



# Gás de Rede com Exclusão de Vizinhos na Rede Triangular

Bolsista: Luís Gustavo Möllmann dos Santos  
Orientador: Heitor Carpes Marques Fernandes

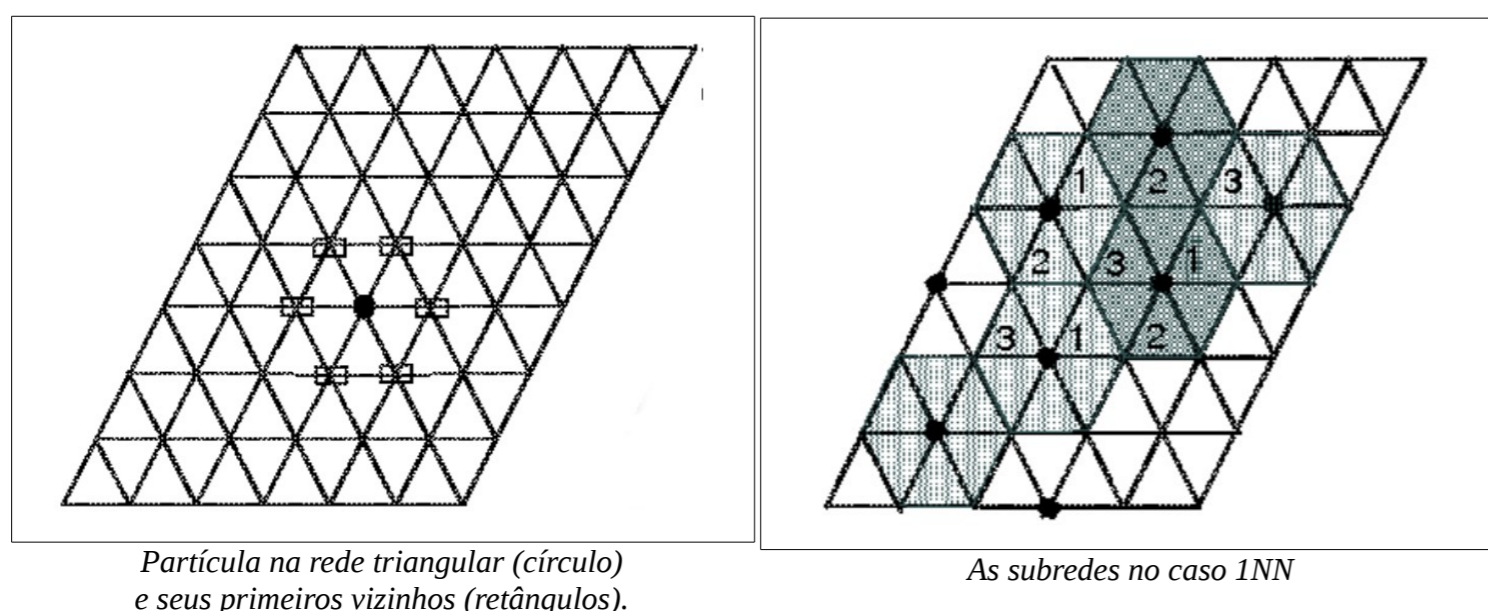
*Resumo: Neste trabalho foram estudados o modelo de Ising e o modelo do gás de rede com exclusão de vizinhos numa rede triangular. O estudo do modelo de Ising objetivava aprender as técnicas a respeito de simulações de Monte Carlo (MC). No gás de rede, estudou-se os casos sem exclusão de vizinhos (0NN) e de exclusão dos primeiros vizinhos (1NN) na rede.*

## Introdução

No modelo do gás de rede, as partículas estão confinadas a ocuparem os vértices de uma rede, como na figuras. A exclusão dos vizinhos se refere às regras de ocupação das posições na rede.

No caso sem exclusão (0NN), as partículas não podem ocupar o mesmo sítio, mas podem ocupar lugares adjacentes. No caso com exclusão de primeiros vizinhos (1NN), as partículas só podem ocupar posições que possuam todas as posições imediatamente vizinhas desocupadas, como na figura abaixo e à esquerda. Neste segundo caso, pode-se considerar as partículas como sendo hexágonos duros e que dois hexágonos podem se tocar, mas não se sobrepor, como é mostrado na figura abaixo e à direita. O caso 1NN possui solução analítica [1].

Assim, a rede é dividida em três subredes, em que o estado com o maior número de partículas possível só tem partículas em uma única subrede. Este sistema possui solução exata [2]. A interação entre as partículas é do tipo caroço duro (*hardcore*). Isto faz que o sistema seja atérmico e que o seu comportamento seja devido ao formato e ao tamanho das partículas na rede [3].



Partícula na rede triangular (círculo) e seus primeiros vizinhos (retângulos).

As subredes no caso 1NN

## Metodologia

A principal ferramenta utilizada para o estudo do modelo foi o método de Monte Carlo, mais especificamente, o algoritmo de Metrópolis. No caso do Gás de Rede, os movimentos permitidos eram a inserção e a remoção de partículas na rede. A difusão não foi considerada. Pode-se ver que o balanço de detalhado é obedecido se considerarmos as seguintes taxas de aceitação [4]:

$$A(N \rightarrow N+1) = \min \left[ 1, \frac{V e^{\beta \mu}}{\Lambda^3 (N+1)} \exp[-\beta[U(N+1) - U(N)]] \right]$$

$$A(N \rightarrow N-1) = \min \left[ 1, \frac{\Lambda^3 N e^{-\beta \mu}}{V} \exp[-\beta[U(N-1) - U(N)]] \right]$$

A primeira para inserção de partículas e a segunda para remoção, onde:

- $N$  é o número de partículas;
- $\mu$ , o potencial químico;
- $\Lambda$ , o comprimento de onda térmico de de Broglie;
- $V$ , o volume do sistema;
- $U(N)$ , a energia potencial para o sistema com  $N$  partículas;
- $\beta$ ,  $1/k_B T$ , o recíproco da temperatura.

Os programas escolhem um dos dois movimentos de maneira aleatória, com 0,5 de chance para que cada um ocorra. Depois, gera um novo estado e aceita com as probabilidades descritas acima, que caracterizam o algoritmo de Metrópolis [4].

Para identificarmos as transições de fase, é utilizado o parâmetro de ordem

$$q = \frac{1}{2\rho_{max}} (|\rho_1 - \rho_2| + |\rho_1 - \rho_3| - |\rho_3 - \rho_2|)$$

Onde

- $\rho_{max}$  é o densidade máxima, que no caso 1NN é  $1/3$ .
- $\rho_i$  é a densidade da subrede  $i$ .

O parâmetro  $q$  se aproxima de 1 quando estamos na situação de empacotamento máximo (estado ordenado) e de 0 quando cada subrede tiver aproximadamente o mesmo número de partículas (estado desordenado).

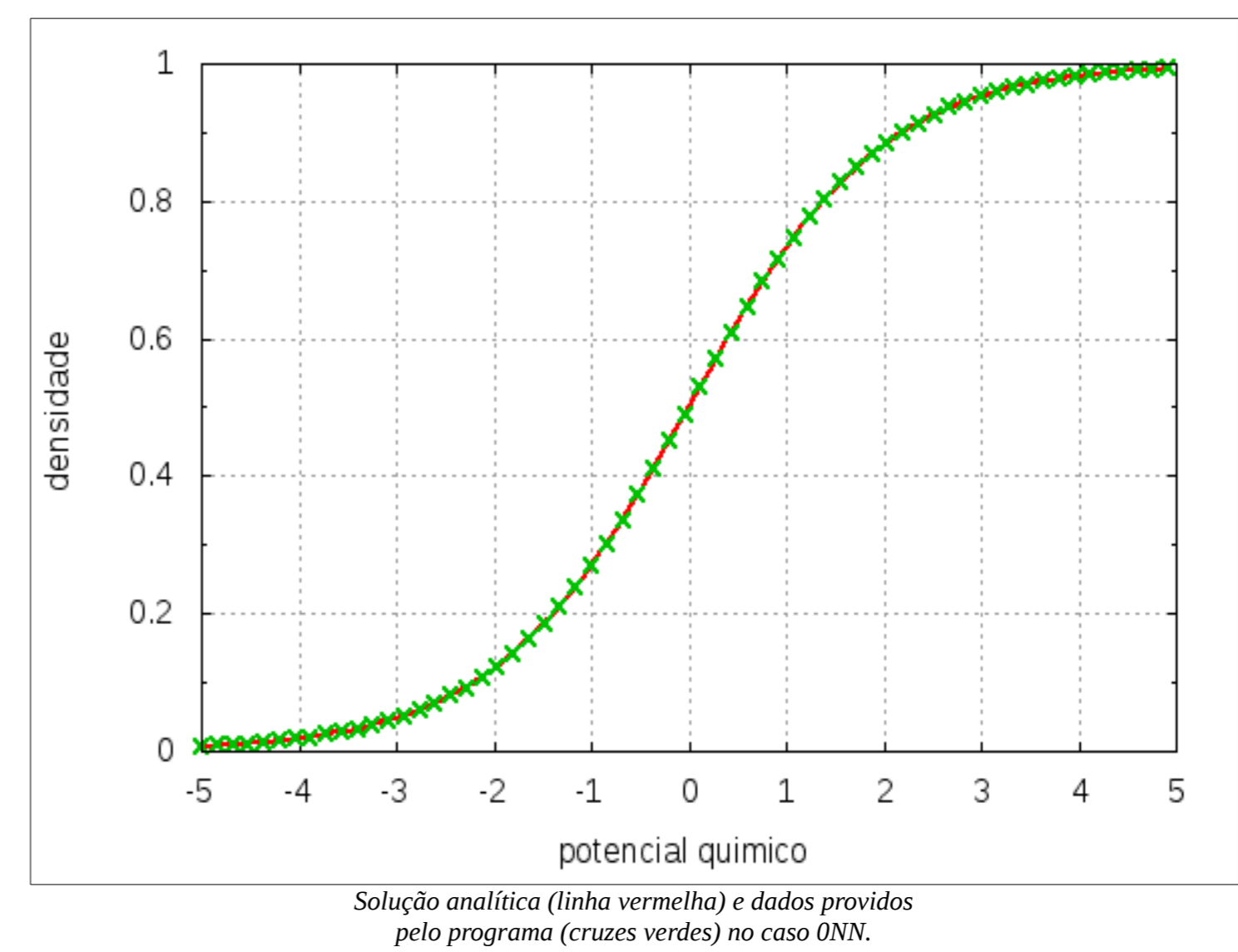
Depois de codificar o algoritmo, começamos as simulações com redes pequenas para verificar a correção dos programas e saber se existem transições de fase nos sistemas e, caso existam, identificar onde eles ocorrem. Então fazemos simulações em que o sistema evolui por um longo período de tempo nos pontos em que estamos interessados, para termos ideia da magnitude do tempo de equilíbrio. Depois, podemos simular sistemas maiores e gerar dados que serão utilizados nos métodos de repesagem de histogramas para obtermos números bastante precisos sem precisar fazer uso de diversas simulações longas.

## Resultados

Os programas desenvolvidos para o caso 0NN gera dados do tipo  $\rho(t)$  e  $\rho(\mu)$  que estão de acordo com o resultado analítico

$$\rho(\mu) = \frac{1}{1 + e^{-\beta \mu}}$$

Isto é mostrado na figura abaixo.



Solução analítica (linha vermelha) e dados providos pelo programa (cruzes verdes) no caso 0NN.

Os programas para o caso 1NN também geram os mesmos dados. Os métodos de histogramas único e múltiplos não foram aplicados ao modelo do gás de rede, somente ao modelo de Ising. Assim como os métodos de análise de tamanho finito.

## Conclusões parciais

- Ainda precisam ser implementados os métodos de repesagem de histogramas (único e múltiplos) e de análise de tamanho finito para o modelo de gás de rede, assim como foi feito com o modelo de Ising. Isto para poder determinar os expoentes críticos e as classes de universalidade que as redes com diferentes camadas de exclusão se encaixam.
- A metodologia utilizada até agora é validada pelo fato de os resultados obtidos serem compatíveis com as soluções analíticas conhecidas, o que nos dá mais confiança para analisarmos os casos sem soluções exatas conhecidas com o mesmo método.
- Os programas feitos para os casos 0NN e 1NN são facilmente estendidos para os casos com exclusão de mais vizinhos (2NN, 3NN, etc.), necessitando apenas pequenas mudanças no código. Além disso, os programas desenvolvidos para o estudo do modelo de Ising estão bem documentados e também podem ser usados como referência para aplicar os métodos de repesagem de histogramas e de escala de tamanho finito no gás de rede.

## Referências

1. X. Feng, H. W. J. Blöte and B. Nienhuis, *Physical Review*, E 83, 061153 (2011)
2. R. J. Baxter, *J. Phys. A* 13, L61 (1980).
3. L. K. Runnels, *Phase transitions and critical phenomena*, Academic Press, London - New York (1972)
4. M. E. J. Newman e G. T. Barkema, *Monte Carlo Methods in Statistical Physics*, Clarendon Press, Oxford (2001)
5. H. C. M. Fernandes, Tese de doutorado, IF-UFRGS, (2007)

## Agradecimento

Este trabalho foi desenvolvido no Instituto de Física da UFRGS com o apoio financeiro do CNPq.

## Contato

Luís Gustavo Möllmann dos Santos,  
pelo e-mail [luisgustavo181@gmail.com](mailto:luisgustavo181@gmail.com)