

SALÃO DE
INICIAÇÃO CIENTÍFICA
XXIX SIC
**UFRGS**
PROPESQ



múltipla 
UNIVERSIDADE
inovadora  inspiradora

Evento	Salão UFRGS 2017: SIC - XXIX SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
Ano	2017
Local	Campus do Vale
Título	Gases de Rede com Exclusão de Vizinhos - Rede Honeycomb
Autor	FILIPPE DA CUNHA THEWES
Orientador	HEITOR CARPES MARQUES FERNANDES

Gases de Rede com Exclusão de Vizinhos – Rede *Honeycomb*

Aluno: Filipe da Cunha Thewes – Instituto de Física – UFRGS

Orientador: Heitor Carpes Marques Fernandes

Gases de rede são modelos discretizados onde partículas ocupam sítios em uma rede cristalina. Quando é adicionada a exclusão de vizinhos de ordem até k , estes vizinhos são impedidos de serem ocupados por outras partículas, gerando assim uma área efetiva para cada partícula. Em uma abordagem grande-canônica, permite-se flutuar o número de partículas no sistema. A medida que o potencial químico é variado, observa-se transições de fase de diferentes tipos, dependendo da exclusão.

Como continuação dos trabalhos desenvolvidos nos anos anteriores, foram realizadas simulações de Monte Carlo nas redes *Honeycomb* com exclusão de até segundos e até terceiros vizinhos. Em cada uma das redes, foram exploradas as simetrias do problema e as implicações que estas simetrias têm na definição de um parâmetro de ordem capaz de caracterizar as possíveis transições de fase que os sistemas possam apresentar.

De modo a explorar estas implicações, foram obtidos resultados por meio dos algoritmos de Metropolis e Wang-Landau. Valendo-se das técnicas desenvolvidas anteriormente, a saber, escala de tamanho finito e repesagem de histogramas, analisou-se estes resultados a fim de estudar a transição de fase. Entretanto, ambos os algoritmos, quando aplicados da maneira usual, não foram capazes de realizar a correta amostragem das fases existentes, impossibilitando a caracterização da transição de fase.

Por isto, estão sendo exploradas algumas possíveis maneiras de se tornar a amostragem nestes sistemas mais eficiente. Algoritmos capazes de reduzir o tempo de autocorrelação e, por consequência, aumentar a eficiência da amostragem, estão sendo estudados e, quando julgados apropriados, sendo implementados. Os efeitos destes algoritmos nos sistemas em estudo ainda estão sendo explorados.