\text{-}\mathbf{F}_0$ e $\mathbf{F}_0\text{-}\mathbf{P}$. Note que $\langle \Upsilon \rangle$ é dependente do tamanho do sistema em ambos os saltos.

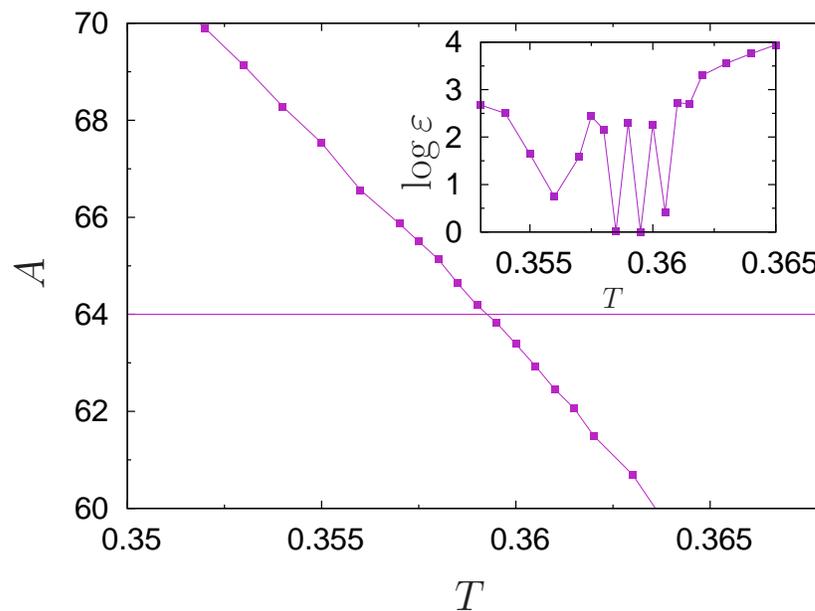


Fig. 5.4: Vorticidade e , no detalhe, o correspondente erro, Eq. (4.7), como funções da temperatura para $\Delta = 0.6$. O ponto em que A cruza a linha no valor 64 é compatível com a região em que encontramos o erro mínimo em $T = 0.3595$. Note a reduzida escala de temperatura.

Para $\Delta = 0.8$, Fig. 5.5, temos a helicidade em função da temperatura para diferentes tamanhos. Dois saltos podem ser vistos à medida que a temperatura aumenta. O primeiro, no entorno da transição $\mathbf{F}_1\text{-}\mathbf{F}_0$ em $T_c \simeq 0.226$, está relacionado à dissociação de vórtices fracionários. O segundo, nas proximidades da transição $\mathbf{F}_0\text{-}\mathbf{P}$ em $T_{\text{KT}} \simeq 0.724$, relacionando ao desligamento de vórtices inteiros com carga $\lambda = 1$. Ao contrário do caso $\Delta = 0.6$, o salto na helicidade na transição $\mathbf{F}_1\text{-}\mathbf{F}_0$ não depende do tamanho do sistema. Essa ausência de dependência, mesmo para redes acima de $L = 512$, é uma indicação de que esta transição não pertence à classe de universalidade KT. Informações adicionais são apresentadas na Fig 5.6, onde temos a helicidade de quarta ordem Eq. (2.12) como função da temperatura. Note que devido ao fato de ser um parâmetro de ordem mais alta e estar em escala logarítmica, as flutuações são elevadas. É esperado que a quantidade $\langle L^2 \Upsilon_4 \rangle$ divirja em T_{KT} [44]. Porém, o que encontramos é que $\langle L^2 \Upsilon_4 \rangle$ escala com o tamanho unicamente na transição $\mathbf{F}_0\text{-}\mathbf{P}$, enquanto na transição $\mathbf{F}_1\text{-}\mathbf{F}_0$, para as redes utilizadas, não aparenta depender do tamanho do sistema.

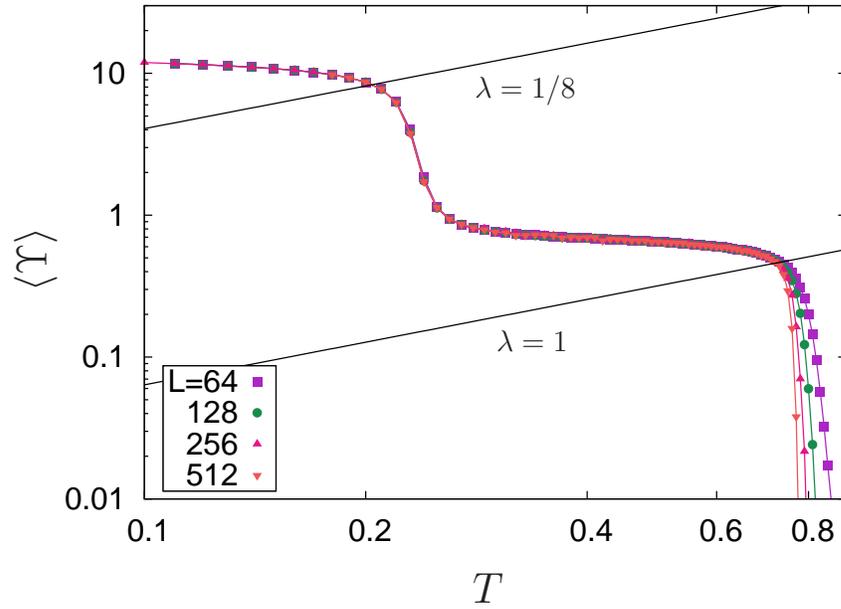


Fig. 5.5: Helicidade em função da temperatura em $\Delta = 0.8$. Os pontos de cruzamento das retas $2T/\lambda^2\pi$ com $\lambda = 1$ e $1/8$ com a helicidade representam, respectivamente, as transições $\mathbf{F}_1\text{-}\mathbf{F}_0$ e $\mathbf{F}_0\text{-}\mathbf{P}$. Ao contrário da Fig. 5.3, $\langle \Upsilon \rangle$ depende do tamanho do sistema apenas no salto relativo à transição $\mathbf{F}_0\text{-}\mathbf{P}$.

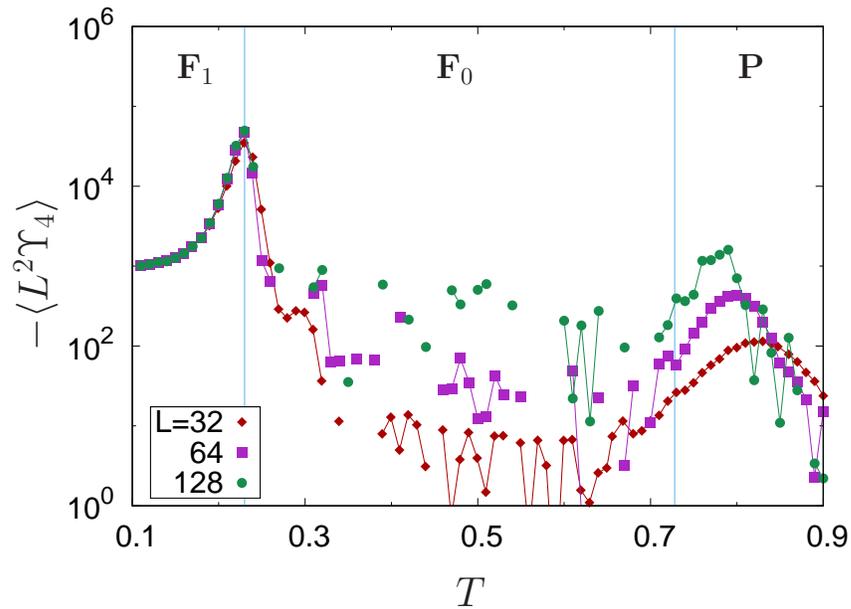


Fig. 5.6: Helicidade de quarta ordem para $\Delta = 0.8$. Importante notar que na transição $\mathbf{F}_0\text{-}\mathbf{F}_1$ as curvas não escalam com o tamanho do sistema, enquanto em toda fase \mathbf{F}_0 há tal dependência.

Temos na Fig. 5.7 as densidades de vórtices ($\lambda = 1$) e vórtices fracionários ($\lambda = 1/8$) em função da temperatura para $\Delta = 0.2$ (painel superior), $\Delta = 0.6$ (intermediário) e $\Delta = 0.8$ (inferior). Para $\Delta > \Delta_{mult}$, nas transições $\mathbf{F}_2\text{-}\mathbf{F}_0$ e $\mathbf{F}_1\text{-}\mathbf{F}_0$, apenas os vórtices fracionários se desacoplam e a helicidade decresce a um pequeno valor correspondente aos vórtices inteiros, então, à medida que a temperatura aumenta, os vórtices inteiros também se desacoplam e a helicidade cai a zero na transição $\mathbf{F}_0\text{-}\mathbf{P}$. Isso pode ser verificado nos saltos consecutivos na helicidade nas Figs. 5.3 e 5.5. Para $\Delta < \Delta_{mult}$, ocorre o oposto, os vórtices inteiros se desacoplam na linha de transição $\mathbf{F}_2\text{-}\mathbf{N}$ onde a helicidade tem uma pequena diminuição, aumentando a temperatura, os vórtices fracionários se desacoplam na transição $\mathbf{N}\text{-}\mathbf{P}$ e a helicidade vai a zero. Porém, como o fator q^2 é dominante na helicidade, o desacoplamento dos vórtices inteiros é quase imperceptível. Somado a isso, por não haver o desacoplamento de cargas na transição $\mathbf{F}_2\text{-}\mathbf{F}_1$, a helicidade não parece sofrer nenhum efeito ao atravessá-la. Portanto, essa transição aparentemente não pertence à classe de universalidade KT. Na Fig. 5.8 podemos visualizar os vórtices fracionários¹ para $q = 8$ em um estado transiente.

¹ À medida que q aumenta, os vórtices fracionários se tornam cada vez mais complexos, sua possível identificação se dá através da generalização, Eq. (B.7), da soma Eq. (B.2).

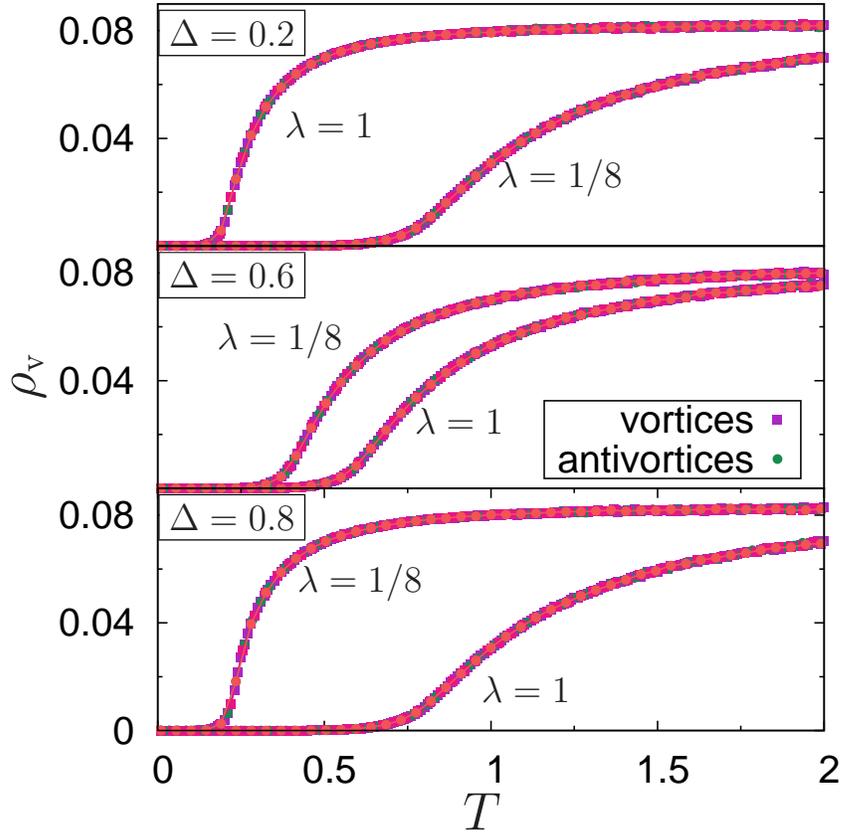


Fig. 5.7: Densidade de vórtices-antivórtices ($\lambda = 1$) e vórtices-antivórtices fracionários ($\lambda = 1/8$) em função da temperatura em $\Delta = 0.2$ (painel superior), $\Delta = 0.6$ (intermediário) e $\Delta = 0.8$ (inferior) para $L = 64$. O comportamento ρ_v é independente do tamanho e da vorticidade (positiva ou negativa).

Desse modo, tendo mostrado evidências de que as transições $\mathbf{N-F}_2$, $\mathbf{F}_2-\mathbf{F}_1$ e $\mathbf{F}_1-\mathbf{F}_0$ não pertencem à classe de universalidade KT, descreveremos, agora, as propriedades dessas linhas contínuas analisando os resultados para a susceptibilidade.

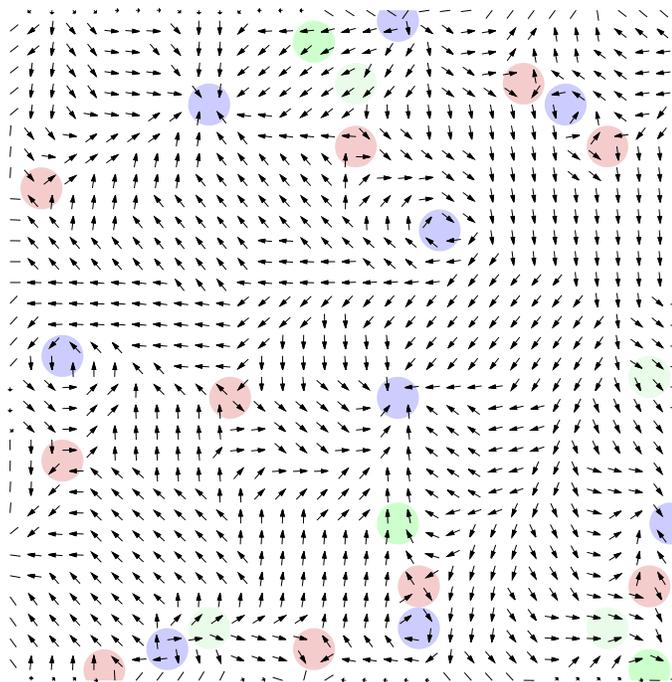


Fig. 5.8: Vórtices (círculos vermelhos), antivórtices (círculos azuis), vórtices fracionários (círculos verdes) e antivórtices fracionários (círculos verde-claros) para o caso $q = 8$ dentro da fase **N** em $\Delta = 0.1$. A configuração corresponde a um estado fora do equilíbrio após um resfriamento infinito vindo de $T \rightarrow \infty$.

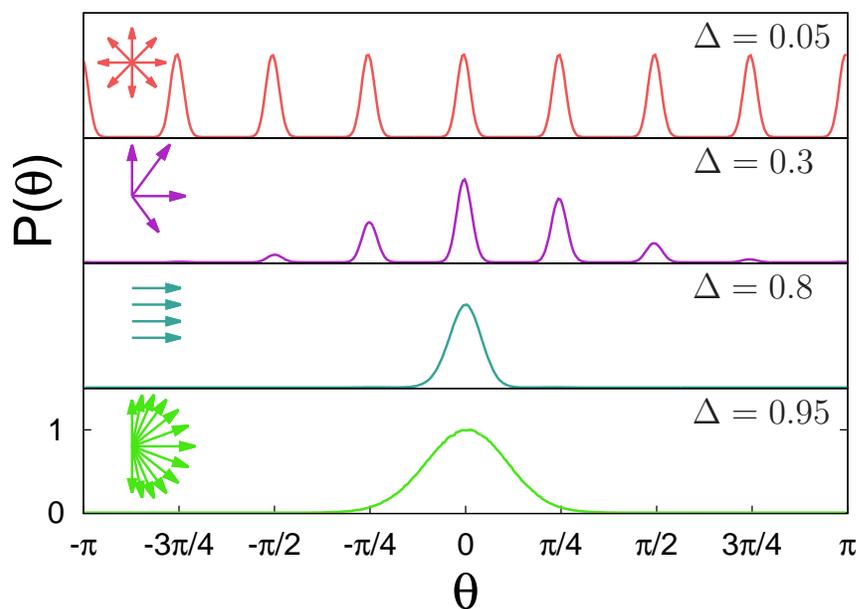


Fig. 5.9: Distribuição angular para as quatro fases ao longo da linha com temperatura fixa $T = 0.15$.

Para auxiliar na descrição das transições, assim como na escolha da magnetização m_k mais adequada para caracterizar uma determinada fase, na Fig. 5.9 mostramos a distribuição angular dos spins para cada fase ordenada ao longo da linha com temperatura constante $T = 0.15$. Na fase **N**, temos $m_8 \neq 0$ e $m_1 = 0$, pois os spins se orientam em oito direções preferenciais simétricas dispostas sobre um círculo como pode ser visto pelos oito picos no painel superior da Fig. 5.9. Já na fase **F₂**, apenas quatro direções (relevantes) permanecem, todas sobre o mesmo semicírculo, a soma dessas projeções faz com que m_1 seja não-nula. Logo, há uma quebra na simetria de reflexão e, conseqüentemente, esperamos que a transição **F₂-N** pertença à classe de universalidade Ising 2d. Na Fig. 5.10, temos χ_1 como função da temperatura em $\Delta = 0.35$ para diferentes tamanhos do sistema. Tomando o valor de $\chi_1(L)$ na temperatura crítica e aplicando FSS, como mostrado na caixa, encontramos o expoente $\gamma/\nu \simeq 1.753$, consistente, de fato, com uma transição tipo Ising.

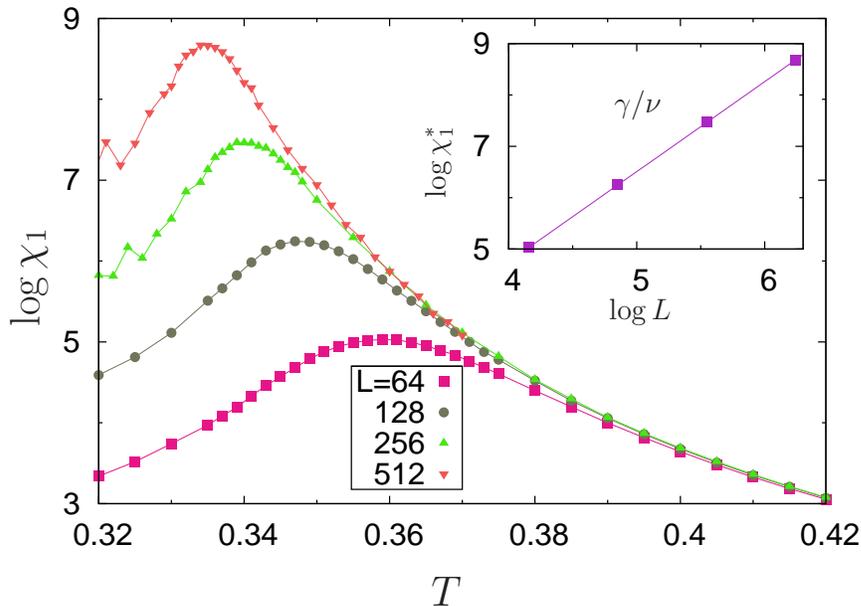


Fig. 5.10: Susceptibilidade magnética respectiva à m_1 vs temperatura em $\Delta = 0.35$ para diferentes tamanhos. O detalhe mostra como a altura do pico da susceptibilidade cresce na transição **N-F₂**, fornecendo a razão dos expoentes γ/ν : $\chi_1^*(L) \sim L^{1.753}$.

Para $\Delta > 0.5$, ocorre o oposto do descrito acima. Quando o sistema entra em **F₀** vindo da fase paramagnética, devido ao pseudo-ordenamento ferromagnético, $m_1 \neq 0$ e $m_8 = 0$. Contudo, é importante notar que m_8 também é sensível à pseudo-ordem

ferromagnética, pois teríamos $m_8 = 1$ com todos os spins paralelos no caso particular $T = 0$. O que impede m_8 de ser não-nula na fase \mathbf{F}_0 é a largura da distribuição dos spins, como mostrado na Fig. 5.9 para $\Delta = 0.95$ ^{2 3}. Desse modo, m_8 é não-nulo na fase \mathbf{F}_1 . Nas Figs. 5.11 e 5.12 são mostradas as susceptibilidades relativas à m_8 como funções da temperatura em $\Delta = 0.6$ e 0.8 , respectivamente. Na transição \mathbf{F}_2 - \mathbf{F}_0 , embora já tenham sido apresentadas evidências de estar na classe KT por meio da helicidade, aplicando FSS nos dados de $\chi_8(L)$, como mostrado no detalhe da Fig. 5.11, obtemos o expoente $\gamma/\nu \simeq 1.750 \pm 0.005$. Portanto, uma evidência adicional quanto à sua classe KT. Por ainda não ser exatamente determinado o valor de Δ onde termina a linha de transição KT entre as fases \mathbf{F}_2 e \mathbf{F}_0 e passa a ser a linha de transição contínua entre as fases \mathbf{F}_1 - \mathbf{F}_0 , o expoente γ/ν apresenta fortes efeito de tamanho finito nessa região multicrítica. Na transição \mathbf{F}_1 - \mathbf{F}_0 em $T_c \simeq 0.21 \pm 0.03$, obtemos $\gamma/\nu \simeq 1.43 \pm 0.05$ quando utilizamos os três maiores tamanhos ($L = 256, 512, 1024$). Apesar de o expoente crescer à medida que tomamos sistemas cada vez maiores, ainda dista do valor esperado para uma transição tipo Ising.

² Em um estado verdadeiramente ferromagnético ($m = 1$), se criarmos 7 cópias de cada spin θ_i ($\theta_i + \pi/8, \theta_i + 2\pi/8, \dots, 7\pi/8$), temos um estado verdadeiramente nemático e $m_8 = 1$. Mas se fizermos isso com a configuração que deu origem à Fig. 5.9, com $\Delta = 0.95$, ao incluir as 7 cópias de cada spin, terminamos com uma ocupação uniforme ao redor do círculo, ou seja, um estado paramagnético ($m_8 = 0$)

³ Na Ref. [31] foi estudado o caso $q = 2$ com um termo “anti-alinhamento” (em analogia com antiferromagnético), ou seja, há um favorecimento de spins defasados por $\pi/2$ que, no caso $q = 2$ usual, seria a orientação menos energeticamente favorável.

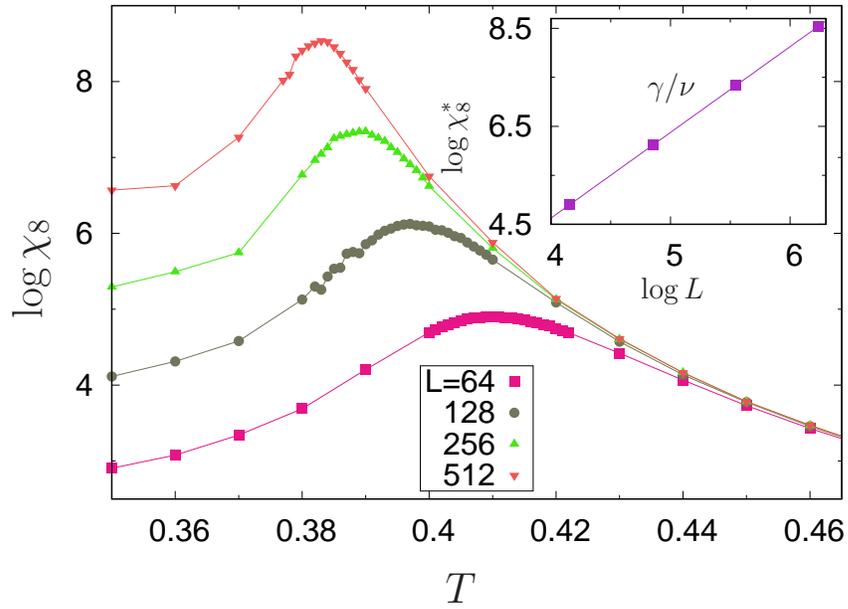


Fig. 5.11: Susceptibilidade respectiva à m_8 como função da temperatura em $\Delta = 0.6$. O detalhe mostra que na transição $\mathbf{F}_2\text{-}\mathbf{F}_0$ a altura do pico da susceptibilidade cresce como $\chi_8^* \sim L^{1.750(5)}$.

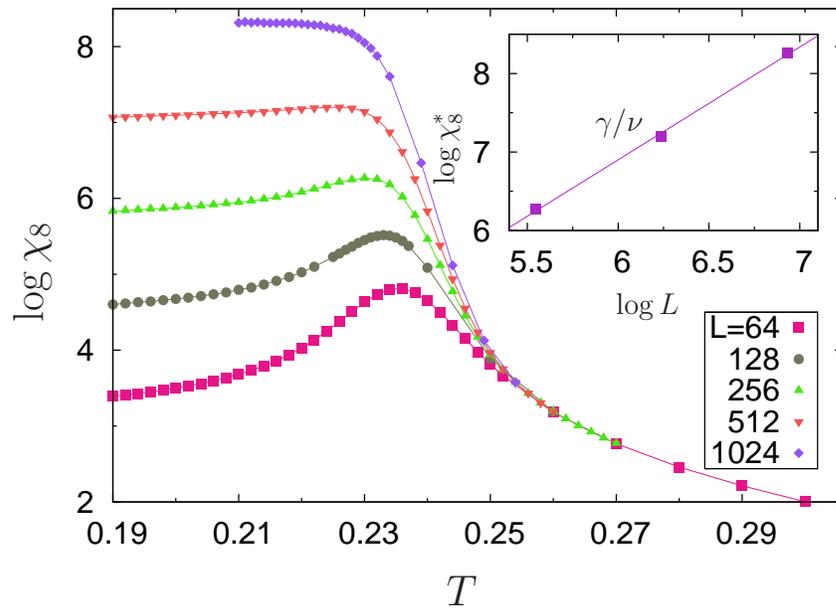


Fig. 5.12: Susceptibilidade respectiva à m_8 vs temperatura em $\Delta = 0.8$. O detalhe mostra como a altura do pico da susceptibilidade cresce na transição $\mathbf{F}_1\text{-}\mathbf{F}_0$: $\chi_8^* \sim L^{1.43(5)}$.

Para entender um pouco mais a linha $\mathbf{F}_1\text{-}\mathbf{F}_0$, também medimos a susceptibilidade em $\Delta = 0.9$, como mostrado na Fig. 5.13. Em $\Delta = 0.9$, ainda há efeito de tamanho finito, porém, ao aplicarmos FSS tomando χ_8 para todos os tamanhos, exceto $L = 64$, encontramos o expoente $\gamma/\nu \simeq 1.74 \pm 0.02$. Como a helicidade nessa transição não apresenta dependência com o tamanho do sistema, assim como em $\Delta = 0.8$, exclui-se a possibilidade de estar na classe KT. Portanto, supomos que a transição esteja na classe de universalidade do modelo de Ising 2d.

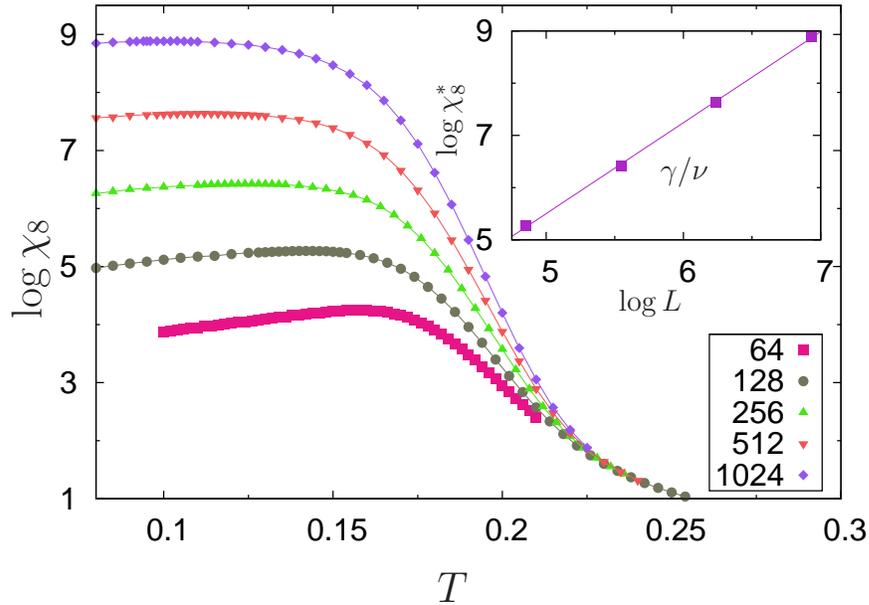


Fig. 5.13: Susceptibilidade respectiva à m_8 como função da temperatura em $\Delta = 0.9$. No detalhe temos o comportamento do pico da susceptibilidade na transição $\mathbf{F}_1\text{-}\mathbf{F}_0$: $\chi_8^* \sim L^{1.74(2)}$.

Para a transição $\mathbf{F}_1\text{-}\mathbf{F}_2$, a magnetização adequada para descrevê-la é a m_4 . Pois, nas fases \mathbf{N} e \mathbf{F}_2 , como a distribuição dos spins está concentrada nas direções preferenciais do termo nemático defasadas por $\pi/4$, enquanto m_4 é sensível à pseudo-ordem ferromagnética ou nemática com spins defasados por $\pi/2$, duas componentes separadas por $\pi/4$ se cancelam fazendo com que m_4 seja nula. Analogamente ao m_8 na transição $\mathbf{F}_1\text{-}\mathbf{F}_0$, $m_4 \neq 0$ na fase \mathbf{F}_1 devido à pseudo-ordem ferromagnética.

Como um útil mecanismo na identificação de transições de fase, também medimos o cumulante de quarta ordem de Binder [65–68]

$$U_k = 1 - \frac{\langle m_k^4 \rangle}{3\langle m_k^2 \rangle^2}. \quad (5.1)$$

Sua relevância é a não dependência com o tamanho do sistema na transição, pois, relembrando a expressão (2.3c) para o escalamento da magnetização, notamos que a quantidade

$$\frac{\langle m^4 \rangle}{\langle m^2 \rangle^2} = \frac{L^{-4\beta/\nu} \mathcal{M}_1(tL^{1/\nu})}{[L^{-2\beta/\nu} \mathcal{M}_2(tL^{1/\nu})]^2} = \mathcal{M}_3(tL^{1/\nu}), \quad (5.2)$$

onde t é a temperatura reduzida e $\mathcal{M}_3(tL^{1/\nu})$ é uma nova função de escala que não depende do tamanho do sistema exatamente no ponto crítico.

Na Fig. 5.14 temos a susceptibilidade respectiva à m_4 e o cumulante de Binder, ambos em função da temperatura para $\Delta = 0.4$ e diferentes tamanhos. É interessante notar que, diferentemente dos outros casos, o pico de χ_4 se desloca para temperaturas mais altas à medida que o tamanho do sistema aumenta e as curvas colapsam à esquerda dele. Aplicando FSS nos picos de $\chi_4(L)$, encontramos o expoente $\gamma/\nu \simeq 1.24 \pm 0.01$, que não conseguimos associar a nenhuma classe de universalidade. Somado a isso, toda a linha \mathbf{F}_1 - \mathbf{F}_2 apresenta expoentes não-universais mostrados na tabela 5.1 e no detalhe da Fig. 5.14 em função de Δ . Apesar da limitada precisão dos expoentes, há uma clara dependência de γ/ν com o parâmetro de acoplamento Δ . À medida que Δ aumenta, o expoente γ/ν sofre uma leve diminuição. O fato das curvas do cumulante de Binder se cruzarem em $T_c \simeq 0.165 \pm 0.002$, é uma indicação da existência de uma transição, embora não saibamos a qual classe ela pertence. Desse modo, resultados adicionais são necessários para determiná-la. ;

Δ	0.15	0.3	0.4	0.7
γ/ν	1.270 ± 0.004	1.25 ± 0.01	1.24 ± 0.01	1.21 ± 0.01

Tab. 5.1: *Expoentes críticos ao longo da linha de transição \mathbf{F}_1 - \mathbf{F}_2 obtidos na janela de tamanhos acessíveis às nossas simulações.*

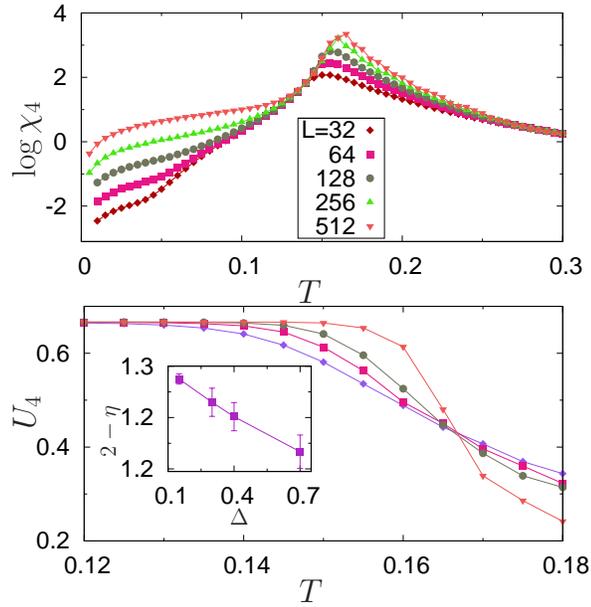


Fig. 5.14: (Painel superior) Susceptibilidade respectiva à m_4 vs temperatura em $\Delta = 0.4$ na transição \mathbf{F}_1 - \mathbf{F}_2 . (Painel inferior) Cumulante de Binder para diferentes tamanhos e seu cruzamento na transição. O detalhe mostra a dependência com Δ do expoente de χ_4 .

5.2 Caso tridimensional

Na Fig. 5.15 mostramos o diagrama de fases obtido para o caso $q = 8$ em três dimensões. Os pontos foram obtidos através dos picos no calor específico. O ponto multicrítico ocorre em $\Delta_{mult} \simeq 0.5$ e nos extremos $\Delta = 0$ e 1 recuperamos a temperatura crítica do modelo XY, $T_c \simeq 2.2018$ [50–52]. A estrutura do diagrama é similar ao caso bidimensional, porém, nesse caso, as fases \mathbf{F}_1 e \mathbf{F}_2 se combinam em uma só, a qual chamamos \mathbf{F}_1 e que possui ordenamento ferromagnético de longo-alcance. As fases \mathbf{N} e \mathbf{F}_0 possuem, respectivamente, ordem nemática e ferromagnética de longo-alcance. A seguir serão descritas as propriedades de cada fase e suas transições por meio da susceptibilidade, helicidade e cumulante de Binder.

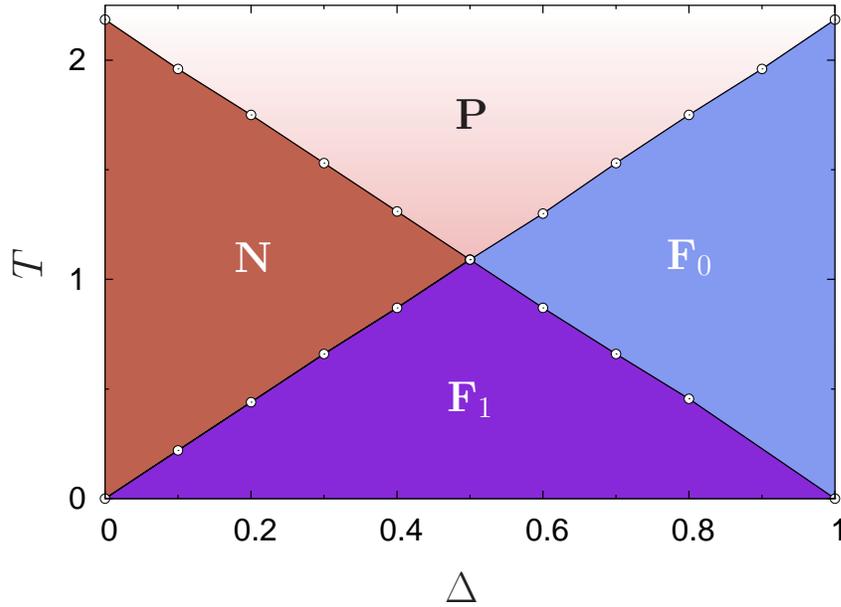


Fig. 5.15: Diagrama de fases para o modelo XY tridimensional com $q = 8$ [64]. Os pontos foram obtidos tomando os picos do calor específico para $L = 20$.

Analogamente ao caso $q = 3$, se espera que as transições entre as fases ordenadas com a paramagnética pertençam à classe de universalidade do modelo XY tridimensional. Isso pode ser verificado nas Figs. 5.16 e 5.17, onde mostramos as susceptibilidades respectivas às magnetizações m_1 e m_8 para $\Delta = 0.8$ e 0.25 , respectivamente. Na transição \mathbf{F}_0 - \mathbf{P} , aplicando FSS nos dados $\chi_1(L)$ no ponto crítico, encontramos o expoente $\gamma/\nu \simeq 1.966 \pm 0.009$, levemente acima do esperado para a classe XY3d. Além disso, tomando a posição do pico em $\chi_1(L)$ e extrapolando

	α	γ	ν	γ/ν
XY	-0.0146	1.3159	0.6714	1.9600
Ising	0.1096	1.2372	0.6300	1.96373

Tab. 5.2: Expoentes críticos para os modelos XY [33, 53, 69] e Ising [70–73] em três dimensões.

com o ajuste $T(L) = aL^b + T_c$, obtemos $T_c \simeq 1.7619 \pm 0.0003$. Repetindo o procedimento para χ_8 , na transição **N-P**, obtemos o expoente $\gamma/\nu \simeq 1.969 \pm 0.005$ e $T_c \simeq 1.6507 \pm 0.0004$. Como, em geral, a precisão em γ/ν não é suficiente para determinar se a classe de universalidade pertence ao modelo XY3d ou ao modelo de Ising 3d, podemos diferenciar uma classe da outra olhando os resultados para helicidade, como veremos a seguir.

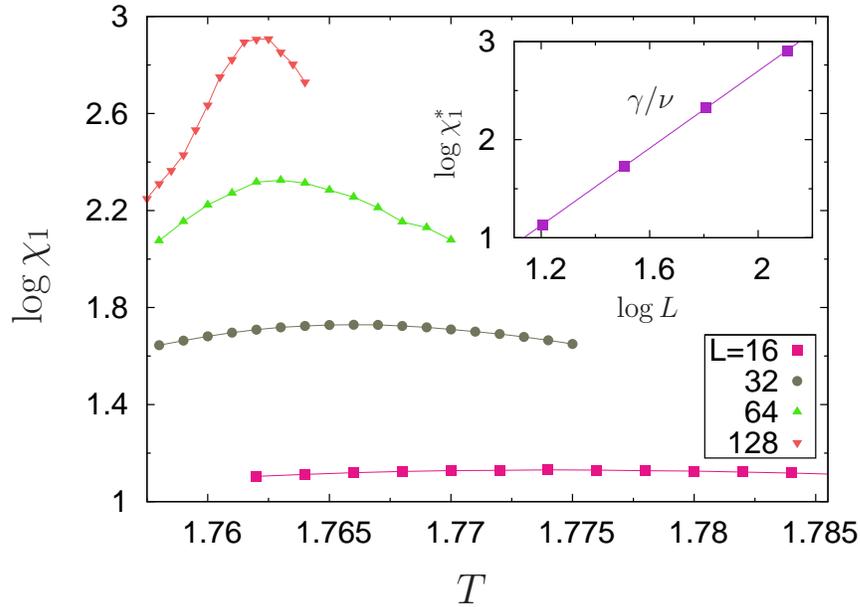


Fig. 5.16: Susceptibilidade respectiva à m_1 como função da temperatura para diferentes tamanhos em $\Delta = 0.8$. No detalhe mostramos o comportamento da altura do pico na transição **F₀-P**: $\chi_1^* \sim L^{1.966(9)}$.

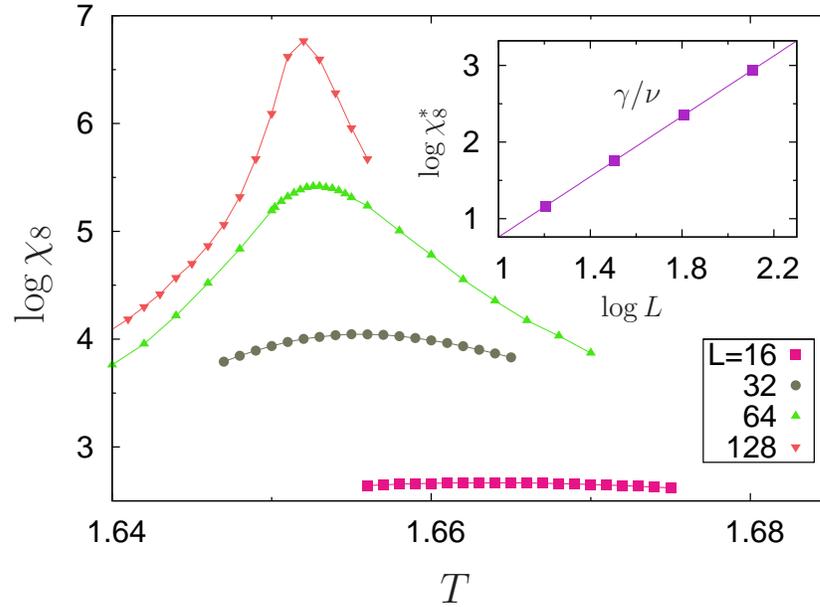


Fig. 5.17: Susceptibilidade respectiva à m_8 em função da temperatura em $\Delta = 0.25$. No detalhe temos o comportamento da altura do pico na transição **N-P**: $\chi_1^* \sim L^{1.969(5)}$.

Nas Figs. 5.18 e 5.19, mostramos, respectivamente, as helicidades reescaladas como funções da temperatura em $\Delta = 0.6$ e 0.8 para diferentes tamanhos. Note que no ponto crítico para uma transição na classe XY3d, a quantidade ΥL é independente do tamanho do sistema. Para $\Delta = 0.6$, podemos observar que as curvas se cruzam em dois pontos distintos à medida que a temperatura aumenta. O primeiro, em $T_c \simeq 0.884 \pm 0.005$, indica a transição **F₁-F₀**. O segundo, em $T_c \simeq 1.32 \pm 0.01$, assinala a transição **F₀-P**. Para $\Delta = 0.8$, vemos que conforme a temperatura cresce, apenas em $T_c \simeq 1.762 \pm 0.001$ a helicidade reescalada não depende do tamanho, indicando a transição **F₀-P**. Nas proximidades da transição **F₁-F₀**, a quantidade ΥL diverge à medida que o tamanho do sistema aumenta sugerindo que a transição não pertence à classe XY3d.

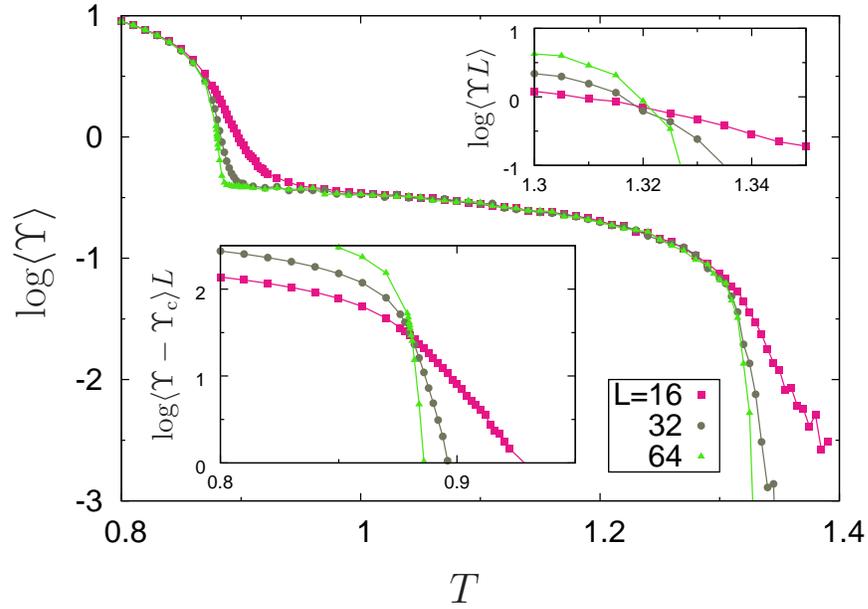


Fig. 5.18: Helicidade *vs* temperatura em $\Delta = 0.6$ para diferentes tamanhos. A quantidade ΥL independe do tamanho em $T_c \simeq 0.884 \pm 0.005$ (caixa inferior) e $T_c \simeq 1.32 \pm 0.01$ (caixa superior), respectivamente nas transições $\mathbf{F}_1\text{-}\mathbf{F}_0$ e $\mathbf{F}_0\text{-}\mathbf{P}$.

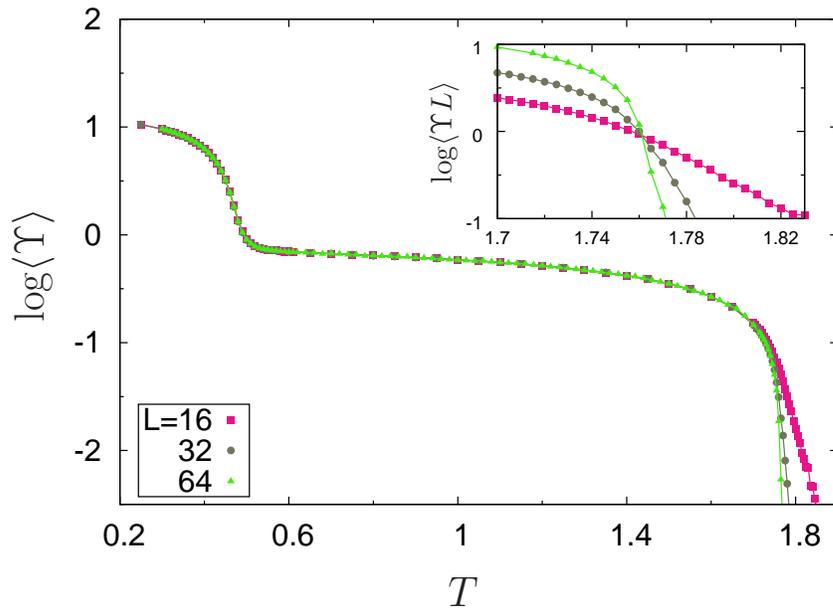


Fig. 5.19: Helicidade em função da temperatura em $\Delta = 0.8$. A quantidade ΥL independe do tamanho unicamente em $T_c \simeq 1.762 \pm 0.001$, na transição $\mathbf{F}_0\text{-}\mathbf{P}$.

Nas Figs. 5.20 e 5.21, temos as susceptibilidades respectivas à m_8 para $\Delta = 0.6$ e 0.8 na transição $\mathbf{F}_1\text{-}\mathbf{F}_0$. Para $\Delta = 0.6$, aplicando FSS nos pontos de $\chi_8^*(L)$, obtemos o expoente $\gamma/\nu \simeq 1.979 \pm 0.001$. Apesar da pequena discrepância, o expoente está próximo do esperado para uma transição na classe de universalidade XY3d. Também encontramos a temperatura crítica assintótica $T_c \simeq 0.877 \pm 0.001$, próxima àquela encontrada por meio da helicidade. Para $\Delta = 0.8$, o expoente γ/ν sofre fortemente de efeitos de tamanho finito, ao utilizarmos FSS com apenas os três maiores tamanhos, encontramos $\gamma/\nu \simeq 0.492 \pm 0.004$. Assim como no caso bidimensional, esse expoente muito abaixo do esperado poderia ser devido à proximidade com o ponto multicrítico, que dividiria a linha de transição $\mathbf{F}_1\text{-}\mathbf{F}_0$ em duas classes de universalidade, porém resultados para $\Delta = 0.9$ fornecem um expoente crítico similar $\gamma/\nu \simeq 0.57 \pm 0.04$. Colocando em dúvida, portanto, se esse pequeno escalamento em χ_8 na região $0.8 \leq \Delta < 1$ poderia ser apenas um efeito que desapareceria em sistemas maiores.

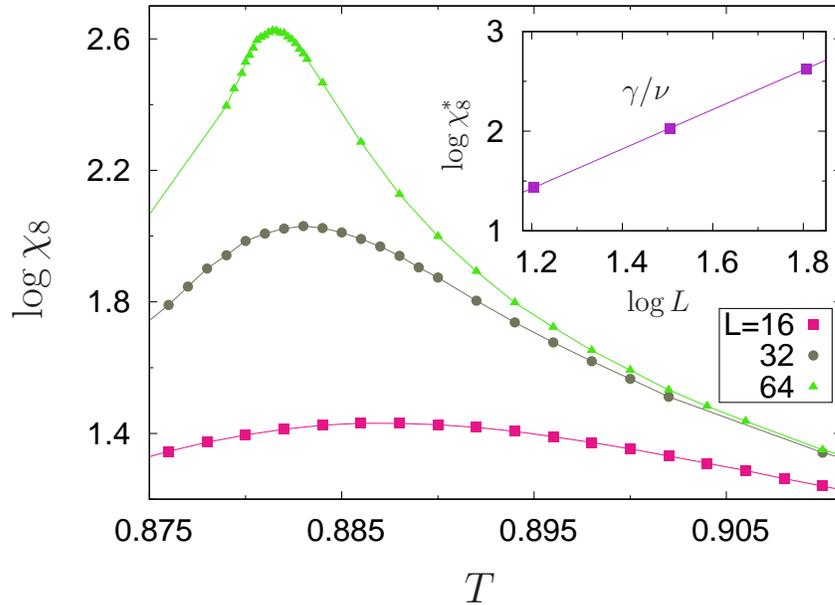


Fig. 5.20: Susceptibilidade respectiva à m_8 em função da temperatura para diferentes tamanhos em $\Delta = 0.6$. No detalhe mostramos o comportamento da altura do pico na transição $\mathbf{F}_0\text{-}\mathbf{F}_1$: $\chi_8^* \sim L^{1.979(1)}$.

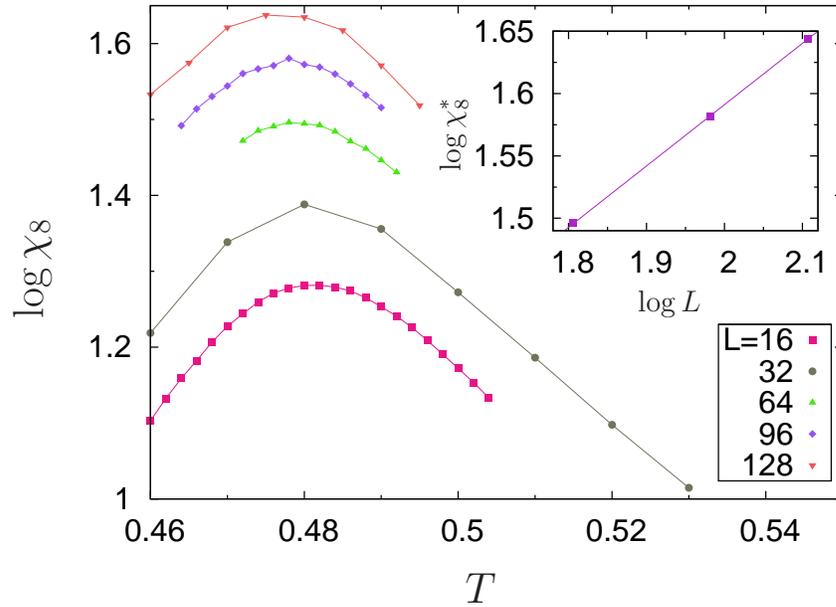


Fig. 5.21: Susceptibilidade respectiva à m_8 vs temperatura em $\Delta = 0.8$. O detalhe mostra que na transição $\mathbf{F}_0\text{-}\mathbf{F}_1$, a altura do pico escala como $\chi_8^* \sim L^{0.492(4)}$.

Nas Figs. 5.22 e 5.23, mostramos o cumulante de Binder em função da temperatura para diferentes tamanhos na transição $\mathbf{F}_1\text{-}\mathbf{F}_0$ para $\Delta = 0.6$ e 0.8 , respectivamente. Para $\Delta = 0.6$, as curvas de $U_8(L)$ independem do tamanho do sistema exatamente em $T_c \simeq 0.8807 \pm 0.0001$, uma temperatura consistente com aquelas obtidas pela helicidade e susceptibilidade. Já para $\Delta = 0.8$, nas proximidades da transição $\mathbf{F}_1\text{-}\mathbf{F}_0$, onde χ_8 tem seu máximo em $T \simeq 0.48$, as curvas de $U_8(L)$ não mostram sinais de convergência para uma temperatura específica.

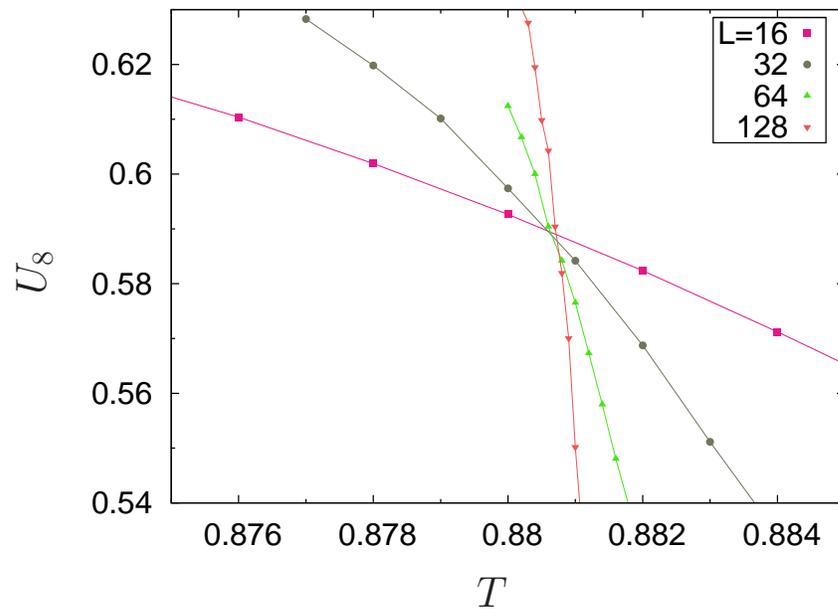


Fig. 5.22: Cumulante de Binder respectivo à m_8 vs temperatura em $\Delta = 0.6$. As curvas de $U_8(L)$ independem do tamanho em $T \simeq 0.8807 \pm 0.0001$ na transição \mathbf{F}_1 - \mathbf{F}_0 .

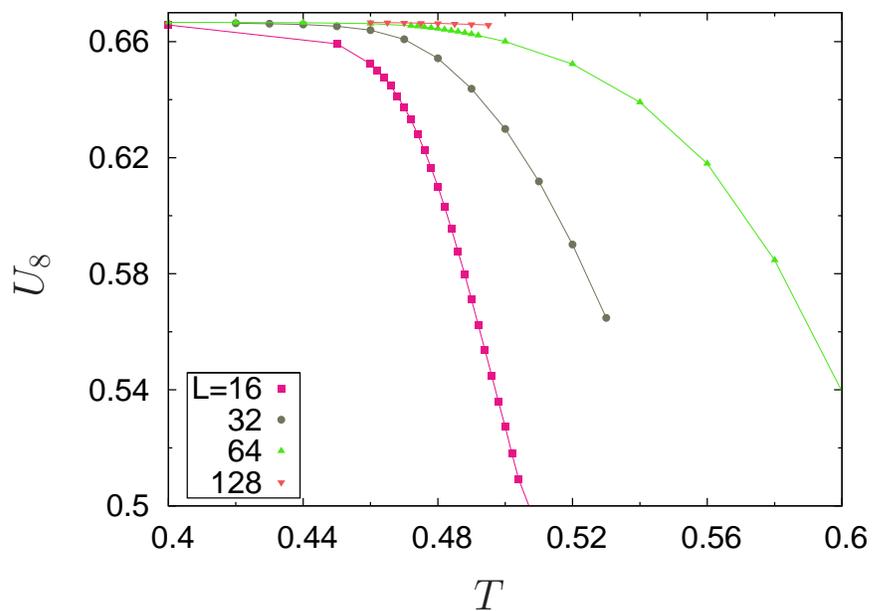


Fig. 5.23: Cumulante de Binder em função da temperatura para $\Delta = 0.8$. As curvas de $U_8(L)$ divergem na região correspondente aos picos de χ_8 da Fig. 5.21.

Resultados para o calor específico em função da temperatura também são mostrados na Fig 5.24 para $\Delta = 0.6$ e 0.8 . É esperado que o calor específico seja descontínuo no limite termodinâmico para a transição do modelo XY tridimensional, sendo isso uma das características das transições do tipo Lambda [69]⁴. Porém, para tamanhos finitos, a descontinuidade só começa a ser perceptível para grandes tamanhos do sistema. Além disso, pelo fato do expoente α (tabela 5.2) ser muito pequeno e comparável ao erro do ajuste ao se fazer FSS, nos limitamos a mostrar resultados qualitativos. Em $\Delta = 0.6$, podemos ver três picos em C_V conforme a temperatura aumenta: o primeiro, insensível ao tamanho do sistema, será explicado posteriormente, o segundo e o terceiro, respectivamente nas proximidades das transições $\mathbf{F}_1\text{-}\mathbf{F}_0$ e $\mathbf{F}_0\text{-}\mathbf{P}$, além de possuírem comportamentos idênticos, começam a mostrar sinais da descontinuidade a partir de $L = 64$. Para $\Delta = 0.8$, vemos dois picos em C_V , o primeiro e o segundo nas proximidades das transições $\mathbf{F}_1\text{-}\mathbf{F}_0$ e $\mathbf{F}_0\text{-}\mathbf{P}$, respectivamente. Porém, apenas o segundo exhibe dependência com o tamanho e a descontinuidade característica da transição Lambda.

⁴ O termo Lambda foi empregado pelo fato do formato da curva do calor específico lembrar a letra grega λ .

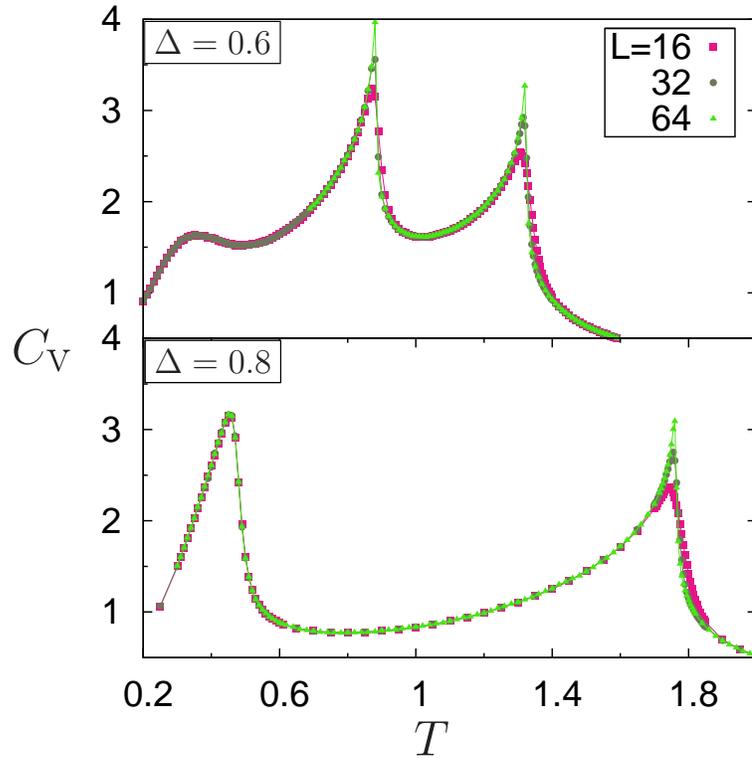


Fig. 5.24: Calor específico *vs* temperatura em $\Delta = 0.6$ (acima) e 0.8 (abaixo) para diferentes tamanhos.

Na Fig. 5.25 temos os colapsos da susceptibilidade (painel superior) e do cumulante de Binder (painel inferior) respectivos à m_1 como funções da temperatura para diferentes tamanhos em $\Delta = 0.35$ na transição $\mathbf{F}_1\text{-N}$. Um excelente colapso é obtido com o expoente crítico $\gamma \simeq 1.33(5)$, $\nu \simeq 0.67(1)$, e $T_c \simeq 0.771$, valores que estão próximos aos da classe de universalidade XY3d. Isso é notável pois esperamos que essa transição esteja na classe de universalidade Ising 3D, já que as distribuições angulares dessas fases são similares às do caso bidimensional (ver Fig. 5.9), passando de oito direções preferenciais sobre um círculo (fase nemática) para apenas algumas sobre um semicírculo (fase ferromagnética). Além disso, não apresenta o comportamento característico de uma transição na classe XY3d, mostrando dependência com o tamanho no ponto crítico. O calor específico também não ajuda a decidir a classe de universalidade da transição, um bom colapso é obtido com o expoente ν acima (próximo ao XY3d) e com α pequeno mas positivo (próximo ao Ising 3D, ver tabela 5.2). Portanto, nossos dados atuais confirmam apenas parcialmente que a transição $\mathbf{F}_1\text{-N}$ pertence à classe de universalidade Ising 3d. Maiores tamanhos

e correções ao escalamento serão necessárias para obter um melhor estimativa dos expoentes.

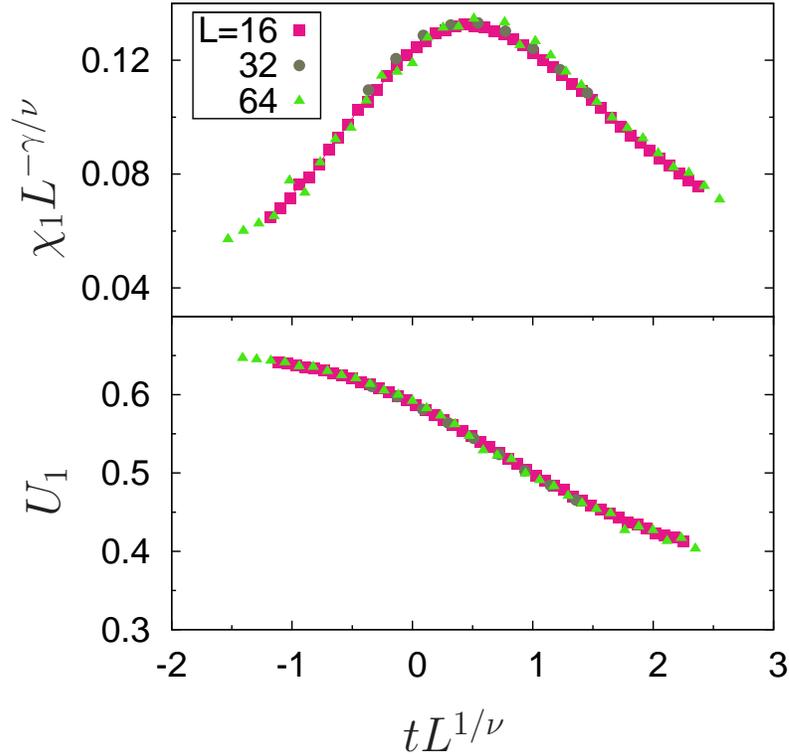


Fig. 5.25: Colapso da susceptibilidade (painel superior) e cumulante de Binder (painel inferior) na transição $\mathbf{F}_1\text{-N}$ em $\Delta = 0.35$ com $T_c = 0.771$ e expoentes $\gamma \simeq 1.33(5)$ e $\nu \simeq 0.67(1)$.

Para investigar a existência de uma possível linha de transição como indicado pelo primeiro pico no calor específico na Fig. 5.24, em analogia ao caso bidimensional onde há a transição $\mathbf{F}_1\text{-F}_2$, medimos a magnetização m_4 ao longo da linha $\Delta = 0.4$. Nas Figs. 5.26 e 5.27, mostramos a susceptibilidade e o cumulantes de Binder relativos à m_4 como funções da temperatura para diferentes tamanhos, respectivamente. Vemos que há um pico em χ_4 dependente do tamanho do sistema que está no entorno de $T = 0.4$ para $L = 16$, porém, conforme L cresce, o mesmo se desloca rapidamente para altas temperaturas se aproximando da transição $\mathbf{F}_1\text{-N}$, além de possuir um escalamento muito pequeno. Como mostrado na Fig. 5.27, as linhas de U_4 divergem à medida que o tamanho aumenta, não havendo, portanto, qualquer indício da existência de um ponto crítico onde as curvas de $U_4(L)$ seriam independentes de L .

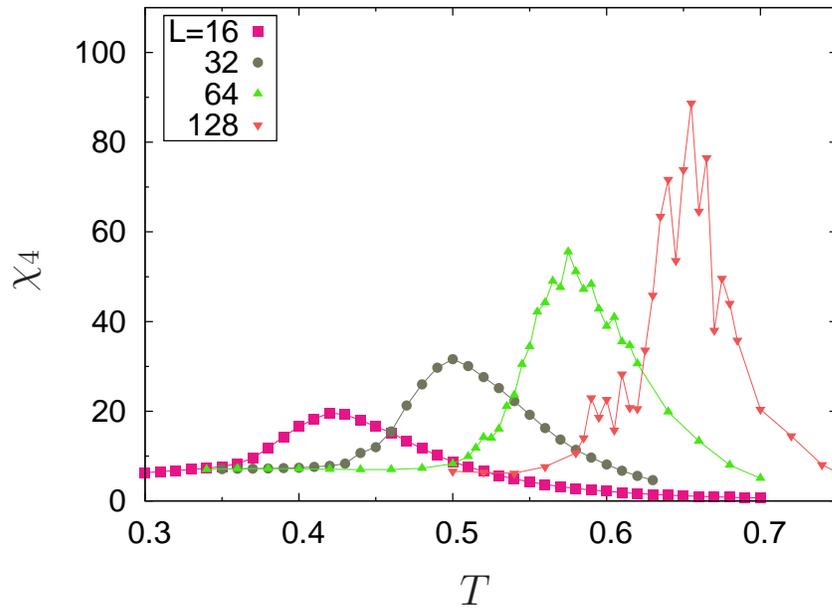


Fig. 5.26: Susceptibilidade respectiva à m_4 em função da temperatura para diferentes tamanhos em $\Delta = 0.4$.

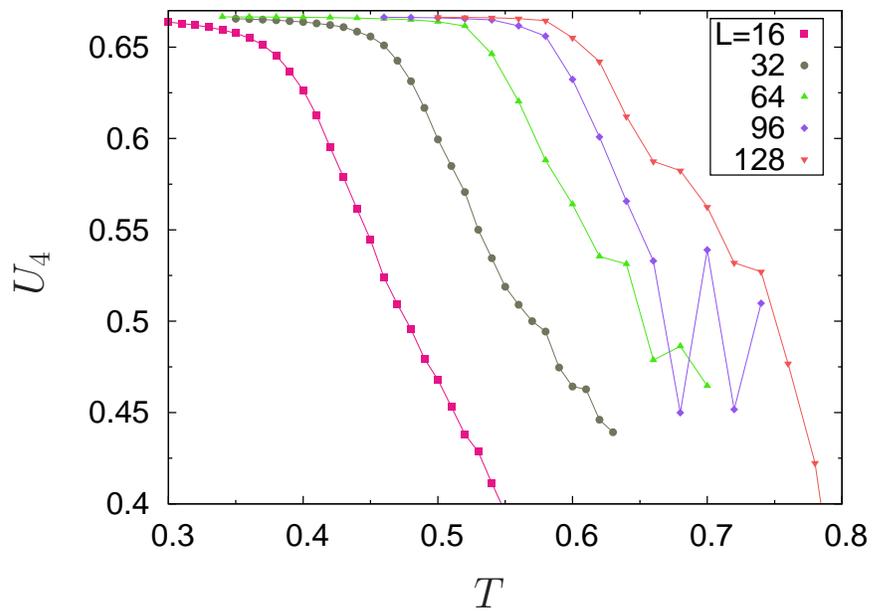


Fig. 5.27: Cumulante de Binder *vs* temperatura em $\Delta = 0.4$. As curvas de U_4 não convergem para um ponto comum independente do tamanho.

5.3 Conclusões

Neste capítulo abordamos o caso particular $q = 8$ do Hamiltoniano (3.1) em duas e três dimensões. As conjecturas feitas no trabalho anterior, Ref. [35], para o caso bidimensional, estavam parcialmente corretas. Por meio da helicidade e o estudo da vorticidade, encontramos evidências fortes quanto à natureza KT da transição $\mathbf{F}_2\text{-}\mathbf{F}_0$, guiada pela dissociação de defeitos topológicos com carga $1/8$. Já para a transição $\mathbf{F}_1\text{-}\mathbf{F}_0$, os resultados indicam uma transição contínua, ao contrário da suposição anterior. Via escalonamento de tamanhos finitos para redes muito maiores, confirmamos a classe de universalidade Ising da transição $\mathbf{F}_2\text{-}\mathbf{N}$ obtendo o expoente γ/ν com uma pequena margem de erro. Além disso, os novos resultados não corroboram a hipótese anterior da transição $\mathbf{F}_1\text{-}\mathbf{F}_2$ ser do tipo Ising, na verdade, foi constatado que ao longo de toda a linha de transição o expoente γ/ν é dependente do parâmetro Δ , com um valor muito distante do esperado para classe Ising, pelo menos na janela de tamanhos acessíveis dentro da nossa capacidade. Falta-nos, portanto, investigar um pouco mais essa transição.

No caso tridimensional, o diagrama de fases sofre algumas alterações. Apesar de χ_8 ter um pequeno escalamento com o tamanho na linha separando as fases \mathbf{F}_1 e \mathbf{F}_0 desde $\Delta = 0.8$ até $\Delta = 1$, os resultados para o cumulante de Binder, helicidade e o calor específico apontam para a inexistência de uma transição de fase, sendo, portanto, o escalamento, apenas um efeito passageiro que provavelmente desaparecerá para redes maiores. Analogamente, não encontramos indícios de uma transição $\mathbf{F}_1\text{-}\mathbf{F}_2$ como no caso bidimensional. Por fim, as transições entre as fases ordenadas com a paramagnética, como esperado, estarem na classe 3dXY, foram confirmadas por meio da obtenção de γ/ν e o cruzamento das curvas da helicidade reescalada.

Capítulo 6

Conclusões e perspectivas

Estudamos, neste trabalho, os resultados da competição entre interações ferromagnéticas e nemáticas em uma generalização do modelo XY em duas e três dimensões. Em particular, os casos $q = 3$ e $q = 8$ do Hamiltoniano Eq. 3.1 foram detalhados.

Para o caso bidimensional, também analisamos qualitativamente a topologia dos diagramas de fases para vários valores de q no termo nemático. A Fig. 6.1 apresenta uma visão geral das fases pseudo-ordenadas presentes para cada valor de q . Os casos $q = 2$ e $q = 3$ são similares, além da fase paramagnética para altas temperaturas, há apenas as fases \mathbf{F}_0 e \mathbf{N} com pseudo-ordem de longo alcance ferromagnética e nemática, respectivamente. As transições entre as fases pseudo-ordenadas envolvem quebra de simetria e estão nas classes de universalidade Ising ou Potts três estados para $q = 2$ e 3 , respectivamente. Para $q = 4$, surge a fase ferromagnética \mathbf{F}_1 , e a transição \mathbf{F}_1 - \mathbf{N} pertence à classe de universalidade Ising. A partir de $q = 5$, a linha de transição separando as fases \mathbf{N} e \mathbf{F}_1 se bifurca, criando uma nova fase ferromagnética, \mathbf{F}_2 . A linha de transição \mathbf{F}_1 - \mathbf{F}_2 nasce próxima à fase \mathbf{N} , mas, à medida que q aumenta, segue se distanciando em direção a baixas temperaturas. Embora tenhamos mostrado evidências da transição \mathbf{F}_2 - \mathbf{N} ser do tipo Ising para $q = 8$, ainda é uma questão em aberto saber o que acontece para outros valores de q diferentes dos já estudados. Além disso, a linha de transição \mathbf{F}_1 - \mathbf{F}_2 , com classe de universalidade indefinida e expoentes críticos dependentes do parâmetro de acoplamento, mostrou ser um caso intrigante para $q = 8$, de modo que seria interessante ver se isso é um comportamento geral para outros casos.

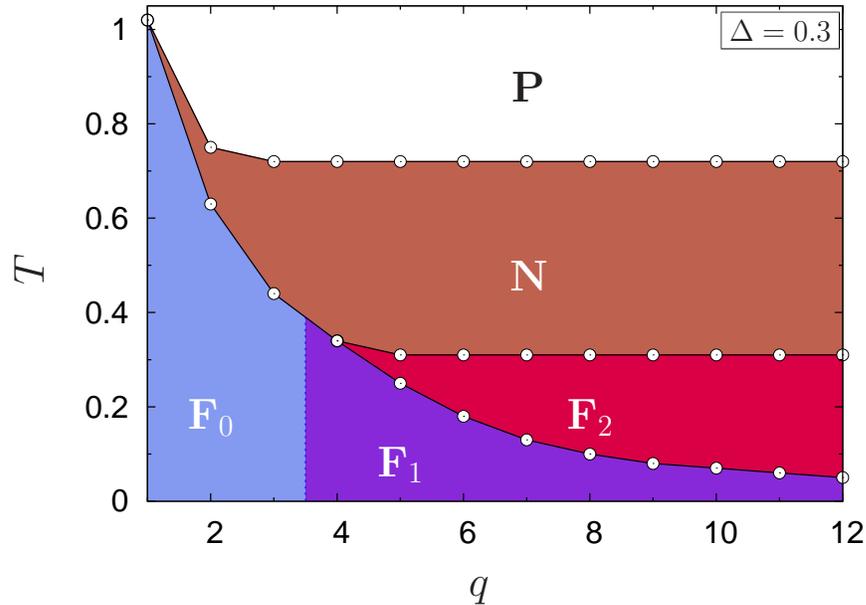


Fig. 6.1: Diagrama esquemático mostrando as fases existentes para cada valor do termo nemático ao longo da linha $\Delta = 0.3$.

O modelo generalizado em três dimensões apresentou semelhanças com o caso bidimensional quanto à estrutura dos diagramas de fases e classes de universalidade. Para $q = 3$, a transição entre as fases ordenadas é descontínua, assim como ocorre para a transição no modelo de Potts três estados tridimensional. Já para $q = 8$, a transição \mathbf{F}_1 - \mathbf{N} está na classe de universalidade Ising 3d. Porém, diferentemente do caso bidimensional, não há a transição \mathbf{F}_1 - \mathbf{F}_2 . Desse modo, um ponto importante seria obter a Fig. 6.1 também em três dimensões.

A transição \mathbf{F}_1 - \mathbf{F}_0 , para $q = 8$, mostrou ser problemática tanto para o caso bidimensional quanto para o tridimensional, além de algumas similaridades. Em duas dimensões, a helicidade aparentemente não apresentou escalamento com o tamanho que indica o salto característico da universalidade KT, sinalizando uma possível transição contínua ao analisar os resultados para susceptibilidade. Já para três dimensões, a helicidade reescalada não mostrou um ponto crítico onde seria independente do tamanho, comportamento intrínseco de uma transição na classe XY3d. Porém, outros observáveis mostraram sinais de não haver uma transição de fato. Portanto, precisamos obter mais informações que ajudem no entendimento dessa intrigante região do diagrama de fases, como simulações mais precisas e com redes maiores, o que está, atual e infelizmente, além de nossas capacidades.

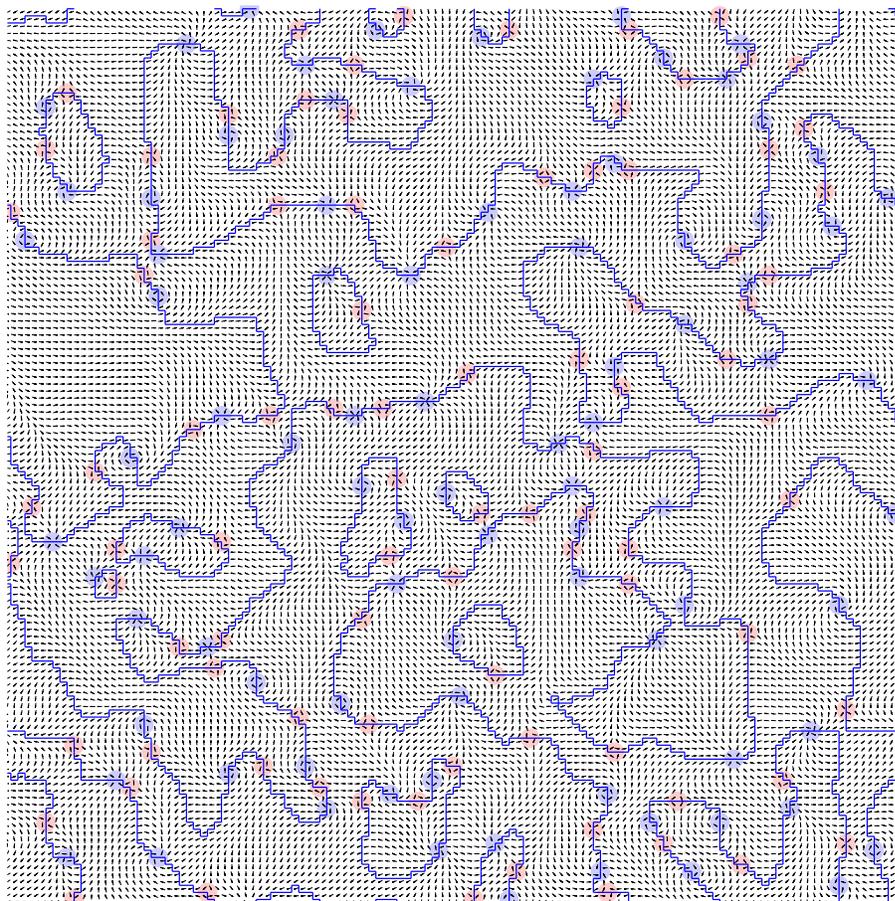


Fig. 6.2: Configuração dos spins para um estado fora do equilíbrio no modelo XY após um resfriamento vindo de $T \rightarrow \infty$. A linha azul representa a fronteira dos clusters.

Recentemente, a dinâmica fora do equilíbrio do modelo XY foi estudada [74, 75], com ênfase no comportamento do comprimento de correlação. Podemos estudar, mesmo os spins assumindo valores contínuos, problemas percolativos definindo, por exemplo, os domínios como na Ref. [76]. Outro aspecto pouco explorado nesses sistemas é a sua dinâmica fora do equilíbrio. Em analogia a estudos recentes sobre os modelos de Ising [77–81] e Potts [82, 83], pretendemos estudar como é a dinâmica de crescimento de domínios no modelo XY generalizado. A pergunta interessante, neste caso, é como os domínios crescem dentro das diferentes fases (e sobre as linhas de transição) do sistema após uma súbita diminuição da temperatura. Na Fig. 6.2 há a representação dos domínios (clusters geométricos) presentes para o modelo

XY usual em $T = 0$ após um resfriamento vindo de temperatura infinita (os detalhes de como construí-los encontram-se no apêndice A). Se pensarmos nas mesmas condições, porém para o modelo de Ising bidimensional, os domínios serão formados por spins com mesma orientação, onde a energia do sistema estará concentrada nas interfaces que separam clusters com diferentes orientações e será proporcional aos seus perímetros. No modelo XY, por outro lado, o custo energético reside nos vórtices desacoplados, de modo que é interessante notar que as bordas dos domínios sempre atravessam seus centros. Além disso, a desordem causada pela proliferação de vórtices aparenta prevenir a formação de um cluster percolante. Resultados de equilíbrio (não mostrados aqui) mostram que unicamente abaixo T_{KT} a rede possui um cluster percolante, sendo justamente onde as cargas topológicas se aniquilam. Portanto, queremos entender a evolução temporal das propriedades dos domínios e sua correlação com os defeitos topológicos.

Apêndice A

Simulação

Nas simulações, os spins são dispostos nos sítios de uma rede quadrada com condições periódicas de contorno e as interações são apenas entre primeiros vizinhos. No algoritmo de Swendsen-Wang [60], cada passo de Monte Carlo (MCS) corresponde à construção de todos os clusters de spins e na atualização de cerca de metade deles. No algoritmo de Wolff [59], por outro lado, um MCS consiste apenas na construção e atualização de um cluster. Todas medidas são tomadas após o sistema chegar ao estado de equilíbrio assintótico. Como condição inicial, dependendo da temperatura a ser analisada, utilizamos os estados correspondentes a $T \rightarrow \infty$ onde os spins são orientados aleatoriamente ou $T = 0$ onde 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 amostras são praticamente independentes. A seguir descreveremos os algoritmos de *Single-Flip*, Wolff e Swendsen-Wang.

A.1 Algoritmo *Single-flip*

No algoritmo de *Metropolis* [41], 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_ν , é comparada com a energia da configuração original, E_μ (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 Algoritmos de cluster

A.2.1 Wolff

No algoritmo de Wolff [59], 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 α 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

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

$$h' = -\mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}'_j, \quad (\text{A.8})$$

sendo h e h' as energias nas conexões ij quando, respectivamente, \mathbf{s}_i interage com \mathbf{s}_j ou $\mathbf{R}\mathbf{s}_j = \mathbf{s}'_j$ para o modelo XY. Assim,

$$P = 1 - \exp\{\min\{0, \beta[h' - h]\}\}. \quad (\text{A.9})$$

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

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

e

$$h' = -\Delta \cos(\theta_i - \theta'_j) - (1 - \Delta) \cos(q\theta_i - q\theta'_j) \quad (\text{A.11})$$

onde θ_j e θ'_j são os ângulos dos spins \mathbf{s}_j e \mathbf{s}'_j , respectivamente.

A.2.2 Swendsen-Wang

No algoritmo desenvolvido por Swendsen and Wang [60], do qual o de Wolff é um melhoramento, ao invés de construirmos apenas um cluster a partir de um sítio semente, todas as conexões entre pares de sítios são visitadas e todos os possíveis clusters são construídos de acordo com a regra A.9. Então, todos os spins presentes em cada cluster são flipados de acordo com a Eq. A.3 com probabilidade 1/2.

No algoritmo de Wolff, ao sortearmos o sítio semente, estamos automaticamente escolhendo com maior probabilidade o maior cluster do sistema. Portanto, a desvantagem do algoritmo de SW é a necessidade de construir todos os possíveis clusters, incluindo os menos relevantes para a dinâmica do sistema. Porém, a grande vantagem é que podemos paralelizá-lo e utilizá-lo em GPUS. A primeira e a terceira parte do algoritmo, que consistem na construção das conexões e atualização dos spins, são facilmente paralelizáveis. Para a parte de construção dos clusters (*labeling*) a partir da informação de quais spins estão conectados entre si, implementamos os algoritmos desenvolvidos em [84] e, posteriormente, em [85]. Na Fig. A.1 pode-se visualizar uma configuração de clusters para um estado fora do equilíbrio em $T = 0$. Para criar sequências de números aleatórios em CUDA, utilizamos um gerador baseado no operador XOR (*linear feedback shift register*) desenvolvido na Ref. [86].

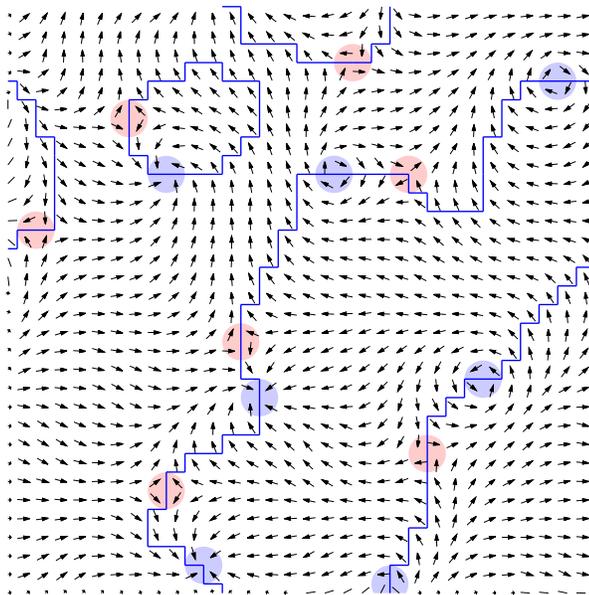


Fig. A.1: Representação dos clusters para um estado fora do equilíbrio no modelo XY após um resfriamento vindo de $T \rightarrow \infty$.

Apêndice B

Vórtices

Em uma trajetória fechada em um campo escalar $\theta(\mathbf{r})$ temos que

$$\oint_C \nabla\theta(\mathbf{r}) \cdot d\mathbf{l} = 2\pi k \quad (\text{B.1})$$

onde $k = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ é o índice (*winding number*). Se o caminho envolver um vórtice (antivórtice), a soma resultará em 2π (-2π), caso contrário será nula. Como os spins estão localizados nos vértices da rede quadrada, a integral deve ser substituída pela soma

$$\Phi = \sum_C \phi_i = (\theta_2 - \theta_1) + (\theta_3 - \theta_2) + \dots + (\theta_n - \theta_{n-1}) + (\theta_{n+1} - \theta_n) = 2\pi k, \quad (\text{B.2})$$

onde n é o número de spins que compõem o caminho fechado. Podemos interpretar k como o número de voltas que os spins realizam ao completar a trajetória.

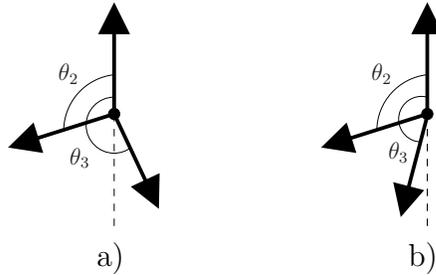


Fig. B.1: a) Configuração de um vórtice para $n = 3$. b) Uma formação que não cumpre às condições necessárias para ser vórtice, pois como $\theta_1 = \theta_{n+1} = \theta_4 = 2\pi$, a diferença será $\theta_4 - \theta_3 > \pi$, mas não podemos ter diferença de fase maior que π , logo deve-se tomar o valor $\theta_4 - \theta_3$ como $\theta_4 - \theta_3 - 2\pi$, que é negativo e anulará $(\theta_3 - \theta_2) + (\theta_2 - \theta_1)$, assim teremos $\Phi = 0$.

No estado desordenado, $T \rightarrow \infty$, devido ao forte ruído térmico descorrelacionando os spins, não é possível a formação espontânea de vórtices. O valor finito encontrado para densidade de vórtices nas Figs. B.3 e 2.3 é apenas um artifício da discretização da rede que usa apenas alguns sítios na definição de ρ_v . Portanto, a probabilidade de se obter um vórtice, nesse estado, é equivalente a sortearmos um número aleatório para cada spin e verificar se as condições $\sum_i \phi_i = \pm 2\pi$ e $|\phi_i| < \pi$ são cumpridas. Três spins é o limite inferior para o número de spins necessários para se formar um vórtice, como mostrado na Fig. B.2. Fixando $\theta_1 = 0$ por simplicidade (qualquer outro valor é totalmente equivalente), temos que

$$P_3 = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^\pi d\theta_2 \int_\pi^{\theta_2+\pi} d\theta_3 = \frac{1}{8} = \frac{1}{2^2 2!}$$

onde θ_i é o estado de cada spin i . Para $n = 4$, há duas possibilidades na formação de um vórtice

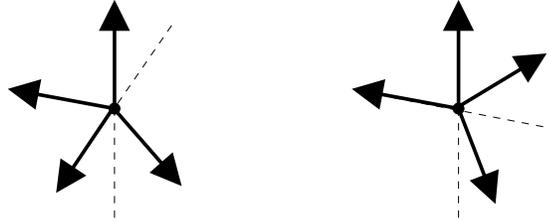


Fig. B.2: Representações das Eqs. B.3(esquerda) e B.4(direita).

$$P_4^{(1)} = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_0^\pi d\theta_2 \int_{\theta_2}^\pi d\theta_3 \int_\pi^{\theta_3+\pi} d\theta_4 = \frac{1}{24} = \frac{1}{2^3 3!} \cdot 2 \quad (\text{B.3})$$

e

$$P_4^{(2)} = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_0^\pi d\theta_2 \int_\pi^{\theta_2+\pi} d\theta_3 \int_{\theta_2}^{2\pi} d\theta_4 = \frac{1}{24} = \frac{1}{2^3 3!} \cdot 2, \quad (\text{B.4})$$

logo

$$P_4 = 1/12. \quad (\text{B.5})$$

Em geral, há $n - 2$ condições para cada circuito de n spins. Cada uma está relacionada a quantos spins podemos colocar nos planos de 0 a π e de π até 2π , sempre atendendo-se ao fato de que nenhuma diferença de fase pode ser maior que π . Para $n = 5$, temos que

$$\begin{aligned}
P_5^{(1)} &= \frac{1}{(2\pi)^4} \int_0^\pi d\theta_2 \int_{\theta_2}^\pi d\theta_3 \int_{\theta_3}^\pi d\theta_4 \int_\pi^{\theta_4+\pi} d\theta_5 = \frac{1}{2^4 4!} 3 \\
P_5^{(2)} &= \frac{1}{(2\pi)^4} \int_0^\pi d\theta_2 \int_{\theta_2}^\pi d\theta_3 \int_\pi^{\theta_3+\pi} d\theta_4 \int_{\theta_4}^{2\pi} d\theta_5 = \frac{1}{2^4 4!} 5 \\
P_5^{(3)} &= \frac{1}{(2\pi)^4} \int_0^\pi d\theta_2 \int_\pi^{\theta_2+\pi} d\theta_3 \int_{\theta_2}^{2\pi} d\theta_4 \int_{\theta_4}^{2\pi} d\theta_5 = \frac{1}{2^4 4!} 3.
\end{aligned}$$

Para $n = 6$

$$\begin{aligned}
P_6^{(1)} &= \frac{1}{(2\pi)^5} \int_0^\pi d\theta_2 \int_{\theta_2}^\pi d\theta_3 \int_{\theta_3}^\pi d\theta_4 \int_{\theta_4}^\pi d\theta_5 \int_\pi^{\theta_5+\pi} d\theta_6 = \frac{1}{2^5 5!} 4 \\
P_6^{(2)} &= \frac{1}{(2\pi)^5} \int_0^\pi d\theta_2 \int_{\theta_2}^\pi d\theta_3 \int_{\theta_3}^\pi d\theta_4 \int_\pi^{\theta_4+\pi} d\theta_5 \int_{\theta_5}^{2\pi} d\theta_6 = \frac{1}{2^5 5!} 9 \\
P_6^{(3)} &= \frac{1}{(2\pi)^5} \int_0^\pi d\theta_2 \int_{\theta_2}^\pi d\theta_3 \int_\pi^{\theta_3+\pi} d\theta_4 \int_{\theta_4}^{2\pi} d\theta_5 \int_{\theta_5}^{2\pi} d\theta_6 = \frac{1}{2^5 5!} 9 \\
P_6^{(4)} &= \frac{1}{(2\pi)^5} \int_0^\pi d\theta_2 \int_\pi^{\theta_2+\pi} d\theta_3 \int_{\theta_3}^{2\pi} d\theta_4 \int_{\theta_4}^{2\pi} d\theta_5 \int_{\theta_5}^{2\pi} d\theta_6 = \frac{1}{2^5 5!} 4.
\end{aligned}$$

Repetindo as contas para $n = 7$, podemos montar um diagrama com os resultados dos coeficientes de cada condição

$n = 3:$					1
$n = 4:$					2 2
$n = 5:$					3 5 3
$n = 6:$					4 9 9 4
$n = 7:$					5 14 19 14 5

Podemos facilmente verificar que a soma de cada linha do diagrama acima resulta em $2^{n-1} - n$. Então, podemos conjecturar uma fórmula geral

$$P_n = \frac{2^{n-1} - n}{2^{n-1}(n-1)!} = \frac{1}{(n-1)!} \left(1 - \frac{n}{2^{n-1}}\right), \quad (\text{B.6})$$

a qual verificamos numericamente até $n = 12$ gerando ângulos aleatórios. Na Fig. B.3 pode ser visto como as densidades de vórtices para diferentes trajetórias na

rede quadrada convergem no limite de altas temperaturas para os valores fornecidos pela Eq. B.6. Embora seja difícil visualizar em escala logarítmica, à medida que n aumenta, a temperatura onde ocorre o máximo em ρ_V se aproxima de T_{KT} .

Para medirmos a densidade de vórtices fracionários, basta generalizarmos a Eq. B.2 para

$$\Phi = 2\pi k/q. \quad (\text{B.7})$$

Podemos verificá-la facilmente ao olhar para a Fig. 3.2, onde a soma das diferenças de fase dos spins que englobam um semivórtice resulta em π .

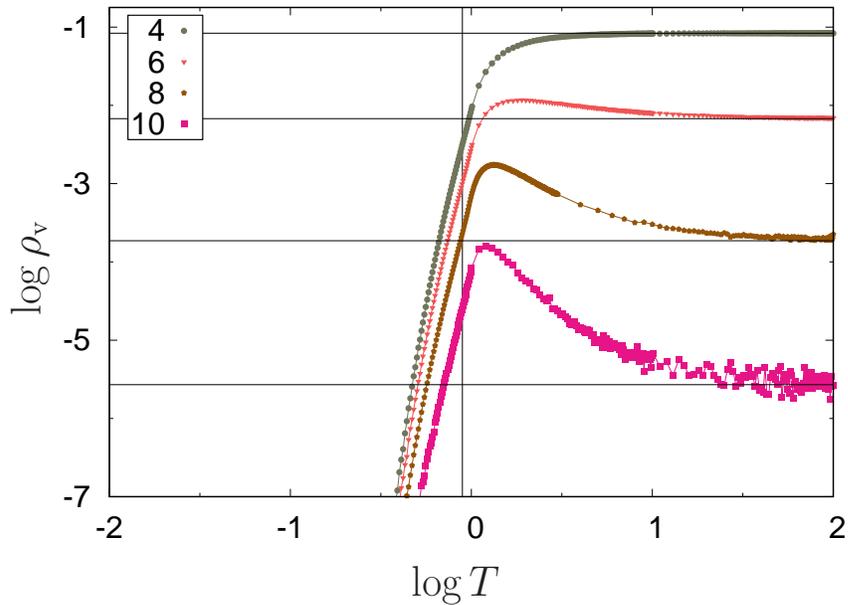


Fig. B.3: Densidade de vórtices em função da temperatura no modelo XY usual para diferentes trajetórias de n spins. As linhas horizontais referem-se às probabilidades de encontrar um vórtice/antivórtice ao acaso fornecida pela Eq. B.6 e a linha vertical à T_{KT} . Os dados foram obtidos utilizando-se $L = 128$, porém não há diferença entre diferentes tamanhos.

Apêndice C

Derivação da helicidade

Para derivar a Eq. (2.11), partimos da energia livre do sistema perturbado pela torção δ_x na direção \hat{x}

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

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

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

onde o traço é sobre θ_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 δ_x

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

pois assumimos que o modelo é isotrópico e $F(\delta_x, \beta) = F(-\delta_x, \beta)$, logo termos ímpares serão nulos. Disso decorre que $\partial Z / \partial \delta_x = 0$. Derivando outra vez

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

Derivando a função de partição

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

e outra vez

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

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

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

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

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

Para chegarmos à expressão (2.12), para helicidade de quarta ordem, começamos derivando a Eq. (C.4)

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

e outra vez

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

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

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

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

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

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

Derivando a Eq. (C.6), temos

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

novamente

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

onde as aspas significam a derivada em relação a δ_x . Completando o quadrado dos termos entre parênteses obtemos

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

onde percebemos que o termo $v'' - \beta (v')^2$ é a helicidade Υ . De maneira análoga à anterior

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

que pode ser reduzido a

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

Então, juntando os termos das Eqs. (C.12) e (C.16), obtemos

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

Na Eq. (2.8), dissemos que os termos ímpares são nulos devido ao fato do sistema ser isotrópico. Podemos identificar a primeira derivada da energia livre como

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

onde

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

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

Para obtermos as Eqs. (2.15) e (2.12), para o modelo XY normal, basta colocarmos $\Delta = 1$ nas Eqs. (4.3) e (4.4), assim

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

Utilizando a Eq. (2.11), temos

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

que pode ser reescrita como

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

pois, de acordo com o Hamiltoniano Eq. (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

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

a partir do que

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

que pode ser reescrita como

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

onde recuperamos, portanto, a expressão obtida por Minnhagen e Kim [44].

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 ^4He films. *Phys. Rev. Lett.*, v. 40, p. 1727–1730, Jun 1978.
- [7] FREEMAN, M. R.; RICHARDSON, R. C. Size effects in superfluid ^3He films. *Phys. Rev. B*, v. 41, p. 11011–11028, Jun 1990.
- [8] BEASLEY, M. R.; MOOIJ, J. E.; ORLANDO, T. P. Possibility of vortex-antivortex pair dissociation in two-dimensional superconductors. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 42, p. 1165–1168, Apr 1979.
- [9] ANDERSON, P. W.; ROWELL, J. M. Probable observation of the Josephson superconducting tunneling effect. *Phys. Rev. Lett.*, v. 10, p. 230–232, Mar 1963.
- [10] RESNICK, D. J. et al. Kosterlitz-Thouless transition in proximity-coupled superconducting arrays. *Phys. Rev. Lett.*, v. 47, p. 1542–1545, Nov 1981.

-
- [11] FRÖHLICH, J.; SPENCER, T. The kosterlitz-thouless transition in two-dimensional abelian spin systems and the coulomb gas. *Communications in Mathematical Physics*, v. 81, n. 4, p. 527–602, Dec 1981.
- [12] PARGELLIS, A. N.; GREEN, S.; YURKE, B. Planar xy-model dynamics in a nematic liquid crystal system. *Phys. Rev. E*, American Physical Society, v. 49, p. 4250–4257, May 1994.
- [13] BAEK, S. K.; MINNHAGEN, P. Non-Kosterlitz-Thouless transitions for the q -state clock models. *Phys. Rev. E*, v. 82, p. 031102, Sep 2010.
- [14] 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.
- [15] CHATELAIN, C. Numerical study of the critical phases of the frustrated $\mathbb{Z}(5)$ model. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, v. 2016, n. 7, p. 073306, 2016.
- [16] TEITEL, S.; JAYAPRAKASH, C. Phase transitions in frustrated two-dimensional XY models. *Phys. Rev. B*, v. 27, p. 598–601, Jan 1983.
- [17] 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.
- [18] 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.
- [19] 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.
- [20] 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.
- [21] 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.

-
- [22] 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.
- [23] 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.
- [24] BRITO, C.; VITELLI, V.; DAUCHOT, O. Orientational order at finite temperature on curved surfaces. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, v. 2016, n. 3, p. 033208, 2016.
- [25] HALPERIN, B. I.; NELSON, D. R. Theory of two-dimensional melting. *Phys. Rev. Lett.*, v. 41, p. 121–124, Jul 1978.
- [26] BINDER, K.; SENGUPTA, S.; NIELABA, P. The liquid-solid transition of hard discs: first-order transition or kosterlitz-thouless-halperin-nelson-young scenario? *Journal of Physics: Condensed Matter*, v. 14, n. 9, p. 2323, 2002.
- [27] KAPFER, S. C.; KRAUTH, W. Two-dimensional melting: From liquid-hexatic coexistence to continuous transitions. *Phys. Rev. Lett.*, v. 114, p. 035702, Jan 2015.
- [28] KORSHUNOV, S. E. Possible splitting of a phase transition in a 2d XY model. *JETP*, v. 41, p. 263, 1985.
- [29] LEE, D. H.; GRINSTEIN, G. Strings in two-dimensional classical XY models. *Phys. Rev. Lett.*, v. 55, p. 541–544, Jul 1985.
- [30] 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.
- [31] DIAN, M.; HLUBINA, R. Spin-ice phase in a modified XY model. *Phys. Rev. B*, v. 84, p. 224420, Dec 2011.
- [32] 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.
- [33] 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.
- [34] BONNES, L.; WESSEL, S. Half-vortex unbinding and Ising transition in constrained superfluids. *Phys. Rev. B*, v. 85, p. 094513, Mar 2012.

-
- [35] 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.
- [36] KORSHUNOV, S. Incommensurate vortices and phase transitions in two-dimensional XY models with interaction having auxiliary minima. *arXiv:1207.2349*.
- [37] GRASON, G. M. Structural transitions and soft modes in frustrated dna crystals. *EPL (Europhysics Letters)*, v. 83, n. 5, p. 58003, 2008.
- [38] CAIRNS, A. B. et al. Encoding complexity within supramolecular analogues of frustrated magnets. *Nature Chemistry*, v. 8, p. 442, 2016.
- [39] ŽUKOVIČ, M. Frustrated ground states of a generalized XY model and their mapping to nonmagnetic structural analogs. *Phys. Rev. B*, v. 94, p. 014438, 2016.
- [40] NGO, S.; GINELLI, F.; CHATÉ, H. Competing ferromagnetic and nematic alignment in self-propelled polar particles. *Phys. Rev. E*, v. 86, p. 050101, Nov 2012.
- [41] NEWMAN, E.; BARKEMA, G. *Monte Carlo Methods in Statistical Physics*. [S.l.]: Clarendon Press, 1999.
- [42] 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.
- [43] TOBOCHNIK, J.; CHESTER, G. V. Monte carlo study of the planar spin model. *Phys. Rev. B*, v. 20, p. 3761–3769, Nov 1979.
- [44] 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.
- [45] OLSSON, P. Effective vortex interaction in the two-dimensional XY model. *Phys. Rev. B*, v. 46, p. 14598–14616, Dec 1992.
- [46] 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.
- [47] 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.

-
- [48] MINNHAGEN, P. The two-dimensional Coulomb gas, vortex unbinding, and superfluid-superconducting films. *Rev. Mod. Phys.*, v. 59, p. 1001–1066, Oct 1987.
- [49] 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.
- [50] 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.
- [51] Lan, T.-Y.; Hsieh, Y.-D.; Kao, Y.-J. High-precision Monte Carlo study of the three-dimensional XY model on GPU. *ArXiv e-prints*, nov. 2012.
- [52] GOTTLOB, A. P.; HASENBUSCH, M. Critical behaviour of the 3d xy -model: a monte carlo study.
- [53] JEON, I.-H.; SHIN, J.-G.; CHA, M.-C. Critical properties of the three-dimensional xy model in large-scale monte-carlo simulations. *Journal of the Korean Physical Society*, v. 60, n. 4, p. 581–584, 2012.
- [54] 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.
- [55] SERNA, P.; CHALKER, J. T.; FENDLEY, P. Deconfinement transitions in a generalised XY model. *arXiv:1706.01475*, jun. 2017.
- [56] 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.
- [57] CANOVA GABRIEL ANTONIO, A. J. J. L. Y. *Fases ordenadas no modelo XY generalizado*. Dissertação (Mestrado) — Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre - Rio Grande do Sul - Brasil, 2013.
- [58] CANOVA, G. A.; LEVIN, Y.; ARENZON, J. J. Kosterlitz-Thouless and Potts transitions in a generalized xy model. *Phys. Rev. E*, v. 89, p. 012126, Jan 2014.
- [59] WOLFF, U. Collective Monte Carlo updating for spin systems. *Phys. Rev. Lett.*, v. 62, p. 361–364, Jan 1989.
- [60] SWENDSEN, R. H.; WANG, J.-S. Nonuniversal critical dynamics in monte carlo simulations. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 58, p. 86–88, Jan 1987.

-
- [61] ROMANO, S. Topological transitions in two-dimensional lattice spin models. *Phys. Rev. E*, v. 73, p. 042701, Apr 2006.
- [62] CANOVA, G. A.; LEVIN, Y.; ARENZON, J. J. Kosterlitz-Thouless and Potts transitions in a generalized xy model. *Phys. Rev. E*, American Physical Society, v. 89, p. 012126, Jan 2014.
- [63] WU, F. Y. The potts model. *Rev. Mod. Phys.*, American Physical Society, v. 54, p. 235–268, Jan 1982.
- [64] CANOVA, G. A.; LEVIN, Y.; ARENZON, J. J. Competing nematic interactions in a generalized xy model in two and three dimensions. *Phys. Rev. E*, American Physical Society, v. 94, p. 032140, Sep 2016.
- [65] HASENBUSCH, M. The Binder cumulant at the Kosterlitz–Thouless transition. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, v. 2008, n. 08, p. P08003, 2008.
- [66] BINDER, K. Critical properties from Monte Carlo coarse graining and renormalization. *Phys. Rev. Lett.*, v. 47, p. 693–696, Aug 1981.
- [67] LOISON, D. Binder’s cumulant for the Kosterlitz–Thouless transition. *Journal of Physics: Condensed Matter*, v. 11, n. 34, p. L401, 1999.
- [68] 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.
- [69] LIPA, J. A. et al. Specific heat of liquid helium in zero gravity very near the lambda point. *Phys. Rev. B*, v. 68, p. 174518, Nov 2003.
- [70] HASENBUSCH, M. Finite size scaling study of lattice models in the three-dimensional ising universality class. *Phys. Rev. B*, v. 82, p. 174433, Nov 2010.
- [71] CAMPOSTRINI, M. et al. Critical behavior of the three-dimensional XY universality class. *Phys. Rev. B*, v. 63, p. 214503, May 2001.
- [72] CAMPOSTRINI, M. et al. 25th-order high-temperature expansion results for three-dimensional ising-like systems on the simple-cubic lattice. *Phys. Rev. E*, v. 65, p. 066127, Jun 2002.
- [73] DENG, Y.; BLÖTE, H. W. J. Simultaneous analysis of several models in the three-dimensional ising universality class. *Phys. Rev. E*, v. 68, p. 036125, Sep 2003.

-
- [74] BERTHIER, L.; HOLDSWORTH, P. C. W.; SELLITTO, M. Nonequilibrium critical dynamics of the two-dimensional XY model. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, v. 34, p. 1805–1824, 2001.
- [75] SINGH, A.; PURI, S.; MISHRA, H. Domain growth in chiral phase transitions. *Nuc. Phys. A*, v. 864, p. 176–202, 2011.
- [76] HU, H.; DENG, Y.; BLÖTE, H. Berezinskii-Kosterlitz-Thouless-like percolation transitions in the two-dimensional XY model. *Physical Review E*, v. 83, p. 1–9, 2011.
- [77] ARENZON, J. J. et al. Exact results for curvature-driven coarsening in two dimensions. *Phys. Rev. Lett.*, v. 98, n. 14, p. 145701, 2007.
- [78] SICILIA, A. et al. Domain growth morphology in curvature-driven two-dimensional coarsening. *Phys. Rev. E*, v. 76, n. 6, p. 061116, 2007.
- [79] SICILIA, A. et al. Experimental test of curvature-driven dynamics in the phase ordering of a two dimensional liquid crystal. *Phys. Rev. Lett.*, v. 101, p. 197801, 2008.
- [80] CORBERI, F.; LIPPIELLO, E.; ZANNETTI, M. Influence of thermal fluctuations on the geometry of interfaces of the quenched Ising model. *Phys. Rev. E*, v. 78, 2008.
- [81] BLANCHARD, T. et al. How soon after a zero-temperature quench is the fate of the Ising model sealed? *EPL (Europhysics Lett.)*, v. 106, n. 6, p. 66001, 2014.
- [82] LOUREIRO, M. P. O. et al. Curvature-driven coarsening in the two-dimensional Potts model. *Phys. Rev. E*, v. 81, n. 2, p. 021129, 2010.
- [83] LOUREIRO, M. P. O.; ARENZON, J. J.; CUGLIANDOLO, L. F. Geometrical properties of potts model during the coarsening regime. *Phys. Rev. E*, v. 85, p. 021135, 2012.
- [84] KALENTEV, O. et al. Connected component labeling on a 2d grid using CUDA. *Journal of Parallel and Distributed Computing*, v. 71, n. 4, p. 615 – 620, 2011.
- [85] KOMURA, Y. Gpu-based cluster-labeling algorithm without the use of conventional iteration: Application to the Swendsen–Wang multi-cluster spin flip algorithm. *Computer Physics Communications*, v. 194, p. 54 – 58, 2015.

- [86] BARASH, L. Y.; SHCHUR, L. N. Prand: GPU accelerated parallel random number generation library: Using most reliable algorithms and applying parallelism of modern GPUs and CPUs. *Computer Physics Communications*, v. 185, n. 4, p. 1343 – 1353, 2014.