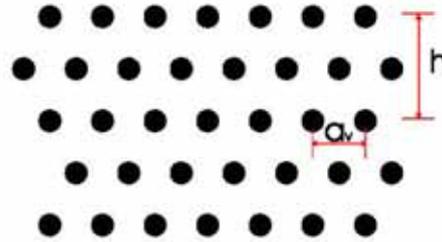


Figura 4.14: Configuração estável em  $T = 0$  ( $\alpha_p = 360$ ) de rede de vórtices (círculos fechados) interagindo com uma linha de centros de ancoragem (círculos abertos) com  $N_v = 4$  até  $N_v = 64$ .



$N_v$	$a_v$ ( $a_v/a_p$ ou $a_p/a_v$ )	$h$ ( $h/a_p$ ou $a_p/h$ )
4	4,29828 (0,9306048)	7,4448 (0,9306049)
8	3,83934 (0,75984)	5,26429 (0,75983)
12	2,48161 (0,80593)	4,29830 (0,93061)
16	2,14914(0,930604)	3,72240(0,9306)
20	1,92220 (0,96112)	3,32930(0,83234)
24	1,75470(0,87739)	3,03920(0,75981)
28	1,62460(0,81230)	2,81388(0,71076)
32	1,51960(0,75984)	2,63201 (0,75987)
36	1,43276(0,71638)	2,48162(0,80593)
40	1,35923(0,67962)	2,35402(0,84954)
44	1,29594(0,64797)	2,24451(0,89104)
48	1,2408 (0,62040)	2,14091 (0,93061)
52	1,1920(0,59603)	2,06416 (0,96871)
56	1,1486(0,57434)	1,98954 (0,99472)
60	1,1097 (0,44487)	1,9220(0,96103)
64	1,07457(0,53728) ou (0,9306048)	1,8612(0,93065)

Figura 4.15: Configuração de uma rede de vórtices na ausência de substrato caracterizado pelo seu parâmetro de rede  $a_v$  e a menor distância em uma linha reta, na direção perpendicular a  $a_v$ , entre dois vórtices  $h$ . O confinamento da rede em uma linha de centros discretos reduz-se ao problema de comensurabilidade entre o parâmetro de rede do substrato  $a_p$  e  $a_v$  e  $h$ . A tabela demonstra que quanto mais próximo a razão destas grandezas aproxima-se da unidade, maior a probabilidade da orientação seguir a respectiva constante. Os casos específicos de  $N_v = 24$  e  $N_v = 28$  são aqueles em que as razões mais distanciam-se da unidade e, logo, as duas direções não são favoráveis. No caso de  $N_v = 64$ , a densidade é alta o bastante para induzir vórtices entre os sítios de ancoragem.

temperaturas ainda maiores, a curva do calor específico tem um “pico”, revelando o aparecimento de disclinações desacopladas. A partir disso, a rede está derretida (veja figura (4.16) e (4.17)) e vórtices estão totalmente desacoplados dos defeitos.

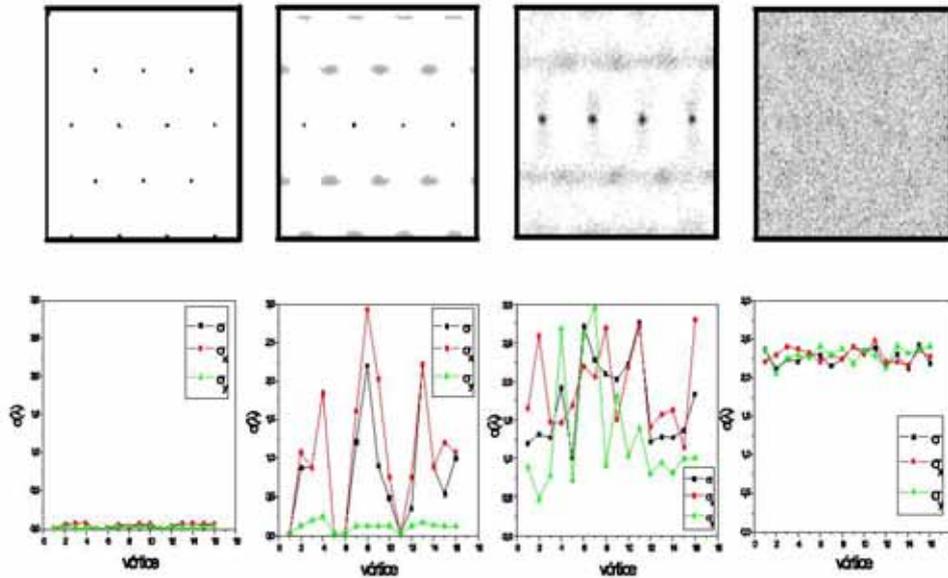


Figura 4.16: Matriz posição média e variância posicional para rede de vórtices interagindo com uma linha de poços gaussianos no centro da célula de simulação. Do lado esquerdo ao direito a temperatura está crescendo. Note que em uma determinada temperatura apenas quatro vórtices possuem variância nula, correspondendo aos vórtices ancorados. Em temperaturas mais altas, a variância em  $y$  torna-se maior que na direção  $x$ . Tal fato aponta que existe a realimentação do sítio cada vez que um vórtice o desocupa. Para temperaturas ainda maiores a rede desacopla-se do substrato e se funde por completo.

Este controle, em função da temperatura, do tipo de defeito topológico da rede de vórtices também pode ser visto em células de simulação maiores. Neste caso, foram analisados sistemas com a mesma densidade, porém com o dobro do tamanho  $L_x = L_y = 16\lambda$  (figura (4.18)). Observou-se que a sequência do tipo de

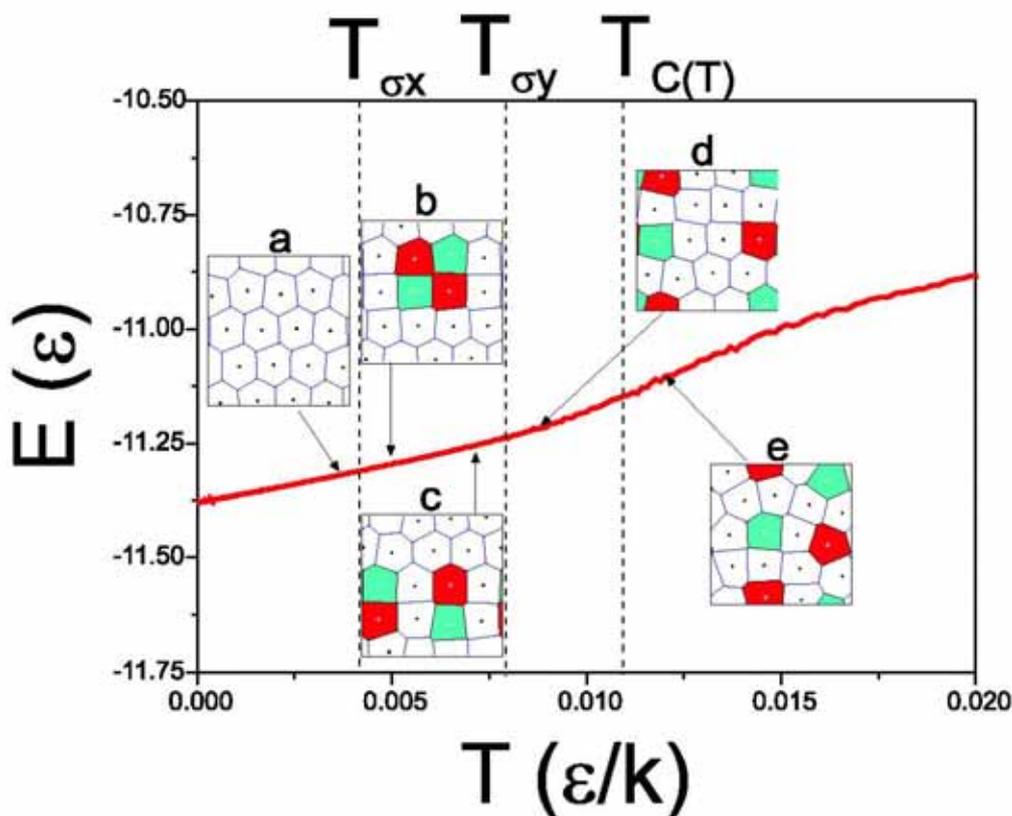


Figura 4.17: Energia interna versus temperatura para uma rede com  $N_v = 16$  vórtices interagindo com uma linha reta de centros de ancoragem.  $T_{\sigma_x}$  e  $T_{\sigma_y}$  são as temperaturas em que a variância em  $x$  e  $y$  explodem (no sentido de baixa a alta temperatura).  $T_{C(T)}$  é a temperatura onde  $C(T) \times T$  apresenta um máximo. Figuras internas menores: Configuração das redes de vórtices para o instante antes do surgimento do primeiro defeito topológico (a), quando na presença de um par de deslocação acoplado (b), com um par de deslocação desacoplado com vetor de Burgers paralelo (c) e perpendicular (d) à linha dos defeitos e finalmente (e) com disclinações desacopladas. As figuras de cor verde e vermelho correspondem a vórtices com cinco e sete primeiros vizinhos, respectivamente.

defeito topológico que aparece em temperaturas crescentes é semelhante.

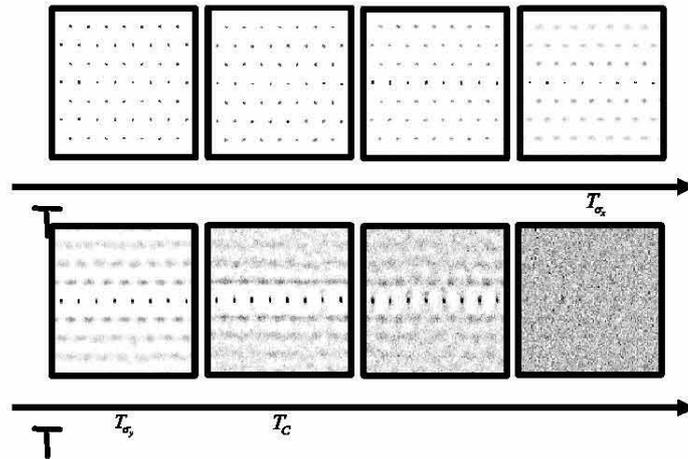


Figura 4.18: Matriz densidade de vórtices para  $N_v = 64$  interagindo com uma linha de defeitos gaussianos central a célula de simulação (na direção horizontal) de tamanho  $L = 16\lambda$ . A temperatura cresce no sentido da esquerda para direita e de cima para baixo. Os pontos em vermelho correspondem aos vórtices ancorados. Note a oscilação unidimensional crescente e o início do movimento de vórtices na direção perpendicular quando  $T = T_{\sigma_v}$ . Em  $T = T_c$  os vórtices ancorados começam a escapar dos defeitos.

Assim, para temperaturas crescentes, observa-se o aparecimento de pares de deslocações acopladas, pares de deslocações desacopladas com o vetor de Burgers paralelo à linha de defeito, pares de deslocações desacopladas com vetor de Burgers em direção aleatória e, finalmente, disclinações desacopladas. Consequentemente, mesmo em sistemas maiores, a linha de ancoragem consegue regular os diferentes tipos de defeitos que aparecem gradativamente quando a temperatura aumenta.

Mais ainda, esse tipo de controle de defeitos também aparece em estruturas mais simples de substrato, como por exemplo calhas. Estas podem ser interpretadas como estruturas obtidas do caso anterior, linhas discretas de poços, no limite de parâmetro de rede  $a_p \rightarrow 0$ . Neste caso, o substrato consegue induzir inicialmente uma oscilação coletiva unidimensional que acaba por desestabilizar a

estrutura da rede quando  $T$  é acrescido (figura (4.19)).

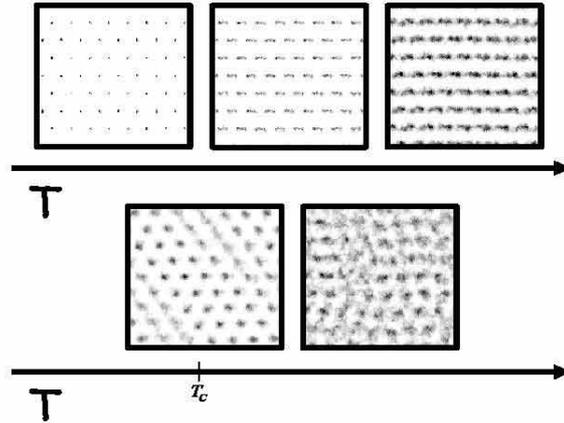


Figura 4.19: Matriz densidade de vórtices para  $N_v = 64$  interagindo com uma calha central (na direção horizontal) na célula de simulação de tamanho  $L = 16\lambda$ . A temperatura cresce no sentido da esquerda para direita e de cima para baixo. Note a oscilação unidimensional, coerente, para temperaturas baixas e o início do movimento de vórtices em outras direções apenas quando  $T = T_c$ . Nesta temperatura, os vórtices ancorados começam a escapar dos defeitos.

A curva da dispersão posicional em função da temperatura para vórtices interagindo com uma calha (figura (4.20)) não apresenta os “saltos” encontrados para defeitos pontuais em temperaturas características  $T_{\sigma_x}$  ou  $T_{\sigma_y}$ . Pelo contrário, a oscilação unidimensional coerente a baixas temperaturas provoca o aumento gradativo da dispersão em uma direção a medida que os defeitos topológicos aparecem, tornado a transição mais larga e suave.

Os valores das temperaturas em que os defeitos topológicos na rede de vórtices aparecem, obedecendo a mesma ordem encontrada nos demais casos, são menores nas calhas que os respectivos valores no caso de substratos discretos. Isto leva a crer, assim, que os defeitos pontuais são mais efetivos na ancoragem de linhas de fluxo magnéticos.

Para todos os casos em que  $L = 16\lambda$ , linha pontual ou calha, as curvas de

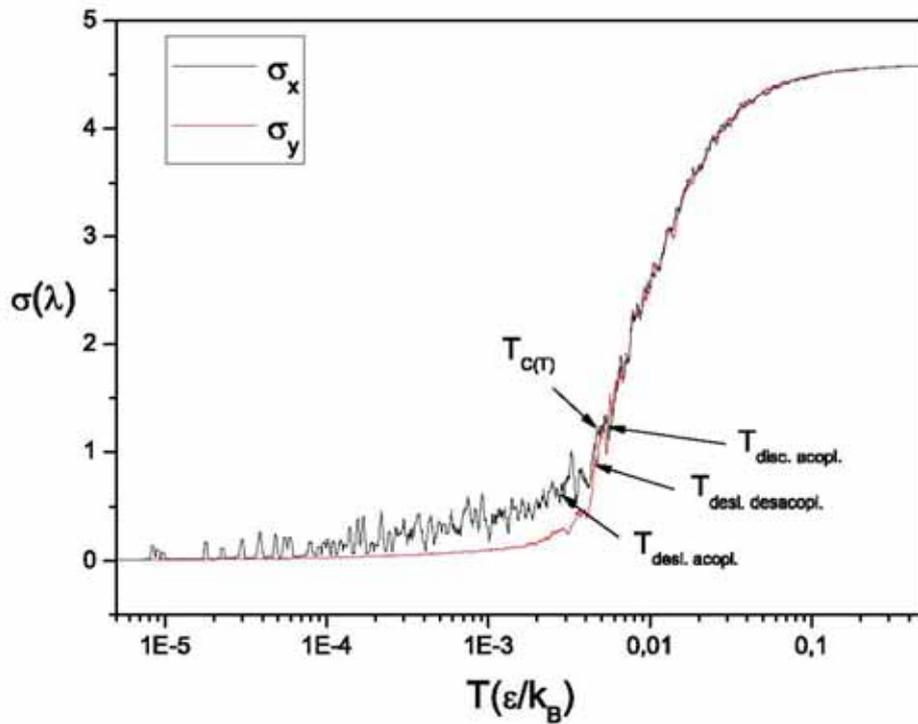


Figura 4.20: Variância posicional em função da temperatura para uma rede de vórtices ( $N_v = 64$ ) interagindo com uma calha. Os defeitos topológicos aparecem gradativamente a medida em que a temperatura é acrescida, porém sem temperaturas características, isto é, sem “picos” na curva. Note que, mesmo a baixas temperaturas, a dispersão na direção  $x$  apresenta “saltos” devido a oscilação da rede induzida pelo grau de liberdade imposto pela calha.

função de estrutura  $S(\vec{k})$  (figura (4.21)) demonstram que existe grau de ordenamento orientacional até  $T = T_c$ , onde logo após é perdido. O ordenamento translacional, por sua vez, é de curto alcance já em valores próximos a  $T_{\sigma_x}$  devido ao aparecimento dos primeiros defeitos topológicos.

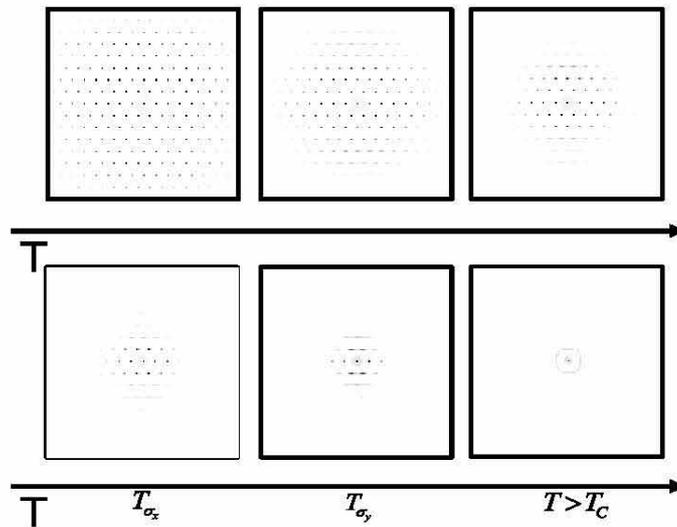


Figura 4.21: Função de estrutura  $S(\vec{k})$  para valores crescentes de temperatura relacionado a uma rede de vórtices interagindo com uma linha de defeitos gaussianos ( $N_v = 64$  e  $L = 16\lambda$ ). Perceba o curto grau de ordenamento translacional para temperaturas maiores que  $T_{\sigma_x}$ , enquanto que o ordenamento orientacional só é perdido para  $T > T_c$ .

Se a magnitude do potencial de ancoragem for feita variar, pode-se perceber perfeitamente sua contribuição na fusão da rede. No caso, sistemas de alto valor de  $\alpha_p$  induzem redes estáveis até temperaturas elevadas. Curvas de calor específico (figura 4.22) demonstram que para valores de profundidade do poço moderados (no caso específico  $\alpha_p < 11$ ) existe duas fases, onde a rede desacopla-se do substrato e depois definitivamente funde-se. Valores elevados de  $\alpha_p$  inibem a existência da rede flutuante fazendo com que a maior parte da energia seja absorvida para desacoplar os vórtices dos sítios.

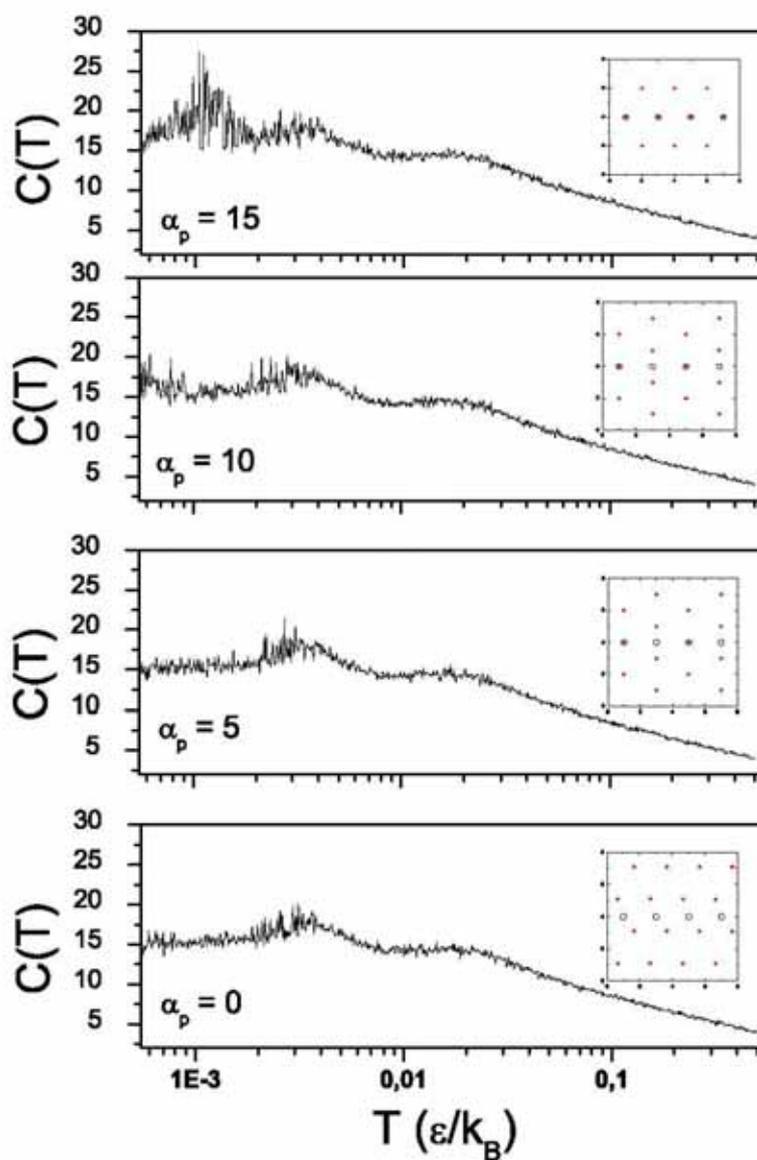


Figura 4.22: Calor específico em função da temperatura para vários valores de  $\alpha_p$ . Note o surgimento do pico relacionado à presença do substrato cada vez maior e em temperaturas maiores. Nas figuras internas, demonstra-se a configuração de equilíbrio da rede em  $T = 0$  para cada valor de  $\alpha_p$ .

Para  $\alpha_p$  ainda maior o pico propriamente relacionado a fusão é muito menor que a magnitude da curva no instante do desacoplamento da rede e visualmente desaparece. A figura (4.23) mostra curvas de calor específico para valores de  $\alpha_p > 25$ . A figura (4.24), por sua vez, revela a existência de duas temperaturas críticas para valores moderados de  $\alpha_p$ . Acima de  $\alpha_p = 11$ , o “pico” relacionado ao *depinning* tem magnitude alta o bastante para “apagar” o máximo da fusão propriamente dita e induzir o sistema a derreter e desacoplar-se do substrato ao mesmo tempo.

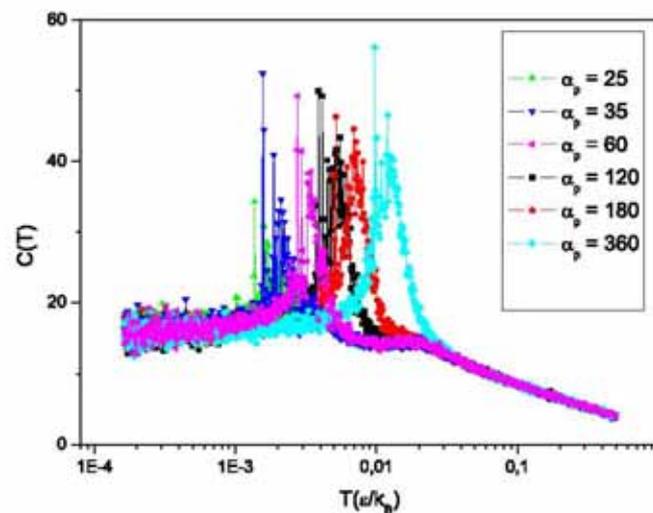


Figura 4.23: Calor específico em função da temperatura para vários valores de  $\alpha_p$ . Note que para valores de  $\alpha_p$  crescentes o “pico” alarga-se e se direciona para altos valores de temperatura.

Note que  $N_v = 16$  é um caso especial onde um dos vetores básicos da célula unitária de uma rede de vórtices ideal, com simetria triangular, alinha-se perfeitamente com a linha de defeitos, tornando-se comensuráveis. Quando a rede de vórtices alinha-se de uma maneira diferente desta, contudo, o processo de fusão acontece de outras maneiras. Por exemplo, com  $N_v = 48$ , a rede de vórtices alinha-se perpendicular à estrutura do caso  $N_v = 16$ . Nesta situação, defeitos topológicos aparecem, em função da temperatura, na mesma ordem (deslocações

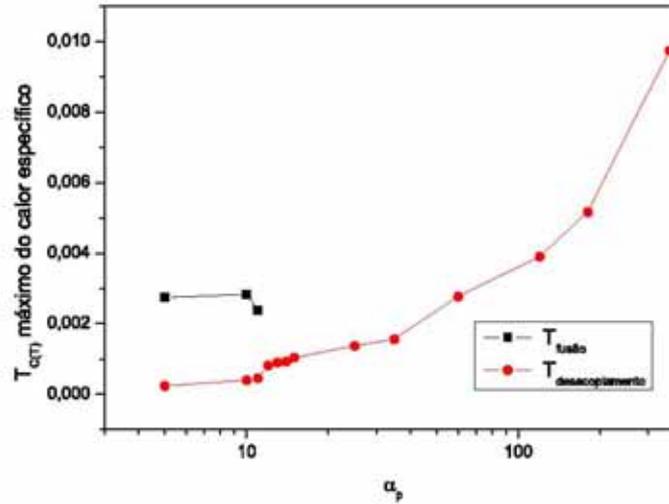


Figura 4.24: Valor do máximo do calor específico para vários valores de  $\alpha_p$ . Se  $\alpha_p < 12$ , pode-se determinar dois máximos relacionados ao desacoplamento da rede do substrato e a fusão. Para  $\alpha_p > 12$ , o “pico” do desacoplamento tem máximo muito maior que o da fusão propriamente dita. Este “pico” apresenta-se em temperaturas cada vez mais altas e de largura cada vez maior se o valor de  $\alpha_p$  é acrescido.

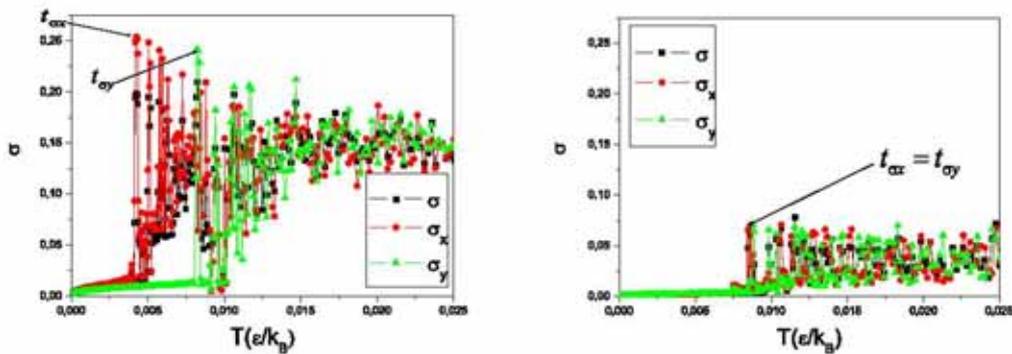


Figura 4.25: Variância posicional dos vórtices interagindo com uma linha de centros de ancoragem. À esquerda e a direita uma rede com  $N_v = 32$  e  $N_v = 48$ , respectivamente. No primeiro caso, a prova da existência da fase esmética em uma larga faixa de temperatura quando  $T_{\sigma_x} < T_{\sigma_y}$ . No segundo caso, não há fase esmética visto que  $T_{\sigma_x} = T_{\sigma_y}$ .

acopladas - deslocções desacopladas - disclinações desacopladas), mas em diferentes direções. As curvas da variância posicional dos vórtices mostram que todos os valores de  $\sigma's$  (nas direções  $x$  e  $y$ ) crescem na mesma temperatura de modo a não revelar o aparecimento de fase esmética (veja figura (4.25)).

Se a orientação da rede de linhas de fluxo frente à linha de ancoragem for mais complexa, como no caso  $N_v = 32$ , apesar dos defeitos também aparecerem na mesma ordem, a temperatura em que estes aparecem é menor que nos casos anteriores. Isto acontece porque a configuração mais estável em  $T \approx 0$  para  $N_v = 32$  é muito diferente da configuração triangular (mais estável quando a rede está ausente de substrato). Desta forma, os defeitos topológicos proliferam-se mais facilmente. À baixa temperatura, a rede de vórtices oscilará entre diferentes configurações e o processo de fusão irá ocorrer, para temperaturas crescentes, nestas direções, correspondendo ao que se pode chamar de “eixo fácil de fusão”. As figuras (4.26) e (4.27) demonstram a matriz posição média das partículas para  $N_v = 32$  e  $N_v = 48$  vórtices, respectivamente. No primeiro caso, atente para a formação de “rios” nas direções de alta mobilidade dos vórtices (direções de frustação geométrica). Para  $N_v = 48$ , a rede de vórtices ancora comensuravelmente na linha de defeitos ao ponto da fusão ocorrer isotropicamente.

No segundo caso de configuração de substrato, duas linhas de defeitos paralelos, vários “snapshots” foram obtidos para diferentes valores de número de vórtices (figura 4.28).

Uma das ocorrências mais interessantes é quando o número de vórtices é igual a  $N_v = 8$ . Nesta densidade, a rede de linhas de fluxo constitui-se de dois vórtices ancorados, e oscila entre duas configurações: uma rede com vórtices formando um pentágono e outra configuração de rede com simetria triangular, como demonstrado na figura (4.29).

Esta instabilidade é perdida quando a magnitude do defeito, regulado pelo fator  $\alpha_p$ , é reduzida. Neste caso, a rede aloca-se na linha de defeitos em apenas um sítio se  $\alpha_p < 170$  (figura (4.30)).

Se o número de vórtices é dado por  $N_v = 16$ , observa-se dois estados degenerados possíveis de configuração de linhas de fluxo em  $T \approx 0$ . O caso demonstrado

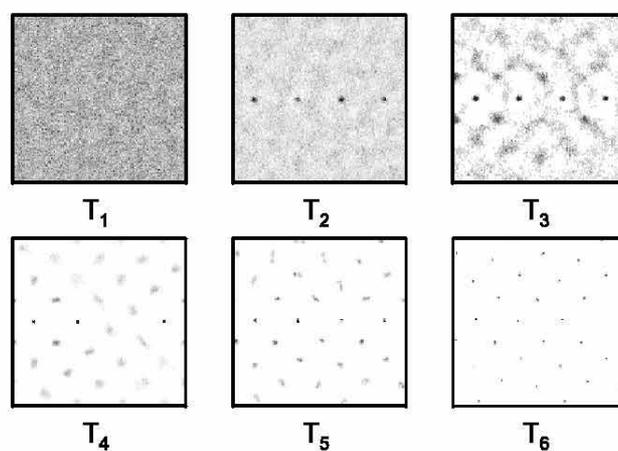


Figura 4.26: Distribuição posicional dos vórtices interagindo com uma linha de defeitos gaussianos no centro da célula de simulação para um sistema com  $N_v = 32$ .  $T_1 > T_2 > T_3 > T_4 > T_5 > T_6$ .

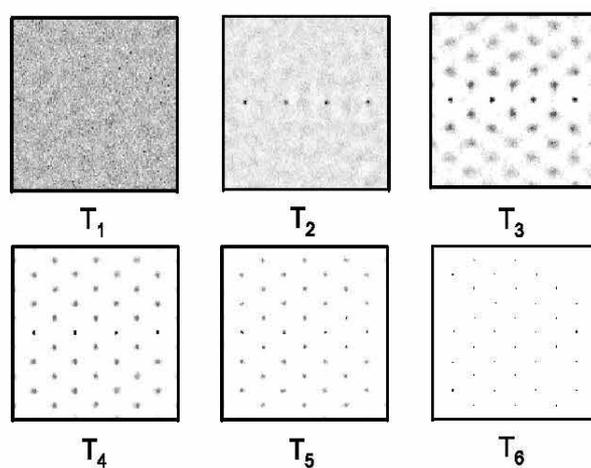


Figura 4.27: Distribuição posicional dos vórtices interagindo com uma linha de defeitos gaussianos no centro da célula de simulação para um sistema com  $N_v = 48$ .  $T_1 > T_2 > T_3 > T_4 > T_5 > T_6$ .

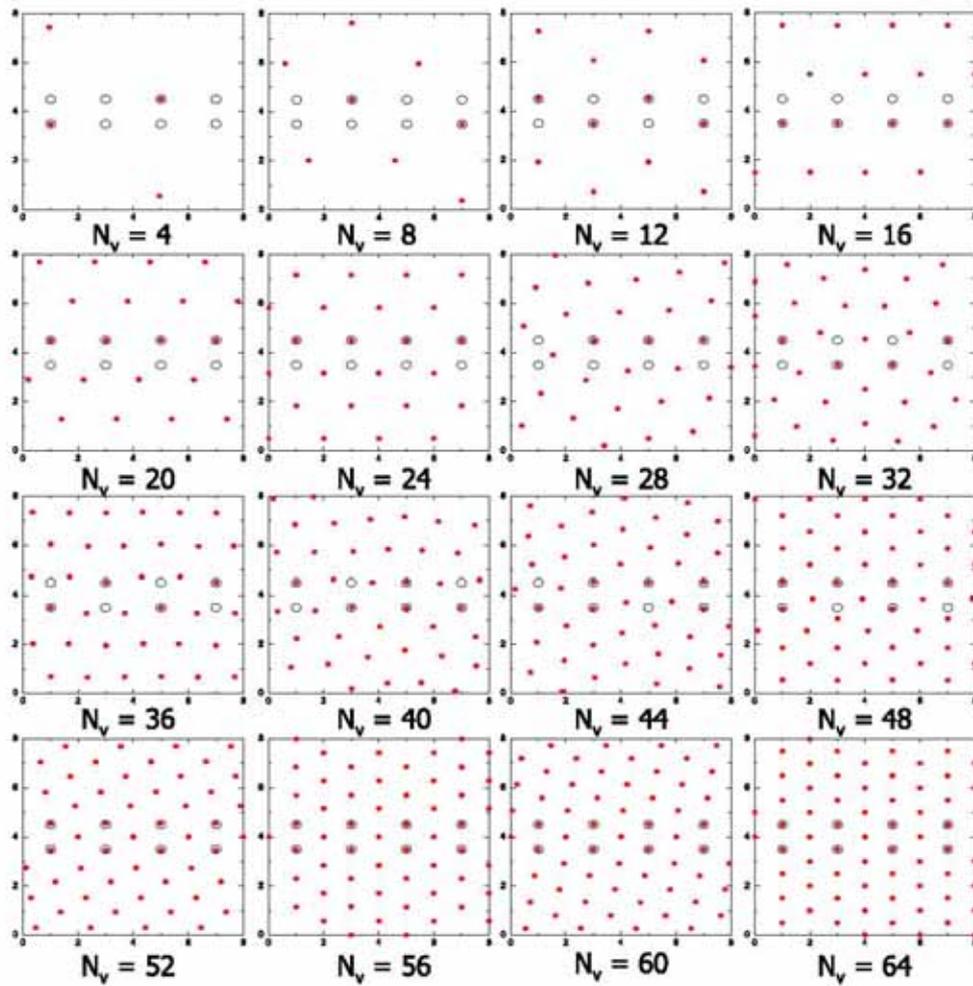


Figura 4.28: Configuração de rede de vórtices de várias densidades ( $n_v = 1..16$ ) interagindo com linhas paralelas de centros gaussianos de defeitos.

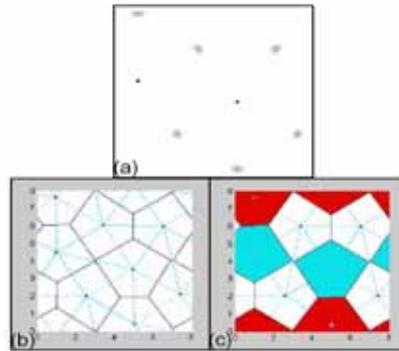


Figura 4.29: Matriz distribuição de probabilidade da posição do vórtices (a) e as duas possíveis configurações (parte (b) e (c)) encontradas quando a temperatura é baixa para um sistema com  $N_v = 8$  com duas linhas de centros de ancoragem. Em (b) todos os vórtices possuem seis primeiros vizinhos, enquanto que no caso (c) a rede apresenta pares com cinco (sinal de menos e preenchido em azul) e sete primeiros vizinhos (sinal de mais e preenchido em vermelho).

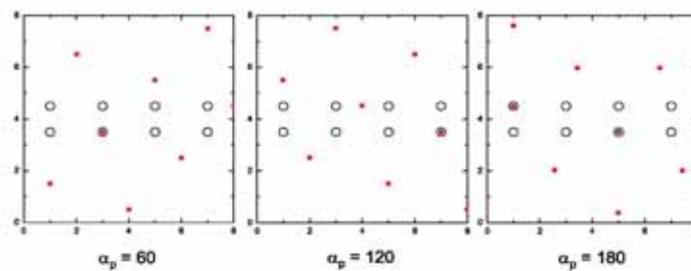


Figura 4.30: Configuração de uma rede de vórtices ( $N_v = 8$ ) interagindo com duas linhas pontuais de defeitos em diferentes valores de magnitude do defeito  $\alpha_p$ . Quando  $\alpha > 170$ , a rede quebra-se em uma fase pentagonal.

pela letra (b) da figura (4.31) possui orientação semelhante ao de uma linha de defeitos quando  $N_v = 16$  (figura (4.14)). A configuração demonstrada pela letra (a) da figura (4.31), por sua vez, pode ser interpretada como uma combinação de duas redes com estruturas semelhantes à encontrada quando  $N_v = 48$  vórtices interagem com uma linha de defeitos (novamente figura (4.14)). Porém, apesar da mesma densidade ( $N_v = 16$ ), estas duas configurações diferentes resultam em diferentes comportamentos frente à temperatura. Em um caso, existe a fusão isotrópica, mas em outro ela é anisotrópica. Nesta última possibilidade, temperaturas características são menores que no primeiro caso. Além disso, curvas da

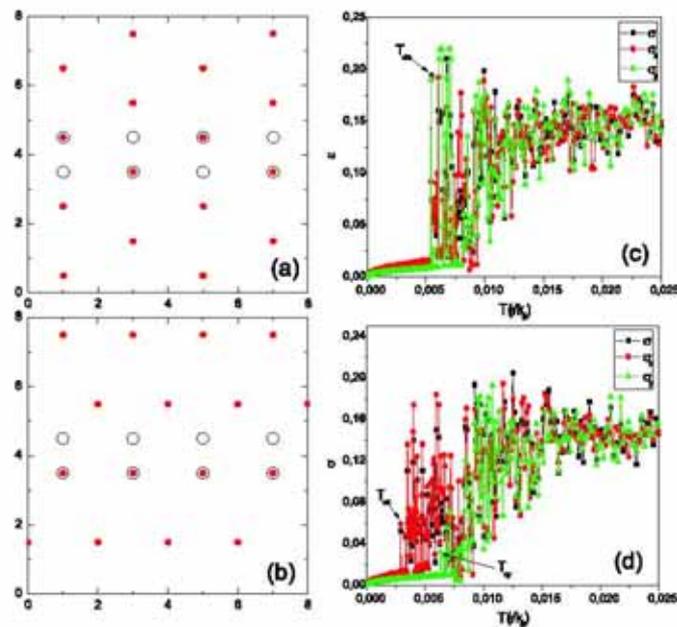


Figura 4.31: Estados degenerados de uma rede de vórtices (configurações (a) e (b)) submetidos a duas linhas paralelas de centros de ancoragem. Os dois casos assemelham-se aos encontrandos nas situações anteriores de uma linha de defeitos. (c) e (d) são as respectivas variâncias posicionais. A diferença entre estas reflete as diferentes configurações de mesma energia.

função de distribuição radial  $g(\vec{r})$  demonstram que a rede de vórtices no segundo caso é menos densa que no primeiro caso, o que viabiliza um processo de fusão bem diferente da fusão de uma rede triangular ideal.

Para o último caso, duas linhas perpendiculares de centros discretos gaussianos, novamente várias configurações de rede de vórtices foram obtidas (figura (4.32)). Porém, apenas foram estudados os casos mais interessantes. Se  $N_v = 16$ ,

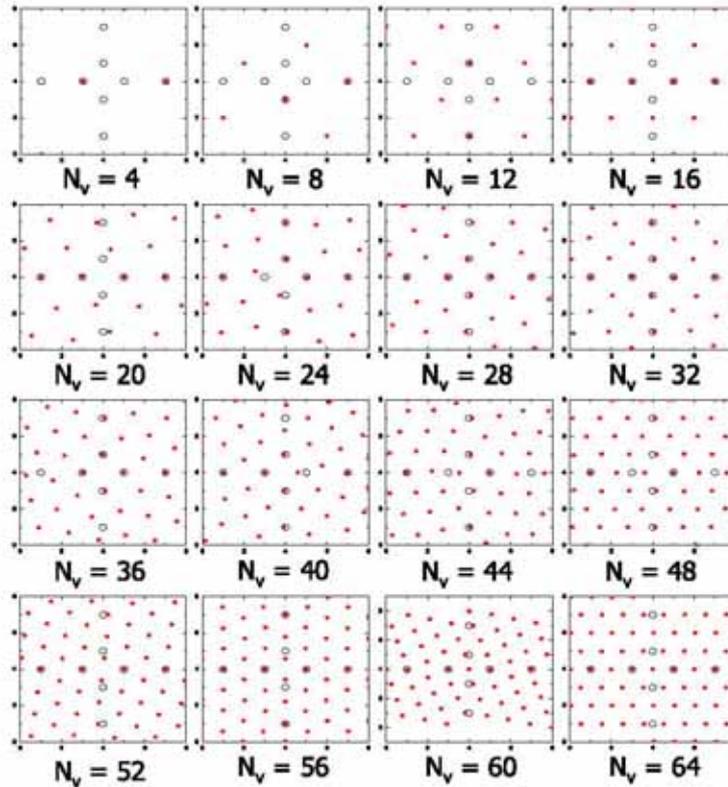


Figura 4.32: Configuração de uma rede de vórtices interagindo com duas linhas pontuais perpendiculares para diferentes valores de densidade.

por exemplo, a rede de vórtices escolhe uma direção particular para orientar-se quando  $T = 0$ . Neste caso, apenas sítios de ancoragem na direção  $x$  conseguem ser ocupados, embora a altas temperaturas todos os defeitos sejam preenchidos. O fato de todos os centros de ancoragem estarem preenchidos quando a temperatura é alta sugere um efeito de reentrância, onde a corrente crítica torna-se superior à encontrada em baixas temperaturas.

Além disso, sendo a orientação da rede de vórtices em relação aos defeitos,

em  $T = 0$ , similar ao caso de vórtices submetidos a uma linha de defeitos, ocorre também, em uma determinada faixa de temperatura, a existência de uma fase esmética, embora as temperaturas características sejam menores.

Por fim, se  $N_v = 64$ , apesar da alta densidade, percebe-se de modo discreto a existência da fase esmética.

### 4.3.3 Ordem da transição de fusão em duas dimensões.

Um dos principais desafios encontrados em simulação de Monte Carlo para modelos envolvendo transições de fases é determinar o quanto o tamanho finito dos sistemas influi nos resultados obtidos. Mesmo utilizando-se de condições de contorno periódicas, sabe-se que o tamanho finito destes por vezes induz respostas diferentes das encontradas em sistemas infinitos, ou pelo menos com dimensões maiores que o seu comprimento de correlação na transição  $\xi_c^2$ . O problema assume proporção maior dependendo do tipo de transição a que o sistema é submetido. Transições de fase de primeira ordem forte irão mostrar descontinuidades pronunciadas em quantidades termodinâmicas tais como energia interna ou parâmetro de ordem independente do tamanho do sistema. Transições de primeira ordem fraca, por sua vez, podem ser mal interpretadas como transições contínuas (transições de segunda ordem) se o tamanho do sistema em questão for menor que o comprimento de correlação na transição  $\xi_c$ .

Assim, objetivando confirmar a veracidade dos resultados e chegar a um maior controle do sistema a ser analisado, é de suma importância saber a ordem da transição em que as partículas do sistema são submetidas. No caso específico de vórtices, a natureza de longo alcance da interação ( $U_{ij}^{vv} \propto -\ln r_{ij}$ ) só aumenta o grau de complexidade da análise, visto ser difícil para estes definir o comprimento de correlação.

A ordem da transição de fusão de redes de vórtices em sistemas 2D na ausência de substrato foi analisada através de diversos critérios: histograma e curva de

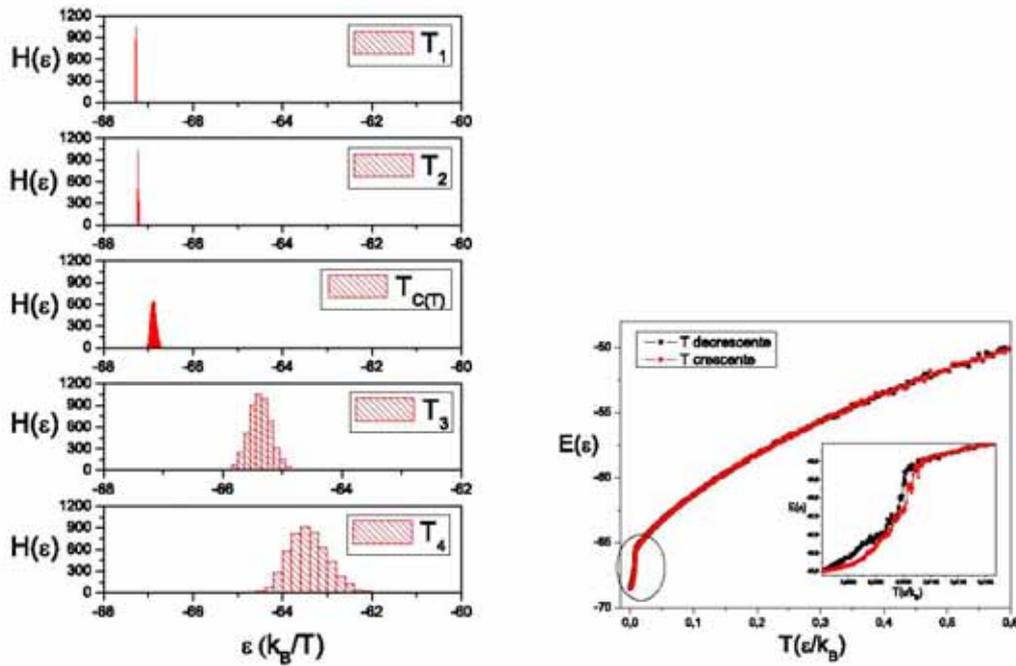


Figura 4.33: Figura da esquerda: Histograma de energia para temperaturas próximas à transição. Para todos os valores de temperatura, as curvas são suaves e não apresentam coexistência de dois “picos”, o que credita o caráter de segunda ordem à transição. Figura da direita: Curva de energia em função da temperatura para valores crescentes e decrescentes demonstrando a quase inexistência de histerese, o que sugere uma transição de segunda ordem.

histerese da energia (mostrados na figura (4.33)), e análise de tamanho finito. O histograma de energia para o sistema na região próxima à temperatura de fusão (adotada como sendo a temperatura em que existe o máximo da curva do calor específico) demonstrou a existência de uma curva contínua por todo o intervalo. Assim, a ausência de uma curva com dois máximos indica que, por este critério, a transição de fusão deva ser de segunda ordem ou de primeira ordem fraca (Choquard & Clerouin, 1983; Franz & Teitel, 1995). Por sua vez, a curva da energia do sistema em função da temperatura no sentido crescente e decrescente

<sup>2</sup>O comprimento de correlação  $\xi$  possui valor máximo na transição.

demonstrou não haver histerese apreciável no processo, o que credencia à transição a mesma ordem apontada no critério anterior.

Por último, a análise de tamanho finito aponta resultados conflitantes com o que é previsto na literatura tanto para transições contínuas como transições abruptas. Neste caso, utilizou-se das curvas de calor específico em função da temperatura, para sistemas com tamanho  $L = 2\lambda$  até  $L = 14\lambda$ , no intuito de inferir grandezas do tipo máximo do calor específico  $C_{\text{máx}}$ , temperatura do máximo do calor específico  $T_{C_{\text{máx}}}$  e largura da curva. Todas estas grandezas apresentaram crescimento quando o tamanho do sistema era aumentado. O comportamento destas duas últimas duas grandezas, em particular, diferiu completamente do que é esperado para transições de primeira ou de segunda ordem (veja apêndice A). Na figura (4.34) demonstra-se curvas do calor específico  $C(T)$  x  $T$  para sistemas com extensão  $L = 2\lambda$  até  $L = 14\lambda$ , mantendo constante a densidade de vórtices. Na figura seguinte (figura (4.35)), demonstra-se esquematicamente os valores obtidos para  $C_{\text{máx}}$ ,  $T_{C_{\text{máx}}}$  e a largura da curva  $\Delta T_{C(T)}$  em função do tamanho do sistema. Embora o comportamento do máximo do calor específico possa induzir uma transição aproximadamente de segunda ordem com expoente  $\frac{\alpha}{\nu} \approx 2.7$ , a dependência das duas outras curvas diferem por completo do previsto na literatura para ambos os tipos de transições (era de se esperar uma redução tanto na largura quanto na temperatura de transição). Isto revela o quanto é difícil caracterizar a ordem de transições envolvendo sistemas de interação de longo alcance. Assim, pode-se concluir que redes de vórtices em sistemas bidimensionais seguem as previsões de KTHNY, seja na presença, como apontado nas seções anteriores, ou na ausência de substratos. Porém, definir a ordem destas transições, através dos métodos usuais aqui apontados, revela ser um trabalho no mínimo delicado. Os resultados aqui obtidos sugerem, a princípio, que as transições sejam de segunda ordem.

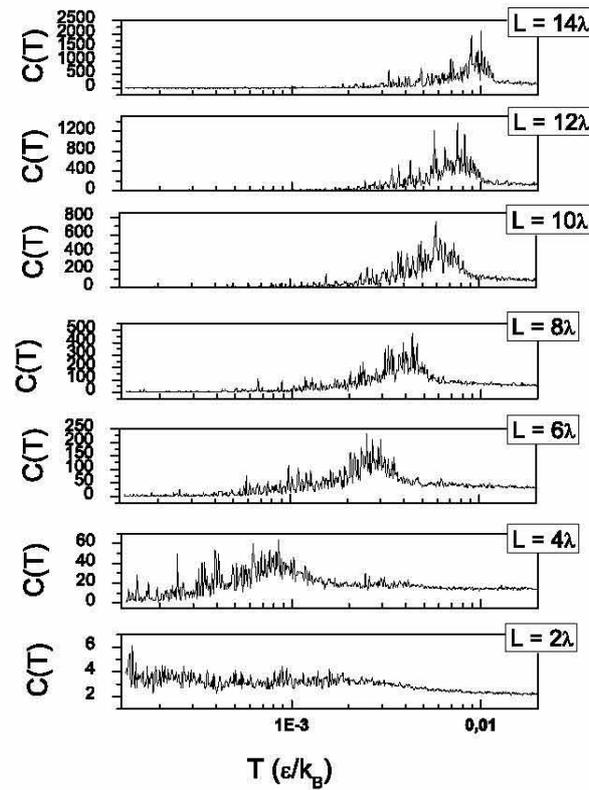


Figura 4.34: Calor específico em função da temperatura para sistemas de diversos tamanhos  $L$  e com densidade de vórtices constante  $H/H_1 = 4$ . Note que o máximo da curva cresce e acontece para temperaturas cada vez mais altas se o sistema é aumentado. Perceba também que a largura da transição cresce com o tamanho do sistema.

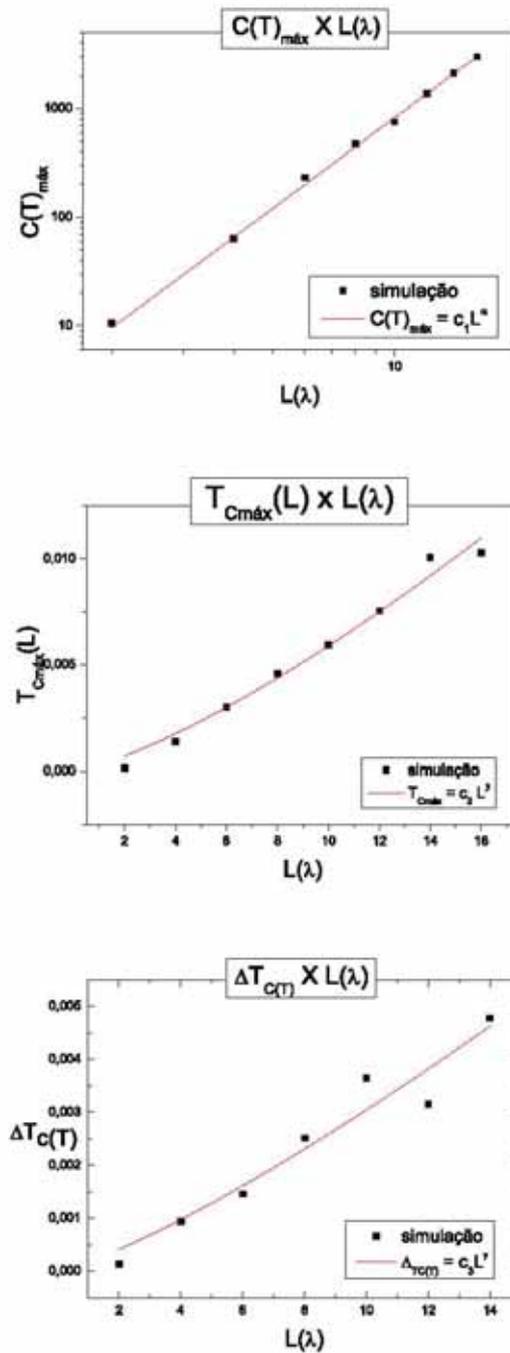


Figura 4.35: Resultados obtidos através das curvas do calor específico da figura anterior. Máxima na curva do calor específico (primeira figura), temperatura desta máxima (figura do meio) e largura da transição (figura de baixo) em função do tamanho do sistema  $L$ . Na primeira figura  $\alpha = 2,76 \pm 0,06$  e  $c_1 = 1,4 \pm 0,2$ . Na segunda curva  $c_2 = 0,00028 \pm 0,00008$  e  $\beta = 1,3 \pm 0,1$ . Na última,  $c_3 = 0,00017 \pm 0,00009$  e  $\gamma = 1,2 \pm 0,2$ .

# Capítulo 5

## Conclusões

Nesta tese, estudou-se diversas possibilidades de configuração de rede de vórtices submetidos aos mais diversos tipos de centros de ancoramento. Redes de aprisionamento de simetria retangular induziram perfis de redes de vórtices de dependência não trivial com o campo magnético externo  $H$  e com a anisotropia da rede  $\gamma$  de *pinning*. Tais configurações foram obtidas para todos os casos através de simulações de Monte Carlo usando o algoritmo de Metrópolis. Quando submetidas a temperaturas crescentes, estas redes, em casos específicos, apresentaram uma nova fase, a fase esmética, nascida da simples imposição do substrato anisotrópico. Assim, apesar da definição usual de fusão como fenômeno essencialmente isotrópico, nestes casos pode-se definir um processo de derretimento por etapas, cuja resposta das suas partículas constituintes (vórtices) é distinta nas duas principais direções  $x$  e  $y$  onde o substrato hospedeiro é orientado. Para valores específicos de densidade de vórtices  $H/H_1$ , obteve-se o diagrama de fases correspondente de  $T$  versus  $\gamma$ . É notória a existência de três fases bem definidas (sólido ancorado, esmética, líquido desacoplado) em todas elas. Também é fato que a região esmética encontra-se em grande parte do diagrama de fases justamente onde a interação defeito-vórtice supera as relações elásticas entre vórtice-vórtice, isto é, no limite de baixas densidades. A comparação entre substratos com redes de simetria retangular e quadrada de centros de ancoragem demonstrou que o primeiro caso consegue estabilizar melhor a rede de vórtices. Em todas as situações, o processo de ancoragem de vórtices por defeitos pode ser simplesmente reduzido ao problema de maximizar a menor distância entre os constituintes (vór-

tices), visto estarem estes relacionados repulsivamente.

A fusão da rede de vórtices, esta agora submetida a linhas de centros de aprisionamento isoladas ou calhas ou mesmo duas linhas, sejam elas perpendiculares ou paralelas, também foi estudada. No primeiro caso, o número particular de vórtices  $N_v = 16$  foi responsável pelo surgimento gradual, em temperatura crescente, de distintos tipos de defeitos topológicos. Assim, a imposição de redes de vórtices cuja distância média entre os seus constituintes é da ordem da separação dos centros de aprisionamento possibilitou o surgimento “chaveado” de defeitos. A ordem do surgimento dos defeitos, em temperaturas distintas, indicou fortemente que a fusão da rede é do tipo KTHNY. Deste modo, a fusão é realizada através de duas transições onde, seqüencialmente, pares de deslocções e disclinações são desacopladas. Apesar disso, nada pode ser assegurado sobre a existência da fase hexática. Sistemas de dimensões maiores apresentaram o mesmo seqüenciamento de defeitos topológicos. Substratos na forma de calhas, por sua vez, revelaram ser uma alternativa menos estável a rede de vórtices, porém apresentaram o mesmo fenômeno de “locking”. Linhas paralelas e perpendiculares de defeitos isolados são deveras distintos da configuração de equilíbrio de uma rede de vórtices sem *pinning* ao ponto de conseguir apenas aprisionar a rede em temperaturas menores que as temperaturas de desacoplamento do caso de uma linha. Mesmo assim, sendo tecnologicamente menos relevante que os itens anteriores, estes casos reservam bons exemplos. A regulação da profundidade de “poço” através de  $\alpha_p$ , por exemplo, possibilita, para  $N_v = 8$  e duas linhas paralelas de defeitos, o surgimento de duas fases metaestáveis de diferentes simetrias. Quando  $N_v = 16$ , dois estados degenerados surgem, possibilitando a visualização ou não da fusão anisotrópica. Neste mesmo valor de número de vórtices, porém agora sob linhas perpendiculares de defeitos, a rede procura alinhar-se com apenas uma direção, embora a temperaturas mais altas preencham todos os sítios de ancoramento. Neste caso, uma curiosa transição de desacoplamento dos vórtices acontece ( transição de uma fase com todos os defeitos ocupados a uma fase com apenas uma direção ocupada), nunca antes vista.

A transição de fusão da rede de vórtices também foi estudada em sistemas

bidimensionais através da análise de tamanho finito e de outros métodos padrões (histograma de energia e curva de histerese). Embora estes dois últimos métodos apontem para uma transição de segunda ordem, a análise de tamanho finito revelou comportamentos diferentes dos habitualmente encontrados para transições de primeira ou segunda ordem. Isto revela o quanto é difícil definir com precisão a ordem de transições em sistema cuja interação entre os constituintes é de longo alcance. Assim, um estudo mais profundo deve ser realizado, com maior número de passos de Monte Carlo e para sistemas maiores, para definir com precisão se a transição é abrupta ou contínua. Até então, através dos resultados obtidos nesta tese, pode-se apontar que a transição é de segunda ordem, o que faz creditar ser a fusão em duas dimensões um fenômeno de natureza completamente diferente do mesmo em três dimensões.

Para finalizar, deve-se destacar que os resultados obtidos nesta tese podem ser ampliados para diversos sistemas, colóides por exemplo, desde que suas partículas constituintes correlacionem-se logaritmicamente.



# Apêndice A

## O método Monte Carlo

### A.1 Histórico

Na história da ciência contemporânea, grande parte das principais descobertas no ramo científico e tecnológico se deram sob o pano de fundo político das corridas armamentistas. O método Monte Carlo, pelo seu papel atual abrangente, não poderia ser diferente. No ano de 1946, após a segunda grande guerra e dos resultados iniciais obtidos com o primeiro computador eletrônico (o ENIAC), Stanislaw Ulam, John von Neumann e outros utilizaram esta última ferramenta, inicialmente destinada à fabricação de uma arma termonuclear, para ressuscitar as técnicas estatísticas já conhecidas na física (Eckhardt, 1987; Metropolis, 1987). Nascia então, oficialmente, o método Monte Carlo.

O método, contudo, teve vários momentos de desenvolvimento em anos anteriores a 1946. Na segunda metade do século XIX, por exemplo, um grupo de pessoas realizou experimentos no intuito de estimar a grandeza  $\pi$  (Reese, n.d.). Para isto eles inferiram seu valor conhecido,  $\pi = 3.14\dots$ , da observação da quantidade de vezes em que uma agulha cruzava linhas retas paralelas. Embora não usando explicitamente o método Monte Carlo, o estudo revelou a aplicabilidade da idéia de amostragem estatística em estimar grandezas físicas.

No mesmo século, mais precisamente em 1899, Lord Rayleigh mostrou que uma caminhada aleatória unidimensional sem barreiras absorvedoras tem como solução aproximada uma equação diferencial parabólica. Em anos posteriores, na primeira

parte do século XX, o método Monte Carlo foi utilizado de forma apenas didática, para alunos de escolas britânicas. Coube a W. S. Gosset (1908) uma das primeiras utilizações científicas, na época um esboço do método, no intuito de descrever distribuições normais correlacionadas (hoje conhecida como distribuição t-student) (Holton, 2005). E finalmente, apesar de toda evolução no método, é creditado a S. Ulam a invenção da ferramenta. S. Ulam, matemático polonês que trabalhou para von Neumann no projeto Manhattan durante a segunda guerra, é hoje em dia mais conhecido pelo trabalho realizado na fabricação da bomba de hidrogênio com E. Teller em 1951. O método Monte Carlo nasceu de uma curiosidade própria, “afloreceda” em partidas solitárias de cartas, em momentos em que sua saúde estava debilitada. A contribuição de S. Ulam, enriquecida pela sua curiosidade em jogos de azar, foi organizar tudo o que se sabia até então sobre o método e desenvolver algoritmos para implementar computacionalmente problemas de caráter aleatório ou não via amostragem estatística. A partir deste momento, a solução de problemas via amostragem estatística deixava de ser uma curiosidade matemática para ser uma metodologia robusta aplicável em uma grande gama de sistemas.

Apesar da contribuição de S. Ulam como um dos principais mentores do método, deve-se a Enrico Fermi e pesquisadores como Tellers, Edward, Mici, Rosenbluths, Marshall e Arianna a idealização total do método como hoje é conhecido e utilizado. O primeiro aproveitou-se do fato dos trabalhos com o ENIAC terem por um momento sido interrompidos para desenvolver independentemente o método com quase 15 anos de antecedência dos demais. Seu interesse principal na época estava na difusão e transporte de nêutrons. Os pesquisadores restantes (Tellers e assim por diante), por sua vez, utilizaram o método em 1952 para estudar o movimento bidimensional de esferas duras e usar uma estratégia conhecida hoje como algoritmo de Metrópolis. Neste último caso, como irá ser melhor explicado na próxima sessão, o movimento das partículas é regido pela possibilidade da redução da energia total do sistema.

## A.2 O algoritmo Monte Carlo e Metrópolis: da mecânica estatística à implementação computacional

Antes de estritamente falar sobre o método Monte Carlo e o algoritmo de Metrópolis, faz-se necessária a introdução de algumas definições utilizadas na mecânica estatística. Seja

$$\mathcal{P}_l(n_0, n_1, n_2, \dots, n_l) \quad (\text{A.1})$$

a distribuição de probabilidades conjunta de um processo estocástico qualquer onde uma variável estocástica  $x_t$  assume valores  $n_0$  no instante  $t_0$ ,  $n_1$  no instante  $t_1$  e assim por diante. Do mesmo modo, suponha

$$\mathcal{P}_{l+1}(n_{l+1} | n_0, n_1, \dots, n_l) \quad (\text{A.2})$$

a distribuição de probabilidades condicional de  $x_t$  assumir o valor  $n_{l+1}$  no instante  $t = l + 1$  haja vista ter a mesma tomado valores  $n_0$  no instante  $t = 0$ ,  $n_1$  no instante  $t = 1$  e assim por diante. Define-se que um processo estatístico é um processo markoviano se a probabilidade condicional (A.2) for igual à distribuição de probabilidade condicional

$$\mathcal{P}_{l+1}(n_{l+1} | n_l) \quad (\text{A.3})$$

de que a variável  $x_t$  assumo o valor  $n_{l+1}$  no instante  $t = l + 1$  dado que apenas se sabe que ela tenha tomado o valor  $n_l$  no instante  $t = l$ . Assim, um processo markoviano é um processo em que uma determinada variável estocástica é determinada apenas pelo seu valor no instante anterior e, logo, quando o estado físico de um sistema em um instante  $t$  é determinado apenas pelo estado físico em um tempo anterior  $t - 1$  (Tomé & Oliveira, 2001). Este limite curto de memória dos eventos, embora a princípio simples, é encontrado em vários sistemas como clima, em mercado de ações, na determinação de “bottlenecks” em redes de comunicação, na previsão populacional para orçamento financeiro e até mesmo na estimativa de

pontos assinalados em um jogo de baseball (Schwarz, 2002)!

Prosseguindo com a idéia de probabilidade condicional e conjunta, pode-se obter que

$$\mathcal{P}_l(n_0, n_1, n_2, \dots, n_l) = \mathcal{P}_l(n_l|n_{l-1}) \dots \mathcal{P}_2(n_2|n_1) \mathcal{P}_1(n_1|n_0) \mathcal{P}_0(n_0), \quad (\text{A.4})$$

e se

$$P_l(n_l) = \sum \mathcal{P}_l(n_0, n_1, n_2, \dots, n_l), \quad (\text{A.5})$$

onde a soma é sobre todos os valores de  $n$  exceto  $n_l$ , temos que

$$P_l(n_l) = \sum_{n_{l-1}} \mathcal{P}_l(n_l|n_{l-1}) P_{l-1}(n_{l-1}). \quad (\text{A.6})$$

A probabilidade condicional do lado direito da equação (A.6),  $\mathcal{P}_l(n_l|n_{l-1})$ , é conhecida como matriz estocástica e interpretada como a probabilidade de transição da variável ir do estado  $n_{l-1}$  ao estado  $n_l$ . Se, por simplificação, adota-se que  $n_{l-1} = m$  e  $n_l = n$  a equação acima pode ser escrita como

$$P_l(n) = \sum_m T(n|m) P_{l-1}(m), \quad (\text{A.7})$$

onde  $T(n|m) = \mathcal{P}_l(n_l|n_{l-1})$  é a matriz estocástica de uma cadeia de Markov. Como a matriz estocástica é uma probabilidade condicional, ela deve satisfazer as propriedades

$$T(n, m) \geq 0 \quad (\text{A.8})$$

e

$$\sum_n T(n, m) = 1. \quad (\text{A.9})$$

Agora suponha que a cada intervalo de tempo  $\tau$  ocorram transições entre estados

diferentes de forma que

$$T(n, m) = \left\{ \begin{array}{ll} \tau W(n, m), & \text{se } n \neq m \\ 1 - \tau \Omega(n), & \text{se } n = m. \end{array} \right\} \quad (\text{A.10})$$

Neste caso,  $W(n, m)$    a probabilidade de transi o por unidade de tempo da vari vel estoc stica ir de  $m$  a  $n$  e, da mesma forma,

$$\Omega(n) = \sum_{m(\neq n)} W(m, n), \quad (\text{A.11})$$

onde na express o acima usou-se a equa o (A.9). Usando as  ltimas express es, pode-se obter facilmente a probabilidade da vari vel estoc stica estar no estado  $n$  no instante  $l + 1$  na forma

$$P_{l+1}(n) = \sum_{m(\neq n)} T(n, m)P_l(m) + T(n, n)P_l, \quad (\text{A.12})$$

ou ainda

$$P_{l+1}(n) = \tau \sum_{m(\neq n)} W(n, m)P_l(m) + P_l(n) - \tau \Omega(n)P_l(n). \quad (\text{A.13})$$

Se  $t = \tau l$  e  $P(n, t) = P_l(n)$  tem-se que quando  $\tau \rightarrow 0$  a equa o acima torna-se

$$\frac{d}{dt}P(n, t) = \sum_{m(\neq n)} W(n, m)P(m, t) - W(m, n)P(n, t). \quad (\text{A.14})$$

A  ltima equa o (A.14)   de suma import ncia e   conhecida como equa o mestra. Ela possui ampla aplicabilidade em problemas na qu mica, f sica, biologia e outros ramos do conhecimento. Al m disso, como j  foi demonstrado,   a equa o que governa a din mica estoc stica de um processo de Markov. A equa o mestra revela que um determinado sistema sofre v rias transi es na escala temporal entre diversos estados no espa o de fase, estados estes caracterizados por valores espec ficos de alguma vari vel estoc stica. Em casos especiais, quando o sistema esta pr ximo ao equil brio termodin mico, ou mesmo quando n o possui correntes de

probabilidade interna, sua taxa de transição obedece ao então conhecido princípio do balanceamento detalhado. Desta forma, a equação (A.14) fica

$$\frac{d}{dt}P(n, t) = 0, \quad (\text{A.15})$$

e, logo,

$$W(n, m)P(m, t) = W(m, n)P(n, t). \quad (\text{A.16})$$

Na prática, o balanceamento detalhado (A.16) é alcançado em diversos sistemas tais como reações químicas próximas ao equilíbrio, transições eletrônicas e assim por diante. Se o sistema não está isolado, mas sim em contato com um reservatório de calor, o equilíbrio termodinâmico e consequentemente o balanceamento detalhado acontece, após um tempo transiente, de forma natural. Dessa maneira, a probabilidade de o sistema, em um ensemble canônico, se encontrar em um determinado microestado  $n$  pode ser dada pelo fator de Boltzmann

$$P_n(t) = P_n = \frac{\exp\left(-\frac{E_n}{k_B T}\right)}{Z}, \quad (\text{A.17})$$

onde  $Z$  é a função de partição do sistema,

$$Z = \sum_n \exp\left(-\frac{E_n}{k_B T}\right). \quad (\text{A.18})$$

Utilizando-se de todos estes argumentos, o método Monte Carlo pode ser implementado de maneira simples. Supondo um certo número  $M$  de estados possíveis, a média de uma determinada propriedade do sistema  $f$  é obtida por fazer

$$\langle f \rangle = \sum_n f_n P_n = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M f_{s_i}. \quad (\text{A.19})$$

Assim, a estimativa da grandeza  $f$  será tão precisa quanto maior for o número de estados acessados  $M$ . Como um exemplo simples, pode-se estimar a energia

m dia do sistema de forma que

$$\langle E \rangle = \sum_{s=1}^M E_s P_s = \frac{1}{Z} \sum_{s=1}^M E_s \exp \{ -(\beta E_s) \}. \quad (\text{A.20})$$

Retornando a equa o (A.17), note que a probabilidade  $P_n(t) = P_n$  n o   totalmente determinada devido   pr pria fun o de parti o  $Z$  ser, na maioria das vezes, desconhecida. Por m esta dificuldade   superada se os princ pios que regem os processos markovianos forem aplicados. Isto  , se cada estado em determinado instante de tempo for determinado pelo estado no instante anterior a probabilidade relativa entre os dois estados   dada pela raz o entre as probabilidades individuais e o denominador da equa o anterior se cancela. No final, a taxa de transi o entre estes dois estados ir  depender apenas da diferen a de energia entre os mesmos de forma que

$$W(m, n) = W(n, m) \exp \left[ \frac{-(E_m - E_n)}{k_B T} \right]. \quad (\text{A.21})$$

A equa o acima possui v rias solu es. Todas elas, por defini o, obedecem o princ pio do balanceamento detalhado, geram uma sequ ncia de estados distribuídos de acordo com a distribui o de Boltzmann. Por m, pode-se destacar o que talvez seja a mais simples solu o e tamb m a mais antiga, conhecida como m todo Metr polis (Mackay, n.d.). No m todo Metr polis, a matriz de transi o  $W(m, n)$  da equa o (A.21)   dada por

$$W(m, n) = \left\{ \begin{array}{ll} \tau_0^{-1} \exp -\frac{\Delta E}{k_B T}, & \text{se } \Delta E > 0 \\ \tau_0^{-1}, & \text{se } \Delta E < 0, \end{array} \right\}, \quad (\text{A.22})$$

onde  $\tau_0$  na equa o (A.22)   o tempo necess rio para tentar uma mudan a na configura o do sistema. Assim, sendo  $\Delta E = E_m - E_n$ , se  $\Delta E > 0$  temos  $E_m > E_n$  e a probabilidade de ocorrer uma transi o do estado  $n$  menos energ tico para o estado  $m$  mais energ tico   dada pelo fator de Boltzmann. Em caso contr rio, para  $\Delta E < 0$ , a probabilidade de transi o ser  uma constante inversamente proporcional ao intervalo de tempo entre duas tentativas consecutivas de altera o

do estado do sistema. Na maioria dos casos, adota-se  $\tau_0 = 1$  e, logo, todas as tentativas de mudança de configuração do sistema serão aceitas.

Enfim, pode-se explicitamente citar os passos de uma simulação de Monte Carlo usando o algoritmo Metrópolis da seguinte forma: começando de um estado sorteado aleatoriamente  $s_0$ , gera-se a partir deste uma sequência de estados  $s_1, s_2$  etc. O estado seguinte ao estado inicial será obtido de sua vizinhança de acordo com o algoritmo já esplanado, ou seja, o novo estado será aceito caso haja redução da energia total ou se a probabilidade de Boltzmann for maior que um variável aleatória previamente escolhida cuja distribuição é uniforme entre os valores 0 e 1. Após descartar os primeiros estados do sistema (período de relaxação), pode-se usar o restante das configurações para estimar grandezas físicas quaisquer como, por exemplo, a já descrita energia total. Como também já dito anteriormente, a grandeza estimada terá seu valor mais próximo do ideal quanto maior for o número de estados acessados. Neste caso, o que se espera é que a hipótese ergódica possa ser aplicada.<sup>1</sup>

### A.3 Erros

Planejar a investigação de um sistema físico por meio da simulação de Monte Carlo significa avaliar a possibilidade de implementar o método com o máximo

---

<sup>1</sup>A hipótese ergódica, largamente difundida desde os trabalhos de Boltzmann de 1867 (Uffink, 2004), embora possua caráter amplo, não pode ser aplicada a todos os sistemas físicos. Ela é uma tentativa de dar sustentação à mecânica estatística ao apontar, usando o teorema de Birkhoff, que o valor médio temporal de uma observável, determinado pela sua dinâmica temporal, é igual a média do mesmo observável no ensemble (Patrascioiu, 1987) (entende-se como média no ensemble uma média extraída em um determinado instante de tempo  $t$  fixo sobre um largo número de sistemas que possuem propriedades termodinâmicas idênticas, porém com configurações moleculares diversas). A rigor, um sistema físico obedece ao limite ergódico se o mesmo corresponder ao limite termodinâmico, a irreversibilidade (condições estas necessárias) e se, principalmente, o sistema possuir modo de frequência nulo (condição suficiente). Matematicamente, se  $H$  é o Hamiltoniano Hermitiano do sistema de interesse e  $A$  uma variável dinâmica, o sistema será ergódico se, e somente se,  $W$  for finito, onde

$$W = \int_0^{\infty} r(t) dt.$$

Na última expressão,  $r(t) = \frac{\langle A(t), A \rangle}{\langle A, A \rangle}$  é a função de relaxação da variável  $A$ . Assim, se  $W$  é finito, o sistema tende a um estado estacionário após um tempo transiente  $\tau_r$  (Reichl, 1997).

espaço amostral possível e com dimensões físicas apreciáveis (sistemas grandes). Porém, devido ao limite usual da capacidade computacional geralmente escolhe-se entre realizar longas simulações de sistemas pequenos ou curtas simulações em sistemas extensos. Tudo isto é feito no intuito de reduzir os erros inerentes ao método. Compreender estes erros e minimizá-los é de vital importância para a confiabilidade dos resultados.

Assim, entre tantos, hoje sabe-se que erros em simulações de Monte Carlo podem ser de dois tipos principais: erros estatísticos e erros sistemáticos. Erros estatísticos ocorrem devido ao número necessariamente finito de medidas que são realizadas durante uma simulação. Erros sistemáticos, por sua vez, resultam de duas principais fontes: o mesmo número finito de medidas realizadas e o tamanho necessariamente finito da amostra (Landau & Binder, 2000).

### A.3.1 Erros estatísticos

Como já foi anteriormente dito, erros estatísticos surgem naturalmente do espaço amostral finito utilizado para estimar observáveis quaisquer. A magnitude destes erros pode ser estimada facilmente. Assim, seja  $A$  uma quantidade a ser observada e

$$\delta A = \frac{1}{N} \sum_{\mu=1}^N (A_{\mu} - \langle A \rangle) \quad (\text{A.23})$$

o seu desvio (erro estatístico). Pode-se calcular o valor esperado do quadrado deste erro estatístico (variância dividida pelo número de observações) usando

$$(\delta A)^2 = \frac{1}{N^2} \sum_{\mu=1}^N (A_{\mu} - \langle A \rangle) \sum_{\mu=1}^N (A_{\mu} - \langle A \rangle). \quad (\text{A.24})$$

Assim,

$$\begin{aligned}
 (\delta A)^2 &= \frac{1}{N^2} \sum_{\mu=1}^N (A_{\mu} - \langle A \rangle)^2 \\
 &+ \frac{1}{N^2} \sum_{\mu_1, \mu_2 \neq \mu_1}^N (A_{\mu_1} - \langle A \rangle)(A_{\mu_2} - \langle A \rangle). \quad (\text{A.25})
 \end{aligned}$$

A segunda parcela do lado direito da equação acima pode ser expressa também por

$$\frac{1}{N^2} \sum_{\mu_1=1}^N \sum_{\mu_2=1}^N (A_{\mu_1} A_{\mu_2} - A_{\mu_1} \langle A \rangle - A_{\mu_2} \langle A \rangle + \langle A \rangle^2), \quad (\text{A.26})$$

e logo o valor esperado da expressão (A.25) é o mesmo que

$$\begin{aligned}
 \langle (\delta A)^2 \rangle &= \frac{1}{N^2} \sum_{\mu=1}^N \langle (A_{\mu} - \langle A \rangle)^2 \rangle \\
 &+ \frac{2}{N^2} \sum_{\mu_1=1}^N \sum_{\mu_2=\mu_1+1}^N (\langle A_{\mu_1} A_{\mu_2} \rangle - \langle A \rangle^2). \quad (\text{A.27})
 \end{aligned}$$

Agora suponha que estes  $A_{\mu}$  estados sejam obtidos de um conjunto mais geral de  $X_{\mu}$  estados distribuídos de acordo com a distribuição de Boltzmann, isto é, de acordo com a distribuição esperada quando o sistema alcança o equilíbrio termodinâmico. Neste caso, as médias calculadas são invariantes com relação ao instante de tempo inicial ou final importando apenas o intervalo de tempo entre as medidas.<sup>2</sup> Assim, pode-se escrever

$$\langle A_{\mu_1} A_{\mu_2} \rangle = \langle A_0 A_{\mu_2 - \mu_1} \rangle. \quad (\text{A.28})$$

---

<sup>2</sup>Aqui supõe-se que o índice  $\mu$  desempenha o papel do tempo comumente usado em simulações de dinâmica molecular quando se fala das configurações sucessivas encontradas. Também supõe-se que os valores da grandeza  $A$  nos instantes iniciais da simulação foram descartados no intuito de desprezar efeitos de relaxação.

Definindo  $\mu \equiv \mu_2 - \mu_1$ , a equação (A.27) fica

$$\begin{aligned} \langle (\delta A)^2 \rangle &= \frac{1}{N} \left[ \frac{1}{N} \sum_{\mu=1}^N \langle (A_\mu - \langle A \rangle)^2 \rangle \right. \\ &\quad \left. + \frac{2}{N} \sum_{\mu_1=1}^N \sum_{\mu=1}^N (\langle A_{\mu_1} A_{\mu_1+\mu} \rangle - \langle A \rangle^2) \right], \end{aligned} \quad (\text{A.29})$$

ou melhor,

$$\begin{aligned} \langle (\delta A)^2 \rangle &= \frac{1}{N} \left[ \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2 \right. \\ &\quad \left. + \frac{2}{N} \sum_{\mu_1=1}^N \sum_{\mu=1}^N (\langle A_{\mu_1} A_{\mu_1+\mu} \rangle - \langle A \rangle^2) \right]. \end{aligned} \quad (\text{A.30})$$

Supondo que  $\mu_1 \rightarrow 0$  a expressão acima torna-se

$$\langle (\delta A)^2 \rangle = \frac{1}{N} \left[ \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2 + \frac{2}{N} \sum_{\mu=1}^N (N - \mu) (\langle A_0 A_\mu \rangle - \langle A \rangle^2) \right]. \quad (\text{A.31})$$

Note que na última expressão quando  $\mu = N$  não há termo na soma pois  $\mu_1 = 0$ . Da mesma forma, se  $\mu = 0$ , tem-se que  $\mu_1 = \mu_2 = N$  e deve haver soma nos dois termos.

Prosseguindo, defina agora  $\delta t$  o intervalo de tempo entre duas observações sucessivas  $A_\mu$  e  $A_{\mu+1}$ . Pode-se notar que  $\delta t$  será uma função decrescente do número de graus de liberdade do sistema  $N_L$  de modo que

$$\delta t = \frac{\tau_S}{N_L}, \quad (\text{A.32})$$

onde  $\tau_S$  é uma constante de tempo relacionando a probabilidade de transição entre estados sucessivos. Para a realização de uma simulação com resultados seguros espera-se que o intervalo de tempo entre estados  $A_\mu$  sucessivos seja muito maior que o tempo de correlação entre medidas sucessivas bem como maior que o intervalo de tempo definido na equação (A.32). Nesta aproximação, pode-se

converter a soma em tempos discretos  $t = \mu\delta t$  em uma integração, de modo que a equação (A.31) torna-se

$$\langle(\delta A)^2\rangle = \frac{1}{N} \left[ \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2 + \frac{2}{\delta t} \int_0^t \left(1 - \frac{t'}{t}\right) [\langle A(0)A(t') \rangle - \langle A \rangle^2] dt' \right]. \quad (\text{A.33})$$

Definindo como a função de autocorrelação temporal normalizada

$$\phi_A(t) = \frac{[\langle A(0)A(t) \rangle - \langle A \rangle^2]}{[\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2]}, \quad (\text{A.34})$$

a equação (A.33) pode ser dada por

$$\langle(\delta A)^2\rangle = \frac{1}{N} (\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2) \left[ 1 + \frac{2}{\delta t} \int_0^t dt' \left(1 - \frac{t'}{t}\right) \phi_A(t') \right]. \quad (\text{A.35})$$

A função de autocorrelação acima tem a característica peculiar de admitir valores  $\phi_A(t=0) = 1$  e  $\phi_A(t \rightarrow \infty) = 0$  de modo que, supondo a existência de sua integral, pode-se definir

$$\tau_A \equiv \int_0^\infty \phi_A(t) dt \quad (\text{A.36})$$

como o tempo de relaxação da quantidade  $A$ . Lembrando que na maioria dos casos as simulações são realizadas para tempos muito maiores que o tempo de correlação  $\tau_A$ , onde  $\phi_A(t) \rightarrow 0$ , e como  $\phi_A$  só é apreciável para tempos da ordem de  $\tau_A$ , a equação (A.35) acima pode ser aproximada por

$$\langle(\delta A)^2\rangle = \frac{1}{N} (\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2) \left(1 + \frac{2}{\delta t} \tau_A\right) \quad (\text{A.37})$$

Note que a expressão (A.37) é ligeiramente diferente da equação já conhecida

$$\langle(\delta A)^2\rangle = \frac{1}{n} (\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2), \quad (\text{A.38})$$

onde  $n$  é o número de medidas independentes. Assim, uma simulação Monte

Carlo com número finito de medidas introduz intrinsicamente um desvio no valor da incerteza de um observável  $A$  dado pelo fator  $\frac{\tau_A}{\delta t}$  de modo que o número de medidas independentes da observável  $A$  é

$$n = \frac{N}{2\frac{\tau_A}{\delta t} + 1}. \quad (\text{A.39})$$

Consequentemente, uma maneira óbvia de reduzir os erros estatísticos é aumentar o número de medidas realizadas, isto é, impor que  $N \rightarrow \infty$  de modo que tenha-se  $n \rightarrow \infty$ . Infelizmente, isto torna-se impossível computacionalmente para sistemas de tamanho físico apreciável. Uma segunda possibilidade de reduzir este tipo de erro é levar em consideração a dependência da variância da observável ( $n$  vezes o quadrado do desvio padrão da média) com o tamanho do sistema. Neste caso, usufrui-se da propriedade de certas grandezas serem “auto-medializantes”<sup>3</sup>.

### A.3.2 Erros sistemáticos

Os erros sistemáticos, como o próprio nome sugere, são provenientes de erros pré-existentes no modelo. Para sistemas que utilizam-se do método Monte Carlo tais erros possuem duas principais fontes: o número finito de medidas realizadas e o tamanho espacial finito das amostras (Ferrenberg *et al.*, 1991).

No primeiro caso, o número finito da amostragem resulta basicamente em funções resposta cujos valores são subestimados. O exemplo mais claro disso pode ser encontrado em qualquer bom livro de estatística: o valor esperado  $E(s^2)$  da variância de qualquer observável  $s$  possui valor apreciavelmente menor que o valor real encontrado  $\sigma$  dado pelo fator  $1 - \frac{1}{n}$  de modo que

$$E(s^2) = \sigma^2 \left(1 - \frac{1}{n}\right), \quad (\text{A.41})$$

---

<sup>3</sup>Define-se uma grandeza como “auto-medializante” se para  $n \gg 1$  temos que seu desvio padrão da média dado por

$$\Delta_A(n, L) = \sqrt{\frac{\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2}{n}} \quad (\text{A.40})$$

vai a zero para  $L \rightarrow \infty$ .

onde na equação (A.41)  $n$  é o número de medidas realizadas efetivamente independentes. Assim, funções resposta como susceptibilidade ou calor específico, por serem medidas diretas da variância, possuem valores diferentes dos seus valores no limite termodinâmico. Paralelamente, como o tempo de correlação depende diretamente do tamanho do sistema, este tipo de erro sistemático possui magnitude diferente dependendo do tamanho físico da amostra. Isto acaba por introduzir uma fonte de erro a mais no sistema.

O tamanho finito dos sistemas, por sua vez, introduz erros na medida em que o comprimento de correlação característico  $\xi$  de um determinado processo no sistema físico é comparável ou supera sua dimensão linear. Infelizmente, este fenômeno ocorre para muitos casos quando o sistema aproxima-se da temperatura de transição. Desta forma, faz-se necessária uma extrapolação adequada se o interesse é obter o comportamento de alguma observável em particular no limite termodinâmico, isto é, para  $L \rightarrow \infty$ . O comportamento exato das observáveis bem como de suas variâncias no limite termodinâmico irá depender fortemente da natureza da transição envolvida.

### A.3.3 Análise de tamanho finito

Como já dito anteriormente, o tamanho finito de um sistema produz valores afastados de sua característica macroscópica para várias quantidades físicas, sobretudo quando a amostra é submetida a transições de fase de primeira ou de segunda ordem. O conhecimento prévio do efeito destes desvios é muito útil para estimar várias quantidades termodinâmicas, a princípio impossíveis. As maiores dificuldades encontradas neste estudo referem-se à localização do ponto de transição de fase e a determinação da ordem da mesma. Identificar ponto de transição e ordem da transição é, pois, dar um passo importante na caracterização do sistema físico estudado.

Transições de fase de primeira ordem são caracterizadas por uma descontinuidade na primeira derivada da energia livre em uma temperatura específica  $T_c$ , isto é, descontinuidades na energia interna ou magnetização (caso as transições sejam dirigidas pela temperatura ou campo externo, respectivamente). Isto

resultará em singularidades no calor específico ou na susceptibilidade, respectivamente, no ponto de transição. Tais singularidades são frutos da coexistência de fases perto da transição e não existe região crítica nem expoente crítico. Por outro lado, transições de segunda ordem possuem tanto região crítica quanto expoente crítico e sua divergência está ligada diretamente à divergência do comprimento de correlação  $\xi^4$ . Como o próprio nome sugere, transições de segunda ordem possuem a primeira derivada da energia livre contínua e, logo, estão relacionadas à singularidade na segunda derivada da energia livre.

Em um sistema finito, porém, tais divergências não ocorrem. Logo, para ambos os tipos de transições, o sistema caracteriza-se por valores finitos de calor específico ou susceptibilidade. Nestes casos, pode-se observar um “alargamento” da região de transição bem como uma redução do valor máximo das suas curvas características, calor específico em função da temperatura por exemplo, dependendo inversamente do tamanho da amostra. Em transições de fase de segunda ordem, tal “alargamento” é fruto do comprimento de correlação que é limitado pelo tamanho da amostra  $L$ . Para estas transições, a teoria de escala prediz que o valor máximo da curva do calor específico em função da temperatura  $CxT$  diverge como  $L^{\frac{\alpha}{\nu}}$ , sendo  $\alpha$  e  $\nu$  expoentes críticos, e a semi-largura da curva decresce como  $L^{-\frac{1}{\nu}}$ . Em transições de fase de primeira ordem,  $L$  aparece apenas devido ao volume da amostra e o valor máximo da curva  $CxT$  cresce como  $L^d$ , onde  $d$  é a dimensão do sistema. Da mesma forma, a semi-largura da curva cai como  $L^{-d}$ .<sup>5</sup>

---

<sup>4</sup>O comprimento de correlação  $\xi$  mede a distância sob o qual as partículas em um sistema estão significativamente correlacionadas. Quando  $T$  aproxima-se da temperatura crítica,  $T_c$ ,  $\xi$  diverge. Neste caso, para sistemas finitos,  $\xi$  assume magnitude da ordem do tamanho característico do sistema,  $L$ , e, logo, as partículas na borda da célula de simulação nos lados opostos do sistema tornam-se correlacionadas. Assim, o ordenamento não consegue prosseguir para dimensões maiores que o da caixa de simulação.

<sup>5</sup>Todas as estimativas para o comportamento de grandezas como calor específico em transições de primeira ordem são encontradas usando o fato de que a distribuição de probabilidade da energia interna do sistema pode ser aproximada, em torno do ponto de transição, por duas curvas gaussianas centradas em seus valores de equilíbrio, no caso acima e abaixo da temperatura  $T_c$  (Challa *et al.*, 1986). Assim, para duas curvas do tipo

$$P_L(E) \propto \exp \frac{-(E - E_0)L^d}{2k_B T_c^2} \quad (\text{A.42})$$

Todas essas predições são alcançadas quando  $L \rightarrow \infty$ .

---

centradas em suas energias características  $E_0$  tem-se que o calor específico pode ser dado por

$$C_L = \frac{L^d}{k_B T^2} (\langle E^2 \rangle_L - \langle E \rangle_L^2) \propto \frac{(E_+ - E_-)^2 L^d}{4k_B T_c^2}, \quad (\text{A.43})$$

onde

$$\langle E^n \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} P_L(E) E^n dE. \quad (\text{A.44})$$

Da mesma forma, o “alargamento” da região de transição é dado por

$$\left( \frac{T_c(L) - T_c}{T_c} \right) \approx \frac{4k_B T_c}{(E_+ - E_-) L^d} \quad (\text{A.45})$$

Nas expressões acima,  $E_+$  e  $E_-$  são energias características para as fases imediatamente acima e imediatamente abaixo da temperatura de transição, respectivamente.

# Bibliografia

- ABRAHAM, F. F. 1980. Melting in two dimensions is first order: An isothermal-isobaric Monte Carlo study. *Physical Review Letters*, **44**, 463–466.
- ABRAHAM, F. F., KOCH, S. W., & RUDGE, W. E. 1982. Molecular-dynamics computer simulation of the weakly incommensurate phase of monolayer krypton on graphite. *Physical Review Letters*, **49**, 1830–1833.
- ABRIKOSOV, A. A. 1957. On the magnetic properties of superconductors of the second group. *Zh. Eksp. Teor. Fiz.*, **32**, 1442–1452 [Sovietic Physics JETP **5**, 1174–1182 (1957)].
- AKERMAN, J. J., YUN, S. H., KARLSSON, U. O., & RAO, K. V. 2001. Re-entrant behavior of low-field flux creep in c-axis-oriented HgBa<sub>2</sub>CaCu<sub>2</sub>O<sub>6</sub>+d thin films. *Physical Review B*, **64**, 184520–184527.
- ANDREI, E. Y., DEVILLE, G., GLATTLI, D. C., & WILLIAMS, F. I. B. 1998. Observation of a magnetically induced Wigner solid. *Physical Review Letters*, **60**, 2765–2768.
- AVRAHAM, N., KHAYKOVICH, B., MYASOEDOV, Y., RAPPAPORT, M., SHTRIKMAN, H., FELDMAN, D. E., TAMEGAI T., KES, P. H., LI, M., KONCZYKOWSKI, M., VAN DER BEEK, K., & ZELDOV, E. 2001. 'Inverse' melting of a vortex lattice. *Nature*, **411**, 451–454.
- BACCHI, K., ANDERSEN, H. C., & SWOPE, W. 1996. Observation of a two-stage melting transition in two dimensions. *Physical Review E*, **53**, 3794–3803.

- BAERT, M., METLUSHKO, V. V., JONCKHEERE, R., MOSHCHALOV, V. V., & BRUYNSERAEDE, Y. 1995a. Composite flux-line lattices stabilized in superconducting films by a regular array of artificial defects. *Physical Review Letters*, **74**, 3269–3272.
- BAERT, M., METLUSHKO, V. V., JONCKHEERE, R., MOSHCHALOV, V. V., & BRUYNSERAEDE, Y. 1995b. Flux phases and quantized pinning force in superconductor with a periodic lattice of pinning centers. *Europhysics Letters*, **29**, 157–162.
- BANERJEE, S. S., GOLDBERG, S., SOIBEL, A., MYASOEDOV, Y., RAPPAPORT, M., ZELDOV, E., DE LA CRUZ, F., VAN DER BEEK, C. J., KONCZYKOWSKI, M., TAMEGAI, T., & VINOKUR, V. M. 2001. Vortex nanoliquid in high-temperature superconductors. *Physical Review Letters*, **93**, 097002–097005.
- BANERJEE, S. S., SOIBEL, A., MYASOEDOV, Y., RAPPAPORT, M., ZELDOV, E., MENGHINI, M., FASANO, Y., DE LA CRUZ, F., VAN DER BEEK, C. J., KONCZYKOWSKI, M., & TAMEGAI, T. 2003. Melting of porous vortex matter. *Physical Review Letters*, **90**, 087004.
- BARDEEN, J., COOPER, L. N., & SCHREIFFER, J. R. 1957. Theory of superconductivity. *Physical Review*, **108**, 1175–1204.
- BARNEJEE, S. S., ZELDOV, E., SOIBEL, A., MYASOEDOV, Y., RAPPAPORT, M., MENGHINI, M., FASANO, Y., DE LA CRUZ, F., VAN DER BEEK, C. J., KONCZYKOWSKY, M., & TAMEGAI, T. 2004. Porous vortex matter. *Physica C*, **408-410**, 495–498.
- BEDNORZ, J. G., & MULLER, K. A. 1986. Possible high  $T_c$  superconductivity in the Ba-La-Cu-O system. *Z. Phys. B: Condensed Matter*, **64**, 189–193.
- BEZRYADIN, A., OVCHINNIKOV, Y. N., & PANNETIER, B. 1996. Nucleation of vortices inside open and blind microholes. *Physical Review B*, **53**, 8553–8560.

- BIRGENEAU, R. J., BROWN, G. S., HORN, P. M., MONCTON, D. E., & STEPHENS, P. W. 1981. Synchrotron x-ray study of monolayer krypton melting. *Physical Review Letters*, **14**, L49–L54.
- BLATTER, G., FEIGELMAN, M. V., GESHKENBEIN, V. B., LARKIN, A. I., & VINOKUR, V. M. 1994. Vortices in high-temperature superconductors. *Rev. Mod. Phys.*, **66**, 1125–1388.
- BORN, M. 1939. Thermodynamics of crystals and melting. *Journal of Chemical Physics*, **7**, 591–603.
- BRANDT, E. H. 1986. Elastic and plastic properties of the flux-line lattice in type-II superconductors. *Phys. Rev. B*, **34**, 6514–6517.
- BUDHANI, R. C., HOLSTEIN, W. L., & SUENEGA, M. 1994. Columnar-defect-induced resistivity minima and Bose glass scaling of linear dissipation in  $Tl_2Ba_2CaCu_2O_8$  epitaxial films. *Physical Review Letters*, **72**, 566–569.
- BURKE, K. *The ABC of DFT*. Tech. rept. <http://dft.rutgers.edu/kieron/beta/b4.pdf>.
- BUTLER, D. M., LITZINGER, J. A., & STEWART, G. A. 1980. Completion of the phase diagram for the monolayer regime of the krypton-graphite adsorption system. *Physical Review Letters*, **44**, 466–468.
- BUZDIN, A., & FEINBERG, D. 1994. On the theory of electromagnetic pinning of vortices. *Physica C*, **235-240**, 2755–2756.
- BUZDIN, A. I. 1993. Multiple-quanta vortices at columnar defects. *Physical Review B*, **47**, 11416–11419.
- CAHN, R. W. 2001. Melting from within. *Nature*, **413**, 582–583.
- CAMPBELL, A. M., & EVETTS, J. E. 1972. Flux vortices and transport currents in type II superconductors. *Advances in Physics*, **72**, 199–428.

- CARMEN MIGUEL, M., & KARDAR, M. 2000. Elasticity and melting of vortex crystals in anisotropic superconductors: Beyond the continuum regime. *Physical Review B*, **62**, 5942–5956.
- CHAIKIN, P. M., & LUBENSKY, T. C. 1995. *Principles of Condensed Matter Physics*. Cambridge University Press.
- CHALLA, M. S., LANDAU, D. P., & BINDER, K. 1986. Finite-size effects at temperature-driven first-order transitions. *Physical Review B*, **34**, 1841–1852.
- CHANDRAN, M., SCALETTAR, R. T., & ZIMANYI, G. T. 2004. Domain regime in two-dimensional disordered vortex matter. *Physics Review B*, **69**, 24526–24535.
- CHANDRASEKHAR, B. S. 1969. *Superconductivity*. Vol. 1. R. D. Parks.
- CHARALAMBOUS, M., CHAUSSY, J., LEJAY, P., & VINOKUR, V. 1993. Superheating of the Abrikosov flux lattice. *Physical Review Letters*, **71**, 436–439.
- CHEN, Q. H., TENIERS G. JIN B. B., & MOSHCHALOV, V. V. 2006. Pinning properties and vortex dynamics in thin superconducting films with ferromagnetic and antiferromagnetic arrays of magnetic dots. *Physical Review B*, **73**, 14506–14513.
- CHOQUARD, PH., & CLEROUIN, J. 1983. Cooperative phenomena below melting of the one-component two-dimensional plasma. *Physical Review Letters*, **50**, 2086–2089.
- CHUI, S. T. 1983. Grain-boundary theory of melting in two dimensions. *Physical Review B*, **28**, 178–194.
- CLEM, JOHN R. 1975. Simple model for the vortex core in a type II superconductor. *J. Low. Temp. Phys.*, **18**, 427–343.
- CLEMENTE, CLÉCIO. 2003. *Propriedades de equilíbrio e de transporte da matéria de vórtices em nanoestruturas supercondutoras*. Ph.D. thesis, Universidade Federal de Pernambuco.