



**UNIVERSIDADE FEDERAL DE PERNAMBUCO  
DEPARTAMENTO DE FÍSICA – CCEN  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA**

## **DISSERTAÇÃO DE MESTRADO**

### **ESTUDOS DE UNIVERSALIDADE EM MODELOS DE VIDROS DE SPIN**

por

**Alexandre Soares Ramos**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física do Departamento de Física da Universidade Federal de Pernambuco como parte dos requisitos para obtenção do título de Mestre em Física.

**Banca Examinadora:**

Prof. Jairo Rolim Lopes de Almeida (Orientador-UFPE)

Prof. Francisco George Brady Moreira (DF – UFPE)

Prof. Adauto José Ferreira de Souza (DF - UFRPE)

Recife - PE, Brasil  
Outubro - 1997

Ramos, Alexandre Soares

Estudos de universalidade em modelos de vidros de spin / Alexandre Soares Ramos. - Recife : O Autor, 1997.

97 folhas : il., fig.

Dissertação (mestrado) - Universidade Federal de Pernambuco. CCEN. Física, 1997.

Inclui bibliografia.

1. Física - Mecânica estatística. 2. Vidros de spin - Universalidade - Expoentes críticos. 3. Método de Monte Carlo - Algoritmo de Metrópolis - Modelo de Ising 2D - Simulação de vidros de spin unidimensionais. I. Título.

537.611.2  
531.34

CDU (2.ed.)  
CDD (22.ed.)

UFPE  
BC2006-295



UNIVERSIDADE FEDERAL DE PERNAMBUCO  
CCEN-DEPARTAMENTO DE FÍSICA  
SECRETARIA DE PÓS-GRADUAÇÃO  
Cidade Universitária - CEP. 50670-901 - Recife - PE - Brasil  
☎ (081) 271.8450 r/217 - FAX (081) 271.0359  
Correio Eletrônico: POSGRAD@DF.UFPE.BR  
Servidor: WWW.DF.UFPE.BR/PG.HTML

DF

---

---

**PARECER DA BANCA EXAMINADORA DE DEFESA DE TESE DE MESTRADO**

---

---

**ALEXANDRE SOARES RAMOS**

***“UNIVERSALIDADE EM VIDROS DE SPIN”***

A Banca Examinadora composta pelos Professores Jairo Rolim Lopes de Almeida (Presidente e Orientador), Francisco George Brady Moreira, ambos do Departamento de Física da Universidade Federal de Pernambuco, e Aduino José F. de Souza, da Universidade Federal Rural de Pernambuco, consideram o candidato aprovado com grau “ A ”.

Secretaria de Pós-Graduação do Departamento de Física do Centro de Ciências Exatas e da Natureza da Universidade Federal de Pernambuco, em 10 de outubro de 1997.

Jairo Rolim Lopes de Almeida  
Presidente e Orientador

Francisco George Brady Moreira  
Membro

Aduino José F. de Souza  
Membro

Eu certamente não teria chegado até aqui sem a presença das seguintes pessoas na minha vida: meu pai (Hermino), minha mãe (Terezinha) e meu irmão (André), por isso dedico desde já este trabalho a eles.

A amizade de

Ernesto (echepe)  
Leo Cabral  
Marquinhos

## AGRADECIMENTOS

A Jairo Rolim Lopes de Almeida, não só por ter me orientado profissionalmente, mas também por ter me dado conselhos precisos nos momentos difíceis deste período.

Ao Professor e amigo Albino com o qual trabalhei durante o tempo de graduação, e também responsável pela minha formação.

A Lu, que conseguiu a incrível façanha de me localizar quando eu vagava com  $\psi = \exp(ikx)$ , e transformou assim os meus dias mais prazerosos.

A Alessandro (fonfom), Alexandro, Carlos, Clayton, Leo Menezes, Márcio, Nickfor e Renato, pois afinal de contas ninguém sobrevive sem aqueles momentos de descontração regados de muita coca (cola).

A Gustavo, Rosas e Osmundo por terem tornado menores os problemas apresentados nos meus primeiros contatos com as estações de trabalho.

A Jorge Albino, meu primeiro professor de física e amigo de longa data.

A meu vô Titico que um dia teve a “teimosia” de sair da roça em busca da cidade grande para que todos pudessem aprender mais e terem assim uma vida melhor.

Ao CNPq pelo apoio financeiro.

# ÍNDICE

Resumo .....	1
Abstract .....	2
Capítulo 1: Introdução a fenômenos críticos e Vidros de Spin .....	3
1.1 Introdução .....	3
1.2 Fenômenos críticos .....	4
1.2.1 Transições de fase de segunda ordem .....	6
1.3 Universalidade .....	8
1.3.1 Expoentes críticos .....	11
1.3.2 Grupo de renormalização .....	15
1.4 Vidros de Spin .....	22
1.4.1 O modelo de Edwards-Anderson .....	26
1.4.2 Solução de campo médio para o modelo de EA .....	28
Referências .....	32
Capítulo 2: Método de Monte Carlo .....	34
2.1 Introdução .....	34
2.2 Ilustração de método em 1D .....	37
2.3 Números aleatórios .....	42
2.3.1 Gerando números com uma dada distribuição .....	44
2.4 O algoritmo de Metrópolis .....	46
2.4.1 Processos Markovianos .....	47
2.4.2 O algoritmo .....	50
2.4.3 Modelo de Ising 2D .....	53
Referências .....	57
Capítulo 3: Simulação e resultados dos VS bidimensionais .....	59
3.1 Introdução .....	59
3.2 A simulação .....	60
3.3 Conclusões .....	73
Referências .....	75

Capítulo 4: Soluções numéricas exatas de VS unidimensionais .....	77
4.1 Introdução .....	77
4.2 Estado Fundamental de um vidro de spin 1-D .....	79
4.2.1 Caso $z=2$ .....	86
4.2.2 Caso $z=3$ .....	88
4.3 Conclusões .....	89
Referências .....	96
Capítulo 5: Discussão Geral e Perspectivas .....	96
5.1 Conclusões .....	96
5.2 Perspectivas .....	97

## RESUMO

Sistemas desordenados vêm sendo objeto de extenso estudo devido ao fato de apresentarem características peculiares não presentes em sistemas ordenados. Entre estas características se encontra a controvertida questão da dependência do valor de expoentes críticos com parâmetros não pertinentes no conceito tradicional de universalidade aplicada a sistemas uniformes.

No presente trabalho, estudamos o comportamento do modelo de Ising generalizado com interações aleatórias entre primeiros vizinhos em duas dimensões (rede quadrada), através de simulações de Monte Carlo. Utilizamos uma rede quadrada  $60 \times 60$  com condições de contorno periódicas e constantes de acoplamento entre primeiros vizinhos distribuídas aleatoriamente de acordo com as distribuições de probabilidade bimodal e gaussiana. Variamos também os valores assumidos pelos spins:  $S_i = \pm 1$  e  $S_i = 0, \pm 1$ . Este modelo só apresenta uma transição de fase em  $T=0$ , logo observamos uma divergência da susceptibilidade magnética em função do campo externo aplicado de acordo com uma lei de potência no limite  $T \rightarrow 0$  calculada para pequenos valores de campo. Observa-se que o expoente crítico associado  $\Delta$  depende da forma da distribuição de probabilidade dos  $J_{ij}$  porém, para a mesma distribuição, independe do valor quântico do spin.

Realizamos, em seguida, um estudo das propriedades do *ground state* de vidros de spin unidimensionais através de resultados numéricos, obtidos utilizando relações de recorrência para a Hamiltoniana do modelo de Ising com interações aleatórias em uma dimensão, na presença de  $z$  vizinhos. Utilizamos cadeias lineares com  $10^8$  spins e com constantes de acoplamentos seguindo distribuições de probabilidade uniforme, bimodal e gaussiana. Estimamos o expoente crítico  $\Delta$  para diferentes distribuições e diferentes números de vizinhos, o que permitiu concluir que este sistema apresenta um comportamento dependente da distribuição de probabilidade e, para certas distribuições, dependente do número de vizinhos.

**Palavras-chave:** Universalidade, expoentes críticos, Vidros de Spin.

## ABSTRACT

Disordered systems have been studied due to their uncommon properties not present in ordered systems. Among them is the controversial question about the dependence of the critical exponents on parameters that are not pertinent in the usual universality rules applied to uniform systems.

In the present work, we study the Ising spin glasses in dimension two (square lattice) with random near neighbor interactions by Monte Carlo simulations. We use a  $60 \times 60$  lattice with periodic boundary conditions and nearest-neighbor couplings distributed randomly by the Gaussian and bimodal probability distribution. We also change the spin values:  $S_i = \pm 1$  and  $S_i = 0, \pm 1$ . This model shows a phase transition at  $T=0$ , so we observe a magnetic susceptibility divergence as function of the external applied field with a power law in the limit  $T \rightarrow 0$  evaluated for small values of field. One can observe that the critical exponent  $\Delta$  depends on the shape of the probability distribution of  $J_{ij}$ , but for a same distribution, it does not depend on the quantum spin value.

Further we study the ground state properties of one-dimensional spin glasses by numerical results achieved using recurrence relations for the Hamiltonian of the Ising model with random interactions in one dimensional in the presence of  $z$  nearest-neighbors. We use linear chains with  $10^8$  spins and with couplings distributed with uniform,  $\pm J$  and Gaussian probability distribution. We compute the critical exponent  $\Delta$  for different distributions and also for different number  $z$  of nearest-neighbors concluding that this system shows properties depending on the probability distribution and, in some distributions, depending on the number of neighbors.

**Keywords:** Universality, critical exponents, Spin Glasses

# Chapter 1

## Introdução a fenômenos críticos e Vidros de Spin

### 1.1 Introdução

A mudança do comportamento de alguns sistemas com relação a variações de parâmetros intensivos, como por exemplo a temperatura, é algo observado há muito tempo. O homem primitivo, com a posterior descoberta do fogo, certamente ficou intrigado com o desaparecimento de uma certa quantidade de água quando esta era levada ao fogo para aquecer. Não menos intrigante deveria ser o fato da água ficar "dura" nos períodos frios e retornar ao seu estado normal com a volta do período quente.

Posteriormente, com o controle do homem sobre a temperatura em intervalos cada vez maiores, foi possível observar várias outras manifestações de mudanças de estado em uma quantidade enorme de sistemas. Um exemplo disto é a perda das propriedades magnéticas de um ímã quando este é aquecido acima de uma certa temperatura. Outro exemplo, é a ausência de resistência elétrica em certos materiais, quando esfriados abaixo de uma dada temperatura  $T_c$ , que varia de material para material. Este fenômeno, denominado supercondutividade e descoberto em 1911 pelo físico holandês Kamerling Onnes [1], foi justamente descoberto depois de Onnes ter liquefeito o hélio atingindo temperaturas de aproximadamente 4 K, temperatura esta

necessária para observar tal fenômeno no material estudado por ele (mercúrio).

Com o crescimento da classe de sistemas apresentando as mais diversas mudanças de estados, acentuou-se o estudo de tais sistemas do qual resultou a teoria de fenômenos críticos e transições de fase.

## 1.2 Fenômenos Críticos

As transições de fase, às quais estamos mais habituados, são aquelas que ocorrem na água entre os estados sólido, líquido e gasoso. Estas transições são facilmente detectadas uma vez que as propriedades das fases envolvidas são notoriamente diferentes. No entanto, mesmo neste caso, o uso da palavra *fase* começa a se tornar mais delicado, uma vez que podemos passar do estado líquido para o estado gasoso sem haver uma transição de fase, apenas variando os parâmetros intensivos de forma adequada, como pode ser visto na fig.(1-1) na passagem de A para B através da linha pontilhada.

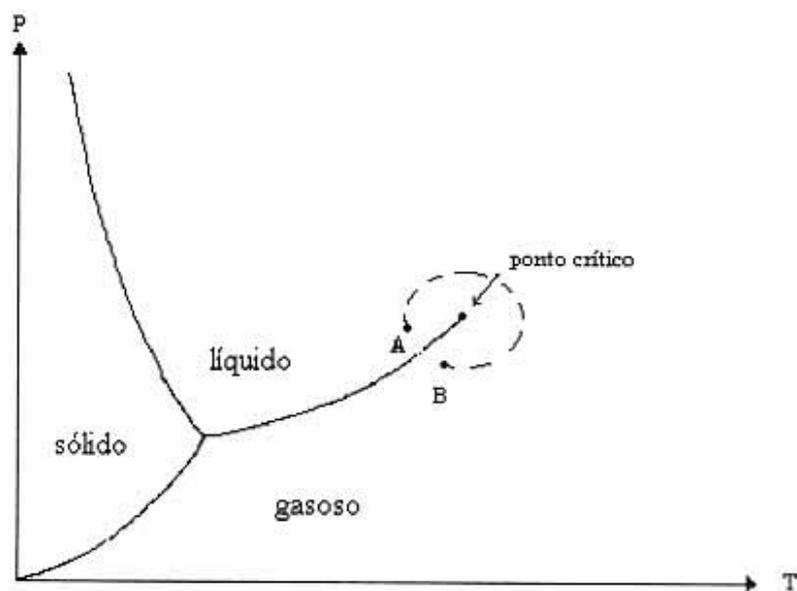


Figure 1-1: Diagrama de fase de um fluido. Todas as transições de fase são de primeira ordem exceto no ponto crítico. Para temperaturas maiores que a do ponto crítico é possível passar continuamente da fase líquida para a fase gasosa.

A definição de uma transição de fase envolve o conceito matemático de analiticidade. Uma função de duas variáveis (por simplificação) é analítica no ponto  $(x,y)$  se sua expansão de Taylor converge para o valor da função em todo ponto dentro de um círculo finito centrado em  $(x,y)$ , ou seja se

$$f(x + \Delta x, y + \Delta y) = f(x, y) + \sum_{m,n=0}^{\infty} f_{mn} \frac{(\Delta x)^m (\Delta y)^n}{m!n!} \quad (1.1)$$

com  $\Delta x^2 + \Delta y^2 < a^2$  para  $a > 0$ . Logo, as regiões de uma única fase no diagrama de fase são regiões onde os potenciais termodinâmicos apropriados são funções analíticas dos respectivos parâmetros e tem como fronteiras curvas através das quais os potenciais são não-analíticos.

Esta definição em termos da analiticidade dos potenciais termodinâmicos traz um problema para a teoria da Mecânica Estatística. Consideremos o modelo bidimensional de Ising (o qual foi utilizado nas nossas simulações com pequenas modificações). Teremos então a seguinte função de partição

$$Z(N, \beta, H) = \sum_C \exp(-\beta J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j - \beta H \sum_i S_i). \quad (1.2)$$

Este modelo foi resolvido exatamente por Onsager ([2]), o qual demonstrou que tal modelo possui uma transição de fase. Porém analisando a função de partição temos que cada termo da soma sobre configurações é uma função analítica dos parâmetros  $\beta$  e  $H$ . Além disso, uma soma finita de funções analíticas é também analítica. Logo, como explicar uma transição de fase se a função de partição é analítica? A resposta vem do fato de que as leis da Termodinâmica e Mecânica Estatística só são inteiramente válidas no limite  $N \rightarrow \infty$ . Ou seja, devemos calcular o potencial canônico por partícula no limite termodinâmico

$$\phi(\beta, H) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left[ \frac{\phi(N, \beta, H)}{N} \right], \quad (1.3)$$

o qual pode ser não-analítico apesar de cada termo  $\frac{\phi(N, \beta, H)}{N}$  ser analítico para  $N$  finito.

### 1.2.1 Transições de fase de segunda ordem

Uma transição de fase ocorre quando há uma singularidade em um potencial termodinâmico, como por exemplo na energia livre de Gibbs (ou de Helmholtz). Se houver uma descontinuidade finita em uma das primeiras derivadas do potencial apropriado, então a transição de fase será de primeira ordem. Porém, se as primeiras derivadas forem contínuas mas as segundas derivadas forem descontínuas ou infinitas, logo a transição será considerada contínua ou de segunda-ordem. No primeiro caso citado, temos como exemplo um sistema ferromagnético na presença de um campo externo, no qual a primeira derivada da energia livre em relação ao campo magnético (magnetização) apresenta uma descontinuidade indicando uma transição de primeira ordem, como pode ser visto na fig.(1-2).

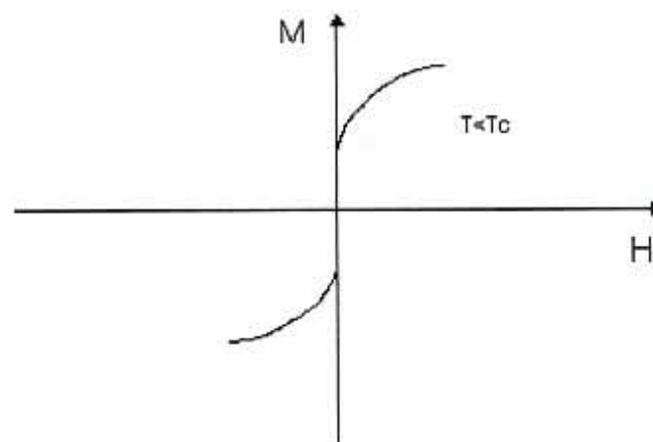


Figure 1-2: Magnetização vs. campo magnético para um sistema ferromagnético. A transição de fase é de primeira ordem para  $T < T_c$  como pode ser observado com a descontinuidade da magnetização.

No segundo caso, utilizamos como exemplo o estado fundamental ( $T_c = 0$ ) de uma cadeia linear com spins de Ising com interações aleatórias entre  $z$  vizinhos ( $z = 4$ , neste caso), a qual apresenta uma susceptibilidade (segunda derivada da energia livre com relação ao campo) divergente indicando uma transição de segunda ordem, resultado este observado na fig.(1-3). Uma transição de fase de segunda ordem também ocorre em um ferromagnético em  $T = T_c$  a campo nulo, onde a magnetização passa

continuamente de zero ( $T > T_c$ ), para valores não nulos ( $T < T_c$ ) em  $T = T_c$ , com uma susceptibilidade divergindo em  $T = T_c^+$  ou  $T = T_c^-$ .

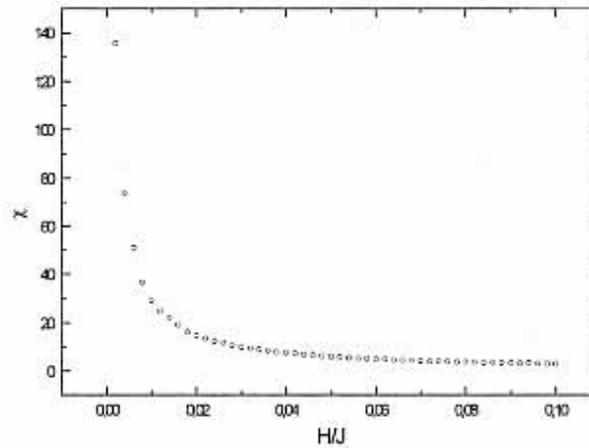


Figure 1-3: Susceptibilidade vs. campo em  $T=0$  para uma cadeia unidimensional de spins de Ising com frustração. Podemos observar que no limite  $H \rightarrow 0$ ,  $\chi$  diverge indicando uma transição de fase de segunda ordem.

As transições de fase de segunda ordem geralmente apresentam quebra de simetria, ou seja, separam fases mais simétricas de fases menos simétricas como no caso do modelo de Ising sem campo externo, o qual acima de  $T_c$  tem simetria de inversão, porém tal simetria deixa de existir abaixo de  $T_c$ . As transições de fase de primeira ordem também separam fases mais simétricas de fases menos simétricas, porém neste caso existe uma descontinuidade finita na estrutura em um intervalo infinitesimal de temperatura (fato observado com a magnetização na fig.(1-2)), diferentemente do caso das transições de segunda ordem. O modelo de Ising, que ilustra bem estes tipos de transições de segunda ordem, possui uma magnetização nula acima de  $T_c$  e diferente de zero abaixo de  $T_c$  com o seu valor variando continuamente na transição, resultado este que pode ser obtido analiticamente.

Esta quantidade, que apresenta um valor nulo acima de uma dada temperatura e um valor diferente de zero abaixo desta temperatura, é denominada parâmetro

de ordem. Exemplos destes são a magnetização em um material ferromagnético e a função de onda superfluida  $\Psi(\mathbf{r})$  na transição do hélio líquido onde  $\Psi^*(\mathbf{r})\Psi(\mathbf{r})$  representa a densidade do superfluido.

### 1.3 Universalidade

Os pontos no espaço termodinâmico, nos quais as transições de fase de segunda ordem ocorrem, são denominados pontos críticos, e o comportamento dos sistemas nas transições de segunda ordem, fenômenos críticos. Uma das características mais interessantes dos fenômenos críticos, é o fato de medidas do sistema perto do ponto crítico serem independentes dos detalhes das interações entre as partículas que o constituem. Esta característica dos fenômenos críticos é denominada universalidade.

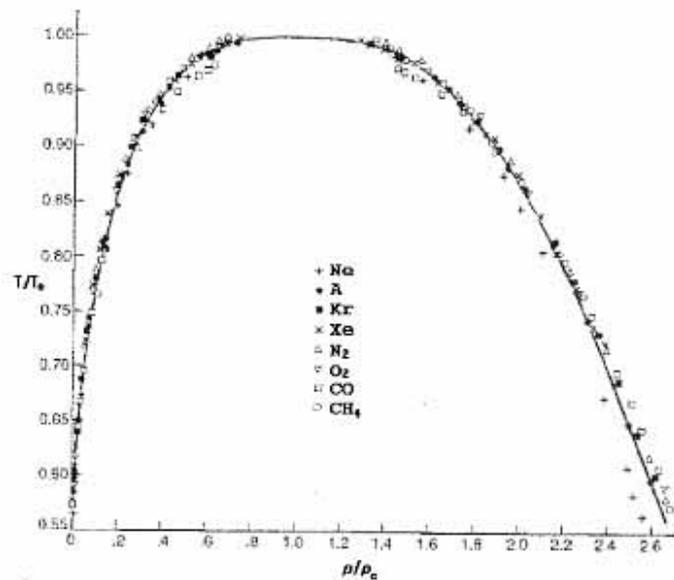


Figure 1-4: Curva de coexistência para oito fluidos diferentes em função das variáveis reduzidas. A linha corresponde ao melhor ajuste dos pontos e fornece  $\beta = 1/3$  (Guggenheim, 1945).

Uma evidência surpreendente disto surge em um gráfico feito por Guggenheim em 1945 [3]. Este resultado pode ser visto na fig.(1-4), onde oito fluidos diferentes estão plotados na unidades reduzidas,  $T/T_c$  e  $\rho/\rho_c$ . Perto do ponto crítico (e impressionantemente longe deste), todos os dados se superpõem, de forma que podem ser descritos por uma mesma equação

$$(\rho_l - \rho_g) \sim (-t)^\beta, \quad (1.4)$$

onde  $\beta = 1/3$  e  $t = \frac{T-T_c}{T_c}$ .

Um teste da validade da universalidade é comparar este valor do expoente crítico  $\beta$  com valores obtidos em transições de fase em um sistema completamente diferente, porém que tenha também um parâmetro de ordem escalar (comentaremos adiante o motivo de tal exigência). Comparando com os resultados obtidos por Heller e Benedek [4] para o  $\text{MnF}_2$ , que é um magneto com anisotropia uniaxial, temos para o mesmo  $\beta = 0.335 \pm .005$  resultado este idêntico ao encontrado por Guggenheim. O modelo tridimensional de Ising, que apesar de não possuir solução exata possui estimativas numéricas para o valor do expoente  $\beta \simeq 0.324$  (com o erro no último algarismo). Logo percebemos o poder de usar simples modelos para descrever fenômenos críticos. É bem mais fácil tratar o modelo de Ising do que um modelo de fluido com um Hamiltoniano complicadíssimo, e ambos, desde que possuam as características necessárias para estarem em uma mesma classe (descreveremos a seguir), fornecem o mesmo resultado na criticalidade.

Para observar como este fato é paradoxal, consideremos o modelo ferromagnético de Ising bidimensional. Para temperaturas muito maiores que a temperatura crítica  $T_c$ , as contribuições entrópicas dominam a energia de *exchange* e, apesar dos spins próximos quererem se alinhar paralelamente, teremos muitas flutuações, as quais deixam a configuração do sistema aleatória. Porém quando a temperatura diminui, a energia de *exchange* começa a dominar, fazendo com que apareçam clusters de spins apontando na mesma direção. Temos então uma transição da fase paramagnética para a fase ferromagnética no modelo de Ising bidimensional.

Acontece que apesar das forças interatômicas serem responsáveis pelas transições

de fase (como citamos acima no caso do modelo de Ising bidimensional), os detalhes destas forças não determinam o comportamento do sistema perto da criticalidade. O caráter universal dos sistemas não só independe dos detalhes das interações entre partículas, como também independe da maioria dos aspectos fundamentais da estrutura do sistema. Como exemplo, tomemos o modelo de Ising 3D em uma rede cúbica, o qual apresenta uma magnetização tendendo a zero quando a temperatura crítica é atingida partindo de temperaturas menores de acordo com

$$M \sim (-t)^\beta \quad (1.5)$$

onde  $\beta \simeq 0.324$  e  $t = \frac{T-T_c}{T_c}$ . O que caracteriza a universalidade é o fato do expoente crítico  $\beta$  independer:

1. dos valores numéricos das constantes de acoplamento em cada direção (desde que seja maiores que zero uma vez que se tivermos uma delas nula, cairemos no modelo de Ising 2D e uma das coisas das quais  $\beta$  depende é a dimensionalidade do sistema).
2. da estrutura da rede. Ou seja,  $\beta$  independe de estarmos tratando o modelo ferromagnético de Ising 3D em uma rede cúbica de face centrada, ou numa rede tetragonal, hexagonal ou qualquer outra rede tridimensional de Bravais.
3. dos detalhes das interações. O modelo de Ising é definido como tendo apenas interações de primeiros vizinhos. Se interações de maior alcance forem consideradas (segundos vizinhos, terceiros vizinhos, etc.), nada mudará no resultado de  $\beta$ .
4. do sistema ser o modelo magnético de Ising 3D ou um gás tridimensional com coordenadas e momentos contínuos. Para a transição líquido-gás temos como parâmetro de ordem  $\Delta n = n(\text{líquido}) - n(\text{gás})$  onde  $n$  é a densidade. Assim como no modelo de Ising 3D, temos  $\Delta n \sim (-t)^\beta$  com  $\beta$  assumindo o mesmo valor do caso magnético.

O expoente  $\beta$  é apenas um dos diferentes expoentes críticos que podem ser definidos numa transição de fase. Todos os outros expoentes também se enquadram no aspecto de universalidade. Seus valores dependem apenas de duas características da transição de fase: da dimensão do parâmetro de ordem (unidimensional no caso de um número real, bidimensional no caso de um número complexo ou no caso de um vetor bidimensional, tridimensional no caso de um vetor no espaço, etc.), e da dimensão do sistema.

Podemos então classificar os sistemas em classes de universalidade de forma que dois sistemas que pertençam a uma mesma classe de universalidade possuem certamente mesma dimensão e parâmetros de ordem com a mesma dimensionalidade. Um exemplo disto pode ser visto na tabela abaixo: diferentes sistemas tridimensionais possuem os mesmos expoentes, os quais dependem apenas da dimensionalidade do parâmetro de ordem, uma vez que estamos tratando sistemas em uma mesma dimensão.

	Xe	Fluido binário	$^4\text{He}$	Fe	Ni
D	1	1	2	3	3
$\alpha$	$< 0.2$	$0.113 \pm 0.005$	$-0.014 \pm .016$	$-0.03 \pm .12$	$0.04 \pm .12$
$\beta$	$0.35 \pm 0.015$	$0.322 \pm 0.002$	$0.34 \pm .01$	$0.37 \pm .01$	$0.358 \pm .003$
$\gamma$	$1.3^{+.1}_{-.2}$	$1.239 \pm 0.002$	$1.33 \pm .03$	$1.33 \pm .015$	$1.33 \pm .02$
$\delta$	$4.2^{+.6}_{-.3}$	$4.85 \pm .03$	$3.95 \pm .15$	$4.3 \pm .1$	$4.29 \pm .05$
$\eta$	$0.1 \pm .1$	$0.017 \pm .015$	$0.021 \pm .05$	$0.07 \pm .04$	$0.041 \pm .01$
$\nu$	$\approx 0.57$	$0.625 \pm .006$	$.672 \pm .001$	$0.69 \pm .02$	$0.64 \pm .1$

A seguir, iremos definir estes outros expoentes críticos que aparecem na tabela acima.

### 1.3.1 Expoentes críticos

Temos afirmado que o ponto crítico é determinado pela divergência de grandezas como por exemplo a susceptibilidade. Para que possamos compreender mais a teoria de fenômenos críticos, é necessário que analisemos mais cuidadosamente a forma dessas

divergências e também as singularidades de outras funções termodinâmicas perto do ponto crítico. Para tal definimos os expoentes críticos que desempenham um papel fundamental na teoria de fenômenos críticos.

Um expoente crítico associado a uma função  $F(t)$  é definido como

$$\lambda = \lim_{t \rightarrow 0} \frac{\ln |F(t)|}{\ln |t|} \quad (1.6)$$

onde  $t = \frac{T-T_c}{T_c}$  como citado anteriormente. Outra forma de escrever a eq.(1.6), supondo que o limite acima existe, é

$$F(t) \sim |t|^\lambda, \quad (1.7)$$

que é como geralmente definem os expoentes críticos. Vale resaltar que o sinal  $\sim$  na eq.(1.7), representa o fato de que esta equação apenas descreve o comportamento assintótico da função  $F(t)$  quando  $t \rightarrow 0$ .

A magnetização a campo nulo de um ferromagneto se anula quando partimos de uma temperatura menor do que  $T_c$  com  $T \rightarrow T_c$  de acordo com

$$M \sim (-t)^\beta, \quad (1.8)$$

A susceptibilidade a campo nulo diverge em  $T_c$  e o calor específico a campo nulo apresenta um comportamento similar. Logo podemos definir

$$\chi_T \sim |t|^{-\gamma} \quad (1.9)$$

$$C_H \sim |t|^{-\alpha} \quad (1.10)$$

com  $\gamma$  e  $\alpha$  positivos. Um quarto expoente é introduzido para descrever o comportamento da isoterma crítica perto do ponto crítico em  $H = 0$ ,

$$H \sim |M|^\delta \operatorname{sgn}(M) \quad (1.11)$$

ou

$$M \sim |H|^{\frac{1}{\delta}}. \quad (1.12)$$

Os últimos expoentes citados anteriormente são  $\eta$  e  $\nu$ , estando estes associados ao comprimento de correlação ( $\nu$ ) e à função de correlação ( $\eta$ ), a saber

$$\zeta \sim |t|^{-\nu} \quad (1.13)$$

$$G(\mathbf{r}) \sim \frac{1}{r^{d-2+\eta}}. \quad (1.14)$$

Usamos aqui um resultado comprovado pelo grupo de renormalização, que afirma que os expoentes críticos associados a uma grandeza termodinâmica são iguais quando  $T \rightarrow T_c$  independentemente da forma com que se atinge  $T_c$ , seja partindo de temperaturas menores do que  $T_c$ , ou temperaturas maiores do que  $T_c$ .

Estes expoentes não são independentes. Existem desigualdades envolvendo esses expoentes, que, após a hipótese de homogeneidade de Widom, verificou-se serem igualdades

$$\alpha + 2\beta + \gamma \geq 2 \text{ (Rushbrooke)}, \quad (1.15)$$

$$\alpha + \beta(1 + \delta) \geq 2 \text{ (Griffiths)}, \quad (1.16)$$

$$d \frac{(\delta - 1)}{(\delta + 1)} \geq (d - \eta) \text{ (Buckingham)} \quad (1.17)$$

$$(2 - \eta)\nu \geq \gamma \text{ (Fisher)}, \quad (1.18)$$

$$d\nu \geq 2 - \alpha \text{ (Josephson)}. \quad (1.19)$$

Logo, conhecendo o valor de dois expoentes, podemos determinar através das equações acima todo o conjunto de expoentes críticos.

Entre os primeiros estudos em transições de fase, podemos destacar as teorias clássicas. Temos uma teoria para o ferromagnetismo proposta por Weiss (1907), a teoria de Ornstein-Zernike (1914), onde aparece a função de correlação, e a teoria clássica de Landau que é uma generalização das teorias clássicas e que propõe uma expansão da energia livre em uma série de potências do parâmetro de ordem. Esta

teoria explica qualitativamente o fato de uma transição ser de primeira ou segunda ordem, porém por não levar em consideração as flutuações do sistema (como as outras teorias clássicas), a mesma falha em prever o comportamento do sistema próximo ao ponto crítico, uma vez que as flutuações se tornam muito grandes na criticalidade.

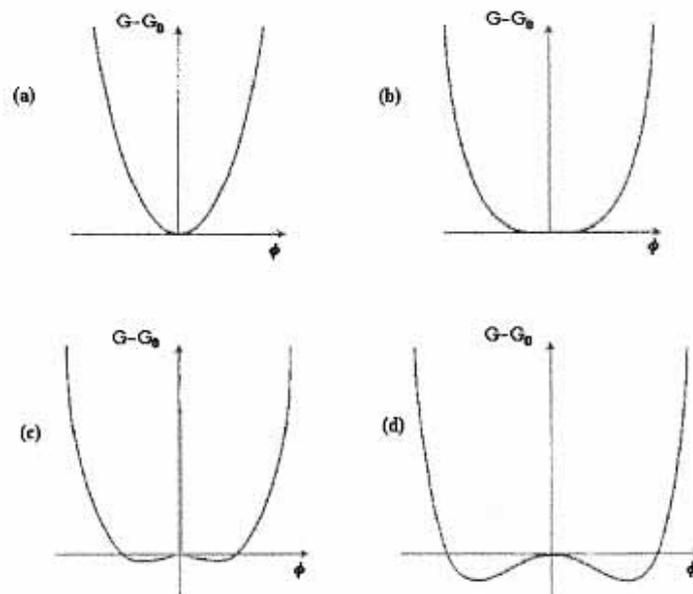


Figure 1-5: Energia livre de Landau em função do parâmetro de ordem (magnetização) para valores decrescentes de  $t$ . (a)  $t > 0$ ,  $t = 0$ ,  $t \leq 0$ ,  $t < 0$ .

Landau propôs expandir a energia livre de Gibbs em função do parâmetro de ordem

$$G(T, \phi) = G_0 + tG_2^0\phi^2 + G_4\phi^4, \quad (1.20)$$

onde os termos ímpares não são considerados, já que a energia deve permanecer invariante por uma inversão da magnetização, e a série foi truncada devido ao fato de que os outros termos não alteram o comportamento crítico do sistema. Supondo que estamos tratando de um ferromagneto na ausência de um campo externo então

$$H = \frac{\partial G(T, \phi)}{\partial \phi} = 2tG_2^0\phi + 4G_4\phi^3 \equiv 0. \quad (1.21)$$

Se  $T > T_c \Rightarrow t > 0$ , a única solução é  $\phi = 0$  (fase paramagnética). Porém se  $T < T_c \Rightarrow t < 0$ , logo

$$\phi \sim (-t)^{1/2}, \quad (1.22)$$

implicando em  $\beta(\text{clássico}) = 1/2$ . De forma análoga podemos calcular

$$\chi_T^{-1} = \left( \frac{\partial^2 G(T, \phi)}{\partial \phi^2} \right)_T = 2G_2^0 t + 12G_4 \phi^2, \quad (1.23)$$

que no limite  $\phi \rightarrow 0$  nos fornece

$$\chi_T \sim |t|^{-1}, \quad (1.24)$$

onde  $\gamma(\text{clássico}) = 1$ . Continuando com o cálculo dos expoentes obtemos facilmente  $\alpha = 0$  e  $\delta = 3$ . Todos estes expoentes calculados pela teoria de Landau tem os mesmos valores que os calculados pela aproximação de campo médio para o modelo de Ising.

Observamos que os expoentes críticos da teoria de Landau independem da dimensão do sistema, fato este que não está de acordo com as regras de universalidade.

### 1.3.2 Grupo de renormalização

O grupo de renormalização, proposto por K.G.Wilson [5], revolucionou a área de fenômenos críticos. Diferentemente das teorias clássicas, que não levavam em consideração as flutuações, o grupo de renormalização é estabelecido fundamentado nas mesmas. A proposta é modificar a escala de um sistema removendo graus de liberdade. As propriedades do sistema só permanecerão inalteradas com tal modificação na criticalidade, onde então o comportamento passa a ser descrito pelos pontos fixos da transformação. O primeiro passo é definir as transformações do grupo de renormalização e introduzir o conceito de pontos fixos, os quais irão descrever o sistema na criticalidade.

O modelo inicial, descrito pelo Hamiltoniano reduzido  $\bar{\mathcal{H}} \equiv \mathcal{H}/kT$ , é renormaliza-

do resultando em um novo sistema descrito pelo novo Hamiltoniano reduzido

$$\bar{\mathcal{H}} = \mathbf{R}\bar{\mathcal{H}}. \quad (1.25)$$

O operador  $\mathbf{R}$  do grupo de renormalização reduz o número de graus de liberdade do sistema de  $N$  para  $N'$ . No espaço real, isto pode ser feito removendo ou agrupando spins como ilustrado na fig.(1-6) para um sistema de Ising bidimensional.

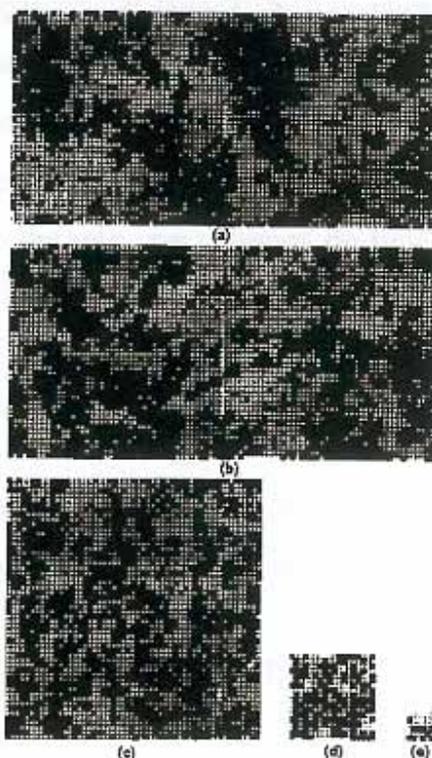


Figure 1-6: Aplicações sucessivas das transformações do grupo de renormalização em um modelo de Ising bidimensional em  $T = T_c$ . A configuração inicial (a) foi obtida através de simulação de Monte Carlo e as seguintes (b),(c),(d),(e), repondo cada cluster de nove spins por um único spin com valor igual ao da maioria do cluster. Como na transição o comprimento de correlação é infinito, iterações sucessivas do grupo de renormalização deixam o sistema invariante.

Partindo de uma configuração inicial (a) gerada através de uma simulação de Monte Carlo para  $T = T_c$ , obtemos configurações renormalizadas onde a regra neste caso foi tomar cada grupo de nove spins, e substituir por um único spin cujo valor

será igual ao da maioria dos spins do *cluster*. O fator de escala da transformação,  $b$ , é definido como

$$b^d = \frac{N}{N'} \quad (1.26)$$

que no presente exemplo vale  $b = 3$  ( $d = 2$ ). Como partimos de uma configuração na qual o comprimento de correlação é infinito, de forma que temos estruturas ordenadas em todas as escalas, logo o sistema permanece invariante em relação à transformação do grupo de renormalização (resultado observado na fig.(1-6) letra e). Se tivéssemos partido de uma configuração inicial com  $T > T_c$  e realizado tal transformação, sucessivas iterações levariam a uma configuração final na qual os spins estariam descorrelacionados correspondendo a uma temperatura infinita (quanto mais próximos estivermos de  $T_c$  mais iterações serão necessárias para que o sistema perca a ordem de curto alcance). Se, no entanto, partíssemos de uma configuração com  $T < T_c$ , as flutuações relativas ao estado ordenado deixariam de existir, devido à mudança de escala, e teríamos uma configuração final com todos os spins apontando em uma mesma direção ( $T = 0$ ).

Uma condição essencial, a ser satisfeita por qualquer transformação do grupo de renormalização, é que a função de partição deve permanecer inalterada

$$\mathcal{Z}_{N'}(\overline{\mathcal{H}}') = \mathcal{Z}_N(\overline{\mathcal{H}}). \quad (1.27)$$

Para ilustrar a técnica do grupo de renormalização, faremos uma aplicação ao modelo de Ising bidimensional em uma rede quadrada na ausência de campo externo, definido por

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j \quad (1.28)$$

onde  $\sigma_i = \pm 1$  e a soma só considerada entre primeiros vizinhos.

Um traço parcial na função de partição é realizado sobre os spins marcados por  $x$  (fig.(1-7)), resultando então em um Hamiltoniano que depende só de metade dos spins originais. A nova rede possui a mesma topologia da rede inicial, porém com

uma mudança de escala  $b = \sqrt{2}$ .

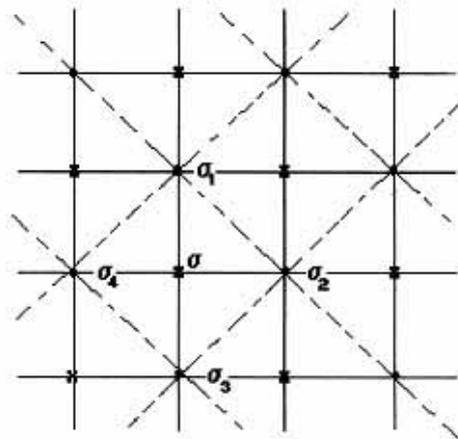


Figure 1-7: Renormalização de uma rede quadrada por um fator de escala  $b = \sqrt{2}$ . A rede renormalizada é representada pelas linhas pontilhadas. No processo de dizimação os spins marcados com um x não sobrevivem.

Partindo de um spin  $\sigma$  em uma das sub-redes, e os seus primeiros vizinhos  $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \sigma_4$ , da outra sub-rede, e realizando a soma sobre  $\sigma = \pm 1$ , temos

$$\sum_{\sigma=\pm 1} \exp[K\sigma(\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3 + \sigma_4)] = e^{K(\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3 + \sigma_4)} + e^{-K(\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3 + \sigma_4)}, \quad (1.29)$$

onde  $K$  é a constante de interação reduzida  $K = \frac{J}{kT}$ . Podemos reescrever a eq.(1.29) como

$$2 \cosh[K(\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3 + \sigma_4)] \equiv A \exp\left[B \sum_{i<j=1}^4 \sigma_i \sigma_j + C \sigma_1 \sigma_2 \sigma_3 \sigma_4\right] \quad (1.30)$$

onde  $A, B$  e  $C$  serão determinados a seguir. Para tal, devemos considerar os possíveis valores assumidos por  $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \sigma_4$  na eq.(1.30).

Se  $\sigma_1 = \sigma_2 = \sigma_3 = \sigma_4 = 1$ ,

$$2 \cosh 4K = A \exp(6B + C); \quad (1.31)$$

Se  $\sigma_1 = \sigma_2 = -\sigma_3 = -\sigma_4 = 1$ ,

$$2 = A \exp(-2B + C); \quad (1.32)$$

Se  $\sigma_1 = \sigma_2 = \sigma_3 = -\sigma_4 = 1$ ,

$$2 \cosh 2K = A \exp(-C); \quad (1.33)$$

onde o sistema formado pelas eqs.(1.31)-(1.33) fornece como solução

$$A = 2[\cosh^4(2K) \cosh(4K)]^{1/8}, \quad (1.34)$$

$$B = \frac{1}{8} \ln[\cosh(4K)], \quad (1.35)$$

$$C = \frac{1}{8} \ln[1 - \tanh^4(2K)]. \quad (1.36)$$

Observamos que depois do processo de dizimação, cada ligação entre primeiros vizinhos é conectada duplamente, resultando em uma nova contante de acoplamento  $K' = 2B$ . Além disso, o processo induz a interações entre outros vizinhos além dos primeiros, por exemplo surge uma interação entre segundos vizinhos com constante  $L' = B$ . Como o número de interações tende a aumentar, logo, para resolver o problema, ou se trunca as interações, ou as trata como perturbações.

Se considerarmos o limite de altas temperaturas ( $K = \frac{J}{kT} \rightarrow 0$ ), e desprezarmos o termo  $C$  de quatro spins teremos

$$K' = \frac{1}{4} \ln[\cosh(4K)] \approx \frac{1}{4} \ln \left( \frac{1 + 4K + 8K^2 + 1 - 4K + 8K^2}{2} \right), \quad (1.37)$$

e ainda com  $\ln(1 + x) \approx x$ ,  $x \rightarrow 0$

$$K' \approx 2K^2; \quad L' \approx K^2. \quad (1.38)$$

Estas equações possuem os seguintes pontos fixos

$$K^* = L^* = 0, \quad (1.39)$$

$$K^* = L^* = \infty. \quad (1.40)$$

A solução (1.39) corresponde a uma temperatura infinita (solução trivial), enquanto que a solução (1.40) corresponde a  $T = 0$ , devendo então ser ignorada, uma vez que supomos  $K \rightarrow 0$ . Para obtermos uma solução não trivial, trataremos uma interação entre segundos vizinhos com uma pequena constante de acoplamento, como uma perturbação. Logo teremos  $K$  (primeiros vizinhos) e  $L$  (segundos vizinhos), e manteremos na renormalização apenas termos da ordem de  $K^2$  e  $L$ . Com esta aproximação temos

$$K' = 2K^2 + L \quad (1.41)$$

e

$$L' = K^2. \quad (1.42)$$

Este sistema tem um ponto fixo não trivial

$$K^* = \frac{1}{3}, \quad L^* = \frac{1}{9}. \quad (1.43)$$

Temos então um ponto fixo paramagnético  $(K^*, L^*) = (0, 0)$ , um ponto fixo ferromagnético  $(K^*, L^*) = (\infty, \infty)$  e um ponto fixo não trivial em  $(K^*, L^*) = (1/3, 1/9)$ . Para linearizar as equações de renormalização em torno do ponto fixo não trivial, definimos  $\delta K \equiv K - K^*$  e  $\delta L \equiv L - L^*$  com

$$\delta K' = \frac{\partial K'}{\partial K} \delta K + \frac{\partial K'}{\partial L} \delta L = 4K^* \delta K + \delta L, \quad (1.44)$$

e

$$\delta L' = \frac{\partial L'}{\partial K} \delta K + \frac{\partial L'}{\partial L} \delta L = 2K^* \delta K. \quad (1.45)$$

Substituindo os valores de  $K^*$  e  $L^*$  obtemos

$$\begin{pmatrix} K' \\ L' \end{pmatrix} = \mathbf{M} \begin{pmatrix} K \\ L \end{pmatrix}, \quad (1.46)$$

com

$$\mathbf{M} \equiv \begin{pmatrix} 4/3 & 1 \\ 2/3 & 0 \end{pmatrix}, \quad (1.47)$$

a qual possui autovalores  $\lambda_{\pm} = \frac{1}{3}(2 \pm \sqrt{10})$ . Desconsiderando o autovetor negativo, obtemos

$$\nu = \frac{\ln b}{\ln \lambda_+} = \ln \frac{\sqrt{2}}{\ln 1.72} \cong 0.638. \quad (1.48)$$

O resultado mais importante da aproximação, que fizemos, é que a superfície crítica  $K_c(L)$  (determinada pelas eqs.(1.41),(1.42)) é toda governada por um único ponto fixo. Logo, os expoentes críticos são independentes dos valores das constantes de acoplamento entre primeiros ( $2B$ ) e segundos vizinhos ( $B$ ) na criticalidade. Este é um exemplo explícito de como a propriedade de universalidade surge no formalismo do grupo de renormalização.

O valor de  $\nu$  obtido na eq.(1.48) difere do valor exato ( $\nu = 1$ ). Isto ocorre devido às aproximações usadas na nossa solução. Apesar de não possuímos um parâmetro que permit a uma estimativa do erro que surge pelas aproximações utilizadas, é sempre possível aprimorar a técnica do grupo de renormalização no espaço real, de forma a se obter resultados muito próximos da solução exata..

## 1.4 Vidros de Spin

Os vidros de spin são materiais magnéticos desordenados, nos quais as interações entre momentos magnéticos são aleatórias tanto em intensidade quanto em sinal. Este fato leva o estado de vidro de spin ser caracterizado por um tipo de ordem, em que, abaixo de uma temperatura característica  $T_f$ , os momentos magnéticos congelam de um modo cooperativo em direções aleatórias. Experimentalmente, podemos obter tais materiais partindo de uma matriz magnética formada por metais nobres hospedeiros (Au,Ag,Cu) e diluir fracamente nesta ( $\sim 1$  a 10%), íons de metais de transição (Mn,Fe). Em seguida, para que a liga sofra uma transição para o estado vidro de spin, resfria-se o sistema rapidamente, de modo que as impurezas diluídas não conseguem se arranjar no estado de menor energia e o sistema é então forçado a congelar de forma desordenada.

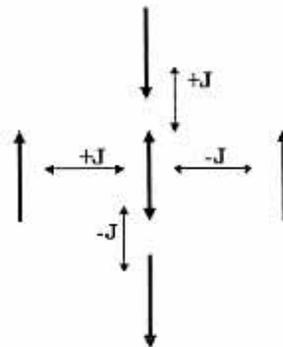


Figure 1-8: Exemplo de frustração em um sistema com spins de Ising e distribuição de interações bimodal. O spin central está frustrado por não ter uma direção preferencial.

Por possuir acoplamentos entre spins ora ferromagnéticos, ora antiferromagnéticos, o sistema apresenta frustração. O conceito de frustração é ilustrado na fig.(1-8), onde verificamos que o conflito de informações no sítio central faz com que o spin do mesmo não tenha uma direção preferencial, o qual denominamos frustrado.

Os efeitos conjuntos da frustração e da desordem (ligações positivas e negativas distribuídas de forma aleatória) são as principais características do comportamento vidro de spin.

Nos vidros de spin metálicos (descritos acima), a frustração magnética é devido ao *exchange* indireto RKKY [6], que se origina da interação entre um íon metálico com spin  $S_i$  e os elétrons de condução polarizados pela presença de um spin  $S_j$

$$\mathcal{H}_{RKKY} = J_0 \frac{\cos(2k_F r_{ij} + \varphi_0)}{(k_F r_{ij})^3} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j, \quad r_{ij} \rightarrow \infty \quad (1.49)$$

onde  $J_0$  e  $\varphi_0$  são constantes e  $k_F$  é o vetor de onda de Fermi do metal hospedeiro. O acoplamento será do tipo ferro ou antiferromagnético dependendo da distância  $r_{ij}$  entre os sítios. Ao diluímos o sistema, a distância entre os íons passa a ser aleatória, de forma que teremos frustração, uma vez que não teremos nenhuma configuração na qual todas as interações são satisfeitas simultaneamente. Ou seja, existem então muitas configurações nas quais o sistema pode congelar. Isto leva o sistema a possuir a superfície de energia do espaço de fase apresentando uma estrutura de vários mínimos globais e locais separados entre si por altas barreiras de energia, como pode ser visto na fig.(1-9), de forma que existem vários estados termodinâmicos degenerados com as mesmas propriedades macroscópicas mas com diferentes configurações microscópicas.

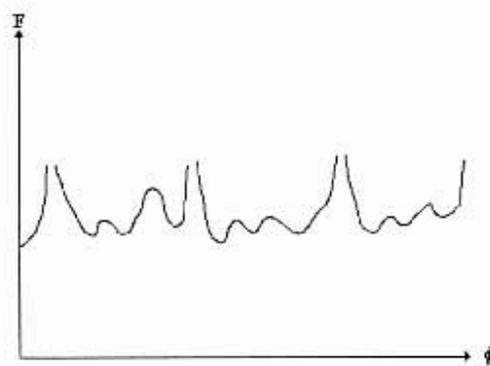


Figure 1-9: Energia livre da fase vidro de spin.

No caso de um ferromagneto, também podemos encontrar barreiras de energia

separando configurações de domínios de estados estáveis, porém, pelo fato de não serem tão altas, o tempo durante o qual o sistema permanece nestas configurações é ínfimo, de modo que o equilíbrio é rapidamente atingido. Diferentemente destes, os vidros de spin necessitariam de um tempo extremamente longo para atingir, através de ativação térmica ou tunelamento, uma configuração de equilíbrio, estando este inicialmente em um estado metaestável. Este fato se torna mais acentuado com o decréscimo da temperatura, pois, além de haver um aumento no tamanho das barreiras, há um crescimento lento dos domínios por estes se encontrarem em regiões não-magnéticas ou de ligações fortes.

Além dos vidros de spin metálicos (discutidos até o presente momento), existe um outro grupo destes materiais que são os vidros de spin isolantes. Exemplos destes são:  $Eu_xSr_{1-x}S$ ,  $Eu_{1-x}Gd_xS$ ,  $Fe_{1-x}Mg_xCl_2$ , dentre os quais o mais estudado é o  $Eu_xSr_{1-x}S$ . Neste caso a interação magnética é direta e de curto alcance entre os átomos de  $Eu$ , de forma que a mesma é positiva entre primeiros vizinhos e negativa entre segundos vizinhos. Devido ao curto alcance das interações, estes materiais possuem um diagrama de fases diferente do caso dos vidros de spin metálicos.

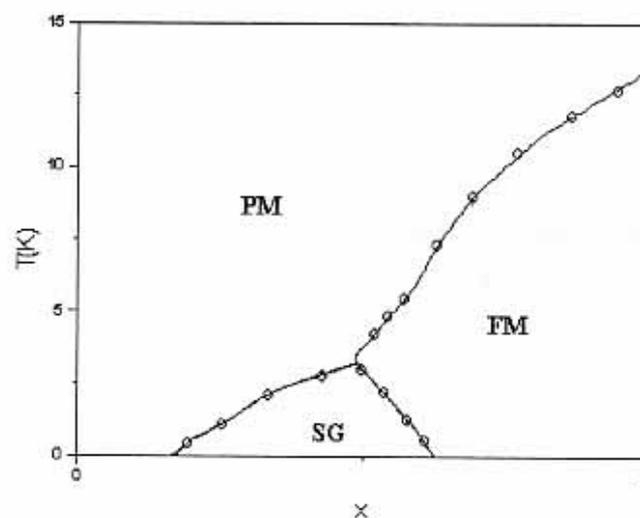


Figure 1-10: Diagrama da temperatura vs. concentração no  $Eu_xSr_{1-x}S$ , onde aparece uma reentrância da fase ferromagnética a partir do ponto multicrítico [7].

Como podemos observar na fig. (1-10), onde aparece o diagrama de fase do  $Eu_xSr_{1-x}S$ , existe uma concentração crítica abaixo da qual não existe a fase vidro de spin, mesmo para temperaturas  $T \rightarrow 0$ . Já nos materiais metálicos, o caráter de longo alcance das interações RKKY permite o aparecimento de uma fase vidro de spin, mesmo para pequenas concentrações de íons magnéticos.

Medidas experimentais em vidros de spin destacaram algumas características *sui generis* destes materiais: um pico na susceptibilidade a.c., que vai se tornando arredondado, à medida em que a frequência ou o campo vão sendo aumentados, indicando a destruição do estado vítreo, quando a energia Zeeman se torna bem maior do que as energias de interação entre spins; para temperaturas abaixo da temperatura de transição  $T_g$ , observa-se que a magnetização e a susceptibilidade d.c. dependem fortemente da forma utilizada para a realização das medidas. Resultados da magnetização, quando a amostra é resfriada a campo nulo (ZFC), não coincidem com os resultados da magnetização, quando esta é resfriada com campo magnético estático. Como no caso FC há apenas uma pequena dependência temporal dos resultados, diferentemente do caso ZFC, que além da forte dependência temporal apresenta ciclos de histerese, consideramos então  $M_{FC} \approx M_{eq}$  (resultado utilizado no cap. 3) ou seja, o estado FC é o que mais se aproxima do equilíbrio termodinâmico; em temperaturas maiores do que  $T_g$  nota-se a existência de um máximo arredondado no calor específico.

Durante muito tempo se questionou a existência de uma real transição de fase para o estado vidro de spin, fato atualmente aceito. Medidas experimentais da susceptibilidade não linear [8]

$$M = \chi_0(T)H - \chi_{nl}(T)H^3, \quad (1.50)$$

definida como o coeficiente de  $-H^3$  na expansão da magnetização em potências do

campo magnético externo, revelam que a mesma escala com

$$\chi_{nl} \approx \left( \frac{T - T_g}{T_g} \right)^{-\gamma}, \quad (1.51)$$

onde  $\gamma$  é o expoente crítico associado à divergência de  $\chi_{nl}$ , à medida em que nos aproximamos de  $T_g$ . Esta divergência nos permite classificar a transição para a fase vidro de spin dentro do formalismo das transições de fases de segunda ordem, as quais apresentam expoentes críticos descrevendo a divergência das correlações no ponto crítico. Logo podemos eleger  $\chi_{nl}$  como parâmetro de ordem experimental para caracterizar a transição para o estado vítreo.

### 1.4.1 O Modelo de Edwards-Anderson

Com a intenção de tentar reproduzir as propriedades dos vidros de spin, Edwards e Anderson (EA) [9] propuseram um modelo no qual desordem e frustração são introduzidas através de ligações aleatórias em substituição aos sítios aleatórios. O modelo sugere que tomemos  $N$  spins vetoriais clássicos  $\mathbf{S}_i$  (no presente trabalho utilizamos o modelo de Edwards-Anderson porém com spins de Ising), regularmente distribuídos em uma rede e interagindo através da seguinte Hamiltoniana

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j, \quad (1.52)$$

onde a soma em  $\langle ij \rangle$  é efetuada apenas entre primeiros vizinhos. As constantes de acoplamento  $J_{ij}$  são aleatoriamente distribuídas de acordo com uma distribuição de probabilidades

$$P(J_{ij}) = \frac{1}{(2\pi\bar{J}^2)^{1/2}} \exp \left[ -\frac{(J_{ij} - J_0)^2}{2\bar{J}^2} \right], \quad (1.53)$$

onde  $\bar{J}$  é a largura da gaussiana e  $J_0$  o valor médio (geralmente nulo, uma vez que estamos tratando de distribuições simétricas)

$$J_0 = \int_{-\infty}^{\infty} dJ_{ij} J_{ij} P(J_{ij}) = 0. \quad (1.54)$$

Outras distribuições bastante utilizadas (também estudadas neste trabalho) são a uniforme, e a bimodal ( $\pm J$ ) a qual possui

$$P(J_{ij}) = \left(\frac{1}{2}\right)[\delta(J_{ij} - J) + \delta(J_{ij} + J)], \quad (1.55)$$

apesar da preferência em trabalhos analíticos pela distribuição gaussiana. Os efeitos conjuntos da desordem (ligações positivas e negativas, distribuídas aleatoriamente) e frustração, incluídos no modelo de EA, produzem, em baixas temperaturas, uma fase na qual os spins congelam aleatoriamente em qualquer direção.

O problema agora reside em achar um parâmetro de ordem adequado, que descreva a transição para o estado vítreo. No caso de um ferromagneto com spins de Ising temos como parâmetro de ordem a magnetização média por spin, uma vez que a mesma é nula para temperaturas acima da temperatura de transição e diferente de zero abaixo desta. Já no caso de um vidro de spin, isto não é verdade. Diferentemente do caso ferromagnético, onde as constantes de acoplamento favorecem um alinhamento dos spins produzindo uma magnetização resultante na fase ordenada, este modelo de Edwards-Anderson com distribuição de ligações simétricas favorece uma magnetização total nula na ausência de campo externo, pois metade das ligações são ferromagnéticas e a outra metade antiferro.

O efeito de congelamento dos spins pode ser medido em um vidro de spin pela autocorrelação temporal do spin mediado termicamente

$$q_i = \lim_{t \rightarrow \infty} q_i(t) = \lim_{t \rightarrow \infty} \langle S_i(0)S_i(t) \rangle_T. \quad (1.56)$$

Para eliminar a dependência com o sítio, realizamos a média sobre a distribuição de probabilidade  $P(J_{ij})$  de forma que obtemos o parâmetro de ordem de EA

$$q_{EA} = \bar{q}_i = \overline{\langle S_i \rangle_T^2}, \quad (1.57)$$

onde assumimos, de antemão, que o sistema é ergódico, pois estamos considerando

que a média temporal será equivalente à média termodinâmica de equilíbrio no limite  $t \rightarrow \infty$ . No entanto, esta ainda é uma questão em aberto, devido aos longos tempos de relaxação dos estados metaestáveis dos vidros de spin.

Na região paramagnética cada  $\langle S_i \rangle$  anula-se independentemente. Diferentemente, na fase vidro de spin, Edwards-Anderson argumentaram que os termos individuais  $\langle S_i \rangle$  podem ser não nulos, mesmo que o somatório sobre toda a rede seja nulo, implicando assim numa magnetização total nula. Na ausência de campo externo, temos  $q_{EA} = 0$  para  $T > T_g$ ,  $q_{EA} \in (0, 1)$  para  $0 < T < T_g$ , e no limite  $T \rightarrow 0$  temos  $q_{EA} \rightarrow 1$ .

Apesar do modelo de EA reproduzir o cuspide que se observa experimentalmente na susceptibilidade em  $T = T_g$ , o mesmo não consegue explicar a inexistência de singularidade no calor específico, assim como as irreversibilidades que aparecem nos vidros de spin. Veremos, na próxima seção, a solução de campo médio para o modelo de EA.

### 1.4.2 Solução de Campo Médio para o modelo de EA

Sherrington e Kirkpatrick [10] implementaram a solução de campo médio para o modelo de EA através de um modelo com interações de longo alcance. O modelo de Sherrington e Kirkpatrick (assim conhecido) permite um tratamento exato de campo médio ao Hamiltoniano

$$\mathcal{H}_{SK} = - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} S_i S_j - H \sum_i S_i, \quad (1.58)$$

onde a soma em  $\langle ij \rangle$  se estende por todos os pares distintos de spins de Ising e com a distribuição de probabilidade das constantes de acoplamento

$$P(J_{ij}) = \left( \frac{N}{2\pi \bar{J}^2} \right)^{1/2} \exp \left[ -N \left( \frac{J_{ij} - \bar{J}_0}{2\bar{J}^2} \right)^2 \right]. \quad (1.59)$$

Temos então como energia livre para cada configuração dos  $J_{ij}$

$$F\{J_{ij}\} = -kT \ln \mathcal{Z}\{J_{ij}\}, \quad (1.60)$$

a qual possui um valor finito no limite termodinâmico  $N \rightarrow \infty$ , uma vez que temos a média da distribuição dada por  $\frac{J_0}{N}$  e a dispersão  $\frac{J_0}{\sqrt{N}}$ . Para obtermos a média sobre todas as configurações de interações  $\{J_{ij}\}$  calculamos

$$\bar{F} = \int \left( \prod_{\langle ij \rangle} dJ_{ij} P(J_{ij}) \right) F\{J_{ij}\}. \quad (1.61)$$

Esta média sobre a desordem é efetuada através do método das réplicas, o qual sugere introduzir  $n$  cópias idênticas do sistema. Cada réplica é como se tivéssemos um sistema com a mesma configuração  $\{J_{ij}\}$  mas com uma configuração própria de spins  $\{S_i^\alpha\}$ . No espaço das réplicas temos a magnetização e o parâmetro de vidro de spin

$$m^\alpha = \langle S^\alpha \rangle = M \quad (1.62)$$

$$q^{\alpha\beta} = \langle S^\alpha S^\beta \rangle = q \quad (\alpha \neq \beta) \quad (1.63)$$

com  $\alpha, \beta = 1, 2, \dots, n$  e onde utilizamos a hipótese de simetria entre réplicas proposta por Sherrington e Kirkpatrick, a qual propõe uma mesma magnetização para qualquer réplica, e um mesmo parâmetro  $q^{\alpha\beta}$  quaisquer que sejam as réplicas  $\alpha$  e  $\beta$ .

Efetuando os cálculos obtemos

$$q = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{z^2}{2}\right) \operatorname{tgh}^2[\beta\tilde{H}(z)] dz \quad (1.64)$$

e

$$M = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{z^2}{2}\right) \operatorname{tgh}[\beta\tilde{H}(z)] dz, \quad (1.65)$$

onde  $\tilde{H}(z) = \bar{J}q^{1/2} + J_0M + H$ .

O diagrama de fases a campo nulo para o modelo de SK é apresentado na fig.(1-11). Observamos que, quando diminuimos a temperatura no intervalo  $1 \leq J_0/\bar{J} \leq 1.25$ ,

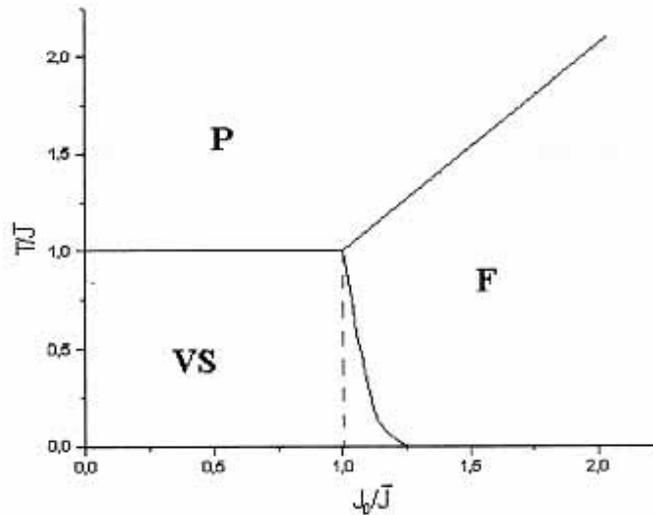


Figure 1-11: Diagrama de fases do modelo SK (com  $H = 0$ ) na solução de simetria entre réplicas. Para  $1 \leq \frac{J_0}{\bar{J}} \leq 1.25$  esta solução apresenta uma reentrância  $P \rightarrow F \rightarrow VS$  quando reduz-se a temperatura. Esta reentrância não existe na solução exata do modelo SK [14]; a fronteira  $F - VS$  correta é uma linha vertical (aparece tracejada no diagrama acima).

o sistema passa da fase paramagnética (P), caracterizada por  $(M = q = 0)$ , para uma fase ferromagnética (F), onde  $(M \neq 0, q \neq 0)$ , e em seguida para uma fase vidro de spin (VS) reentrante  $(M = 0, q \neq 0)$ . Isto implica em uma passagem de um estado mais ordenado F para um estado menos ordenado VS quando  $T \rightarrow 0$ . Este resultado mostra então uma falha no modelo de SK, o qual apresenta de fato uma entropia negativa em baixas temperaturas. De Almeida e Thouless [11] mostraram que a hipótese de simetria de réplicas não é correta e leva a instabilidade da solução de SK abaixo da linha AT. Muitas tentativas de realizar uma quebra de simetria culminaram em energias livres infinitas [12] ou em soluções instáveis [13]. Parisi [14] propôs, com êxito, um esquema, cuja solução é estável abaixo da linha AT (além de estar em boa concordância com os resultados numéricos) e resolveu exatamente o modelo de SK com quebra de simetria entre réplicas, obtendo um diagrama de fases com uma linha vertical separando a fase vidro de spin da fase ferromagnética

e resolvendo então o problema da reentrância da fase VS. Esta quebra de simetria é, no entanto, de natureza diferente da que ocorre em uma transição P-F, na qual abaixo de  $T_c$  a solução de altas temperaturas passa a ficar instável e o sistema então quebra sua simetria, passando a exibir uma ordem para  $T < T_c$ . Acima da linha AT, um único parâmetro de ordem  $q$  é suficiente para descrever o sistema, porém abaixo desta, devemos considerar uma quebra de simetria de permutação entre réplicas (como suposto na eq.(1.63)), de forma que teremos uma matriz  $(q_{\alpha\beta})_{n \times n}$  de parâmetros de ordem. Isso se deve à estrutura complexa do espaço de fases dos vidros de spin em oposição aos sistemas uniformes, sugerindo que o comportamento crítico dos VS pode apresentar algumas características distintas daquelas presentes em sistemas uniformes (p. ex. ferromagnetos).

Apresentaremos no capítulo 2 o método de Monte Carlo utilizado nas nossas simulações, assim como uma breve discussão acerca de números aleatórios (já que são utilizados no método). Em seguida, no capítulo 3, implementaremos o método para simular vidros de spin bidimensionais, apresentando os resultados obtidos. No capítulo 4 estudaremos vidros de spin unidimensionais através de resultados numéricos, comparando-os aos obtidos no capítulo 3. E por fim, no capítulo 5, apresentaremos as conclusões e as perspectivas futuras.

# Bibliography

- [1] H. Kamerlingh Onnes, *Akad. van Wetenschappen (Amsterdam)* **14**, 113, 818 (1911).
- [2] L. Onsager, *Phys. Rev.* **65**, 117 (1994).
- [3] E. A. Guggenheim, *J. Chem. Phys.* **13**, 253 (1945).
- [4] P. Heller e G. B. Benedek, *Phys. Rev. Lett.* **8**, 428 (1962).
- [5] K. G. Wilson e J. Kogut, *Phys. Rep.* **12C**, 75 (1974).
- [6] M. A. Ruderman e C. Kittel, *Phys. Rev.* **96**, 99 (1954); T. Kasuya, *Prog. Theor. Phys* **16**, 45 (1956); K. Yosida, *Phys. Rev.* **106**, 893 (1957).
- [7] H. Malleta e P. Convert, *Phys. Rev. Lett.* **42**, 108 (1979).
- [8] P. Monod e H. Bouchiat, *J. Phys. (Paris) Lett.* **43**, 145 (1982).
- [9] S. F. Edwards e P. W. Anderson, *J. Phys.* **F5**, 965 (1975).
- [10] D. Sherrington e S. Kirkpatrick, *Phys. Rev. Lett.* **35**, 1792 (1975); S. Kirkpatrick e D. Sherrington, *Phys. Rev. B* **17**, 4384 (1978).
- [11] J. R. de Almeida e D. J. Thouless, *J. Phys. A* **11**, 983 (1978).
- [12] A. J. Bray e M. A. Moore, *Phys. Rev. Lett.* **41**, 1068 (1978).
- [13] A. Blandin, *J. Phys. (Paris) Colloq.* **C6-39**, 1499 (1978); A. Blandin, M. Gabay e T. Garel, *J. Phys. C* **13**, 403 (1980).

- [14] G. Parisi, *Phys. Lett. A* **73**, 203 (1979); *Phys. Rev. Lett.* **43**, 1754 (1979); *J. Phys. A* **13**, 1101 (1980); *J. Phys. A* **13**, 1887 (1980).

## Chapter 2

# Método de Monte Carlo

### 2.1 INTRODUÇÃO

Quando vamos abordar cientificamente um dado sistema, é muito frequente nos depararmos com sistemas que possuem um grande número de graus de liberdade, os quais, em geral, são intratáveis analiticamente. Em física não são poucos os sistemas que, mesmo se conhecendo as interações microscópicas relevantes para a caracterização de suas propriedades macroscópicas, não se consegue uma solução exata que nos permita descrever completamente a natureza do estado macroscópico. Tomemos como exemplo o simples modelo de Ising [1], que é utilizado para simular sistemas interagentes de dois estados; em uma dimensão, este possui soluções triviais quando abordado por diferentes técnicas, como por exemplo o método das matrizes de transferência [2], expansões em séries ou grupo de renormalização [3]; em duas dimensões a campo nulo possui uma solução longe de ser trivial, desenvolvida por Onsager [4] depois de passadas quase duas décadas desde que o modelo havia sido proposto em 1925; e em três dimensões, assim como no caso bidimensional na presença de um campo aplicado, o modelo continua sem uma solução exata, mesmo a campo nulo, o que vem a mostrar que, mesmo quando abordados através de modelos bastante simplificados, estes sistemas raramente apresentam uma solução analítica.

Se possuíssemos soluções exatas para estes sistemas, elas nos permitiriam, no caso

de um sistema físico magnético por exemplo, saber como o nosso sistema se comporta na presença de um campo magnético aplicado, ou como sua magnetização e energia variam com a temperatura. Saberíamos também dizer se tal sistema possui uma transição de fase a uma temperatura finita e outras tantas informações. Como na maioria dos casos não as possuímos, resta-nos tentar resolvê-los numericamente. Surgem então as primeiras complicações. A descrição de tais sistemas geralmente envolve o cálculo de integrais multidimensionais. No formalismo da mecânica estatística, estamos sempre interessados no cálculo da função de partição definida por

$$Z(p, \beta, N) = \sum_{\{s\}} \exp[-\beta \mathcal{H}(s, p)], \quad (2.1)$$

onde o somatório em  $s$  significa uma soma sobre todas as possíveis configurações do sistema,  $N$  é o número de constituintes do sistema,  $p$  é um conjunto de parâmetros e  $\beta = (\frac{1}{k_B T})$  com  $T$  sendo a temperatura e  $k_B$  sendo a constante de Boltzmann. Logo, se tomamos como exemplo um gás com  $N$  átomos numa temperatura  $T$  interagindo através de um potencial  $v(r_{ij})$ , teremos que a função de partição clássica para este problema será proporcional a uma integral com dimensão  $3N$

$$Z(v, \beta, N) = (const.) \int \dots \int d^3r_1 \dots d^3r_n \exp[-\beta \sum_{i < j} v(r_{ij})]. \quad (2.2)$$

Mesmo para pequenos valores de  $N$ , a integral acima leva um tempo de máquina absurdo para ser calculada. Se lembrarmos então que em um sistema físico real temos vários elementos que o constituem, logo seria inviável computar o valor desta integral para qualquer objetivo prático.

Surge então a idéia de se calcular a integral não em todos os pontos a rigor, mas "sortear" alguns pontos representativos, onde então a integral seria avaliada. O método de Monte Carlo é uma forma eficiente de se calcular integrais de altas dimensões, fazendo o uso de números aleatórios. Por possuir este caráter aleatório, assim como os números oriundos de roletas, o método recebeu então o nome do famoso cassino de Mônaco. Estamos, então, diante de uma poderosa ferramenta

computacional ( o método de Monte Carlo) que nos permite resolver numericamente modelos antes insolúveis analiticamente, e, então, comparar os resultados do nosso modelo com os dados experimentais do sistema real, obtendo assim, a informação de quão bom fomos em fazer certas aproximações na modelagem do sistema em questão. Por exemplo, se modelamos o nosso sistema físico magnético, levando em consideração apenas interações entre primeiros vizinhos, e o resolvemos através de técnicas de Monte Carlo, poderemos comparar nossos resultados numéricos com os resultados do sistema físico real e saber se tal aproximação é razoável ou se devemos incluir no nosso modelo interações de maior alcance.

É interessante ressaltar que tal método, por fazer uso de números aleatórios, não se restringe apenas a cálculos envolvendo processos estocásticos, onde seria muito natural empregar tais números na solução como foi feito nas primeiras aplicações do método de Monte Carlo em espalhamento e absorção de nêutrons. Tais cálculos são apenas um conjunto dos abordáveis através do método e por já serem estocásticos por natureza são denominados de simulação direta. Na resolução do problema de espalhamento a simulação gera uma amostragem direta dos eventos que acontecem nestes processos. Porém o mesmo problema pode ser resolvido via integração quando consideramos sua solução clássica, que resulta em uma integral multidimensional, o que nos permite desenvolver um método de Monte Carlo adequado para resolvê-la.

Desde 1953, quando Metrópolis et al [5] criaram um algoritmo capaz de gerar números aleatórios com uma dada distribuição de probabilidade, a técnica de Monte Carlo vem sendo amplamente utilizada em várias áreas da ciência, como por exemplo em sistemas biológicos, sistemas econômicos (através da teoria dos jogos) e outros. O método além de auxiliar bastante no desenvolvimento de pesquisas teóricas, também tem um caráter didático de grande valia. O aluno, ao estudar transições de fase e fenômenos críticos, se depara com um volume muito grande de informações que, muitas vezes, não podem ser facilmente assimilados pela complexidade das mesmas. No estudo do modelo de Ising bidimensional, na presença de um campo, sabemos através de resultados de grupo de renormalização que, se melhoramos nossas apro-

ximações, levando em consideração não só as interações de primeiros vizinhos, como também as interações de segundos vizinhos, teremos na vizinhança da criticalidade os expoentes críticos independentemente do número de vizinhos considerados em nosso modelo. Seria, então, interessante observarmos na prática que isto realmente ocorre para que o aluno possa então fixar melhor os conceitos, o que é facilmente conseguido fazendo a simulação Monte Carlo do modelo de Ising bidimensional na aproximação de primeiros vizinhos, obtendo os expoentes críticos, e refazendo-a considerando também os segundos vizinhos, onde novamente obteríamos os expoentes críticos, cujos valores serão idênticos ao do primeiro caso.

Analisaremos, na próxima seção, a utilização do método em uma dimensão, para que possamos ter uma melhor concepção da estratégia básica de Metrópolis.

## 2.2 Ilustração do método em 1D

Apesar do poder computacional do método de Monte Carlo estar no cálculo de integrais multidimensionais, faremos aqui uma pequena análise do que seria a utilização do método em uma dimensão, já que é mais fácil ilustrarmos desta forma. Vamos supor que queremos calcular o valor da seguinte integral

$$I = \int_a^b f(x)dx \quad (2.3)$$

para uma dada função  $f$ . Conhecemos várias fórmulas de quadraturas que fazem o uso de valores específicos de  $x$ , onde nestes pontos o valor de  $f$  são calculados. Os valores de  $x$  nestes casos são em geral igualmente espaçados. Porém uma outra forma de se resolver o mesmo problema é fazer uso da teoria dos números. Vamos escolher  $N$  números aleatórios  $x_i$  uniformemente distribuídos no intervalo  $[a,b]$ , e para cada um deles vamos calcular o valor da função  $f(x_i)$ . A teoria dos números garante que a soma dos valores da função nestes pontos, divididos por  $N$ , convergirá para o valor esperado da função  $f$  no limite  $N \rightarrow \infty$ . Ou seja, à medida que  $N$  se torna muito

grande,

$$\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(x_i) \rightarrow \frac{1}{b-a} \int_a^b f(x) dx, \quad (2.4)$$

Em estatística se diz que o somatório acima é um estimador consistente da integral em questão, já que (dentro de certas condições) ele converge para o valor exato da integral no limite  $N \rightarrow \infty$ . As condições são obviamente sobre o comportamento da função que se quer integrar, uma vez que  $f$  deve ser integrável, finita em todos os pontos e se houver descontinuidades que sejam em número finito dentro do intervalo de integração. Este método de se estimar o valor da eq.(2.3) é conhecido como método de Monte Carlo. À primeira vista, poderíamos pensar que ambas as formas de se calcular a integral acima são equivalentes. Porém quando introduzirmos a função peso, segundo a qual os números aleatórios serão sorteados, além de considerar integrais multidimensionais para as quais o método foi realmente desenvolvido, veremos então a grande vantagem de se usar a quadratura de Monte Carlo.

Para estimar a incerteza associada com esta fórmula de quadratura, consideremos  $f_i=f(x_i)$  como uma variável aleatória e invoquemos o Teorema do Limite Central para grandes valores de  $N$ . Temos então

$$\sigma_I^2 \simeq \frac{1}{N} \sigma_f^2 = \frac{1}{N} \left[ \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f_i^2 - \left( \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f_i \right)^2 \right] \quad (2.5)$$

onde  $\sigma_f^2$  é a variância em  $f$ , ou seja, uma medida de quanto  $f$  desvia do seu valor médio na região de integração.

Ao olharmos para a eq.(2.5) observamos que o erro no cálculo da eq.(2.4) é inversamente proporcional a  $N^{\frac{1}{2}}$ , ou seja, se quisermos diminuir a nossa incerteza por um fator de 2, é necessário quadruplicar o valor de  $N$ . Mais uma vez pode parecer inconveniente a utilização desta técnica para o cálculo de integrais, uma vez que outros métodos dão uma incerteza, que depende mais fortemente do valor de  $N$ , como por exemplo, o método dos trapézios que nos fornece uma dependencia da incerteza com o inverso de  $N^2$ , ou seja, se por este método quisermos diminuir a incerteza pela metade, basta aumentarmos  $N$  em aproximadamente 40% do seu valor. Porém,

esta aparente vantagem desaparece no caso multidimensional, como veremos a seguir. Outra coisa que notamos na eq.(2.5) é que, quanto mais suave for a função  $f$ , menor será  $\sigma_f$  implicando numa maior precisão no cálculo da quadratura de Monte Carlo. Se  $f$  fosse uma constante, teríamos um limite ideal, pois a precisão seria máxima. O problema surge quando vamos avaliar a integral de uma função, que tem por exemplo um pico acentuado em torno de um certo valor  $x$  e que é nula fora do pico. Uma vez que os  $x_i$  são sorteados aleatoriamente no intervalo  $[a,b]$ , com uma mesma probabilidade, o que provavelmente ocorrerá é que estaremos calculando o valor dos  $f_i$  em pontos que não contribuem com algum valor para a integral, já que possuem imagem nula e estaremos pegando apenas alguns pontos  $x_i$ , onde os  $f_i$  contribuem realmente para o cálculo da integral. Então, teremos uma incerteza muito grande no cálculo de  $I$  nestes casos.

Para resolver esse problema, introduz-se a função peso ( $w$ ) com as seguintes características:

- $w(x)$  deve ser positivamente definida e normalizada no intervalo de integração

$$\int_0^1 w(x)dx = 1. \quad (2.6)$$

- o resultado da sua integral  $y(x)$  deve ser conhecido analiticamente, devendo ser uma integral monoticamente crescente em função de  $x$ , de zero a um.
- devemos poder inverter  $y(x)$  (resolver para  $x$ ), ou alternativamente, gerar os números aleatórios de acordo com  $w$ .
- a razão  $\frac{I}{w}$  deve ser o mais suave possível, de forma que a sua variância deverá ser menor que a de  $f$ .

Então, multiplicamos e dividimos o integrando da eq.(2.3) pela função peso obtendo

$$I = \int_0^1 w(x) \frac{f(x)}{w(x)} dx. \quad (2.7)$$

Podemos agora fazer uma mudança de variável de  $x$  para

$$y(x) = \int_0^x w(x') dx' \quad (2.8)$$

de forma que

$$\frac{dy}{dx} = w(x); \quad y(x=0) = 0; \quad y(x=1) = 1, \quad (2.9)$$

e a integral se torna

$$I = \int_0^1 \frac{f(x(y))}{w(x(y))} dy. \quad (2.10)$$

Antes gerávamos números aleatórios uniformemente distribuídos em  $x$  e calculávamos o valor de  $f$  naquele ponto. Porém, com a introdução da função peso e com a devida mudança de variáveis, o que fazemos é tomar uma amostra aleatória dos números uniformemente distribuídos em  $y$  e calculamos o valor médio de  $\frac{f}{w}$  no intervalo  $[0,1]$ , ou seja, obtemos

$$I \simeq \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{f(x(y_i))}{w(x(y_i))}. \quad (2.11)$$

Eis então apresentada a grande vantagem do método. Não mais estaremos perdendo tempo de máquina, calculando os valores de  $f$  em todos os pontos  $x_i$  uniformemente distribuídos no intervalo considerado, pois provavelmente muitos deles nada acrescentarão ao cálculo da integral em questão, mas estaríamos agora elegendo prioridades para os mesmos através da função peso, o que vem a economizar o tempo gasto na resolução do problema, além de diminuir também o erro associado (como veremos a seguir) no caso de integrais multidimensionais. Para que isto fique entendido, basta observarmos que, ao realizarmos uma mudança de variáveis, a fim de que a distribuição uniforme ocorra em  $y$ , implica que a distribuição em  $x$  obedece a  $\frac{dy}{dx} = w(x)$ , o que mostra que os pontos estão concentrados nos valores mais importantes de  $x$ , onde  $w$  e  $f$  dão contribuições relevantes.

Quando estendemos a idéia do cálculo de integrais via método de Monte Carlo para dimensões superiores, deparamo-nos com a difícil tarefa (quando não impossível) de inverter a eq.(2.8), a fim de obtermos  $\mathbf{x}(y)$  explicitamente. Na verdade, a classe de

funções, que são integráveis e cujas integrais podem ser invertidas analiticamente, é pequena: essencialmente, são as funções trigonométricas, exponenciais, e polinomiais de baixa ordem ou combinações dessas; então, o que se faz é distribuir os pontos  $x_i(y_i)$  com distribuição  $w$ . O algoritmo de Metrópolis, que será apresentado adiante, é bastante utilizado, quando necessitamos gerar variáveis distribuídas de acordo com uma certa distribuição de probabilidade  $W(s_1, \dots, s_N)$ ,  $s_i \in M$ .

Façamos uma análise da extensão do método para o cálculo de integrais multi-dimensionais com o propósito de observar a real vantagem do mesmo. Vamos supor que gostaríamos de calcular a eq.(2.2)  $N$  vezes e comparar a precisão do método de Monte Carlo com a precisão do método dos trapézios. Enquanto o primeiro nos fornece um erro que decresce com  $N^{-\frac{1}{2}}$ , independente da dimensão  $d$  da integral, o segundo nos sugere o seguinte: se tivermos  $N$  pontos, logo cada dimensão de uma dada integral  $d$ -dimensional será quebrada em aproximadamente  $N^{\frac{1}{d}}$  intervalos de tamanho  $h \sim N^{-\frac{1}{d}}$ . Como o erro no cálculo de uma integral destas numa célula de volume  $h^d$  na região de integração é  $O(h^{d+2})$ , então o erro total dado pelo método convencional será

$$NO(h^{d+2}) = O(N^{-\frac{2}{d}}), \quad (2.12)$$

donde podemos observar que este tipo de quadratura nos fornece uma precisão maior ou igual até  $d = 4$ . Comparando o método de Monte Carlo com outros métodos, como pode ser visto na tabela abaixo [6], vemos que existe sempre uma dimensão  $d$ , acima da qual, a convergência do método de Monte Carlo é mais rápida que a dos outros métodos de quadratura fixa. Já vimos que, comparado ao método dos trapézios, acima de  $d = 4$ , a convergência MC é mais rápida, o que para o método de Simpson só é verdade para  $d = 8$ .

$\sigma(n)$	1d	dimensão d
Monte Carlo	$n^{-\frac{1}{2}}$	$n^{-\frac{1}{2}}$
Trapézios	$n^{-2}$	$n^{-\frac{2}{d}}$
Simpson	$n^{-4}$	$n^{-\frac{4}{d}}$
Gauss	$n^{-2m+1}$	$n^{-\frac{(2m+1)}{d}}$

Vejamos a seguir algumas sutilezas acerca de números aleatórios.

## 2.3 Números Aleatórios

Somos obrigados, antes de prosseguirmos com a implementação do método de Monte Carlo, a fazer alguns comentários acerca de números aleatórios, uma vez que os mesmos são a base da técnica em questão. A primeira pergunta que surge é: o que especifica o caráter aleatório de uma variável? Em princípio, um número aleatório é simplesmente algum valor particular assumido por uma variável aleatória. Porém, nos cálculos de Monte Carlo, geralmente utilizamos o termo aleatório com um significado diferente. Empregamos o termo aplicado a sequências de números que, uma vez tendo sido determinadas, não são realmente aleatórias no sentido estatístico, porém tem propriedades similares às de uma sequência inteiramente aleatória. Para que a diferença fique clara, chamemos os números que iremos utilizar no método de pseudo-aleatórios.

Uma sequência de números aleatórios é impossível de se gerar num computador. Tal sequência só pode ser gerada através de um processo físico aleatório que a determine, como por exemplo um decaimento radioativo, ruídos em circuitos eletrônicos, frequência de chegada de raios cósmicos e outros. Se utilizássemos tais números para resolver o nosso problema do cálculo de integrais, logo não existiria problema, do ponto de vista teórico, uma vez que o processo que os gera não possui falhas. Na prática o que ocorre é que tais dispositivos para geração de números aleatórios são muito lentos, visto que precisamos de centenas de números ponto-flutuantes por segundo ao mesmo tempo. Devido a este problema, muito poucos cálculos usando números aleatórios gerados por processos físicos reais foram feitos. Uma das poucas tentativas de se usar sistemas físicos foi feita por Frigerio e Clark [7], e Frigerio et al [8]. Eles usaram uma fonte radioativa de partículas alfa e um contador de alta resolução. O que eles faziam era contar num certo intervalo de tempo quantos decaimentos radioativos ocorriam, se tal número fosse ímpar então era atribuído o valor zero a uma dada variável  $\lambda$ , caso contrário, então o valor um seria atribuído, gerando

desta forma uma sequência de números aleatórios.

Os números aleatórios geralmente utilizados nos cálculos reais são conhecidos como pseudo aleatórios, por serem gerados por fórmulas matemáticas, podendo ser desta forma reproduzidos. Apesar de a rigor não terem o caráter aleatório no sentido estatístico do termo, não se consegue distinguí-los de uma sequência realmente aleatória. Ou seja, uma pessoa que não conheça a fórmula que os gerou, será incapaz de afirmar que os mesmos não advém de um processo físico. Os primeiros números pseudo-aleatórios gerados foram através da fórmula de Von Neumann conhecida como *mid-squares*. A receita é pegar um número de  $r$  dígitos e tomar a primeira metade dos dígitos, obtendo assim o primeiro número aleatório. Agora eleva-se este número ao quadrado e novamente pegamos a primeira metade  $r/2$  dos dígitos, obtendo o segundo número aleatório. Repetindo o processo várias vezes, teremos uma sequência de números pseudo-aleatórios. Este método apesar de ter sido um dos pioneiros não é mais utilizado hoje, uma vez que a sua capacidade de gerar números sem repetição não é tão grande, pois, por este método, se um dado número reaparecer, logo a sequência inteira reaparecerá. Por ser simples, o método de Von Neumann parece, à primeira vista, não ser tão bom por não possuir uma forma mais complicada de gerar os números. Porém, vemos que isto não é verdade, quando analisamos os resultados de Knuth [9], que utiliza um super-gerador de números aleatórios, usando fórmulas complicadíssimas, as quais são impossíveis de se obter por especulação, para gerar a sequência de números e, nem por isso, eles são tão bons. A regra geral no uso de geradores é utilizar aqueles com propriedades mais simples, pois, tentar complicá-los, não traz nenhuma vantagem na maioria das vezes, ou, o que é pior, reduz algumas vezes os seus períodos. Os geradores mais usados hoje, na maioria das simulações, são os que fazem uso da seguinte rotina idealizada por Lehmer e conhecida como *linear congruential*. Partimos de um número (semente), multiplicamos o mesmo por um número mágico e somamos a um outro número mágico, onde depois é tomado o módulo de um terceiro número mágico, resultando na seguinte sequência

$$x_{i+1} = (ax_i + c) \bmod m, \quad (2.13)$$

onde  $a$ ,  $c$  e  $m$  são os números mágicos.

Durante muito tempo estes geradores de números pseudo-aleatórios foram questionados, vários testes foram realizados para ver se os números assim gerados poderiam ser realmente utilizados nos cálculos, aos quais se propunham, e muito foi feito para se obter sequências com períodos cada vez maiores. Vários autores insistiram em provar que sempre poderiam encontrar a fórmula geradora de uma dada sequência. Porém, apesar de isto ser realmente possível, o que nos interessa saber é se os números gerados por estas fórmulas resolvem o nosso problema em questão, ou seja, sejamos práticos, aplicando a sequência ao problema e analisando o resultado, se for razoável, então que seja usada. Utilizamos nas primeiras simulações os geradores disponíveis nas nossas máquinas, que fazem uso de uma sequência como a da eq.(2.13). Porém, depois de tomarmos conhecimento do gerador proposto por Kirkpatrick [10], optamos por usá-lo, pois ele, além de minimizar os erros, reduz também o tempo de simulação.

### 2.3.1 Gerando números com uma dada distribuição

Apesar de termos feito comentários apenas sobre números aleatórios uniformemente distribuídos num certo intervalo, podemos também desejar obter outras sequências de números aleatórios distribuídos de acordo com uma dada distribuição de probabilidade. Um grande número de truques, transformações e fórmulas, para se gerar números aleatórios de acordo com diferentes distribuições de probabilidade, é conhecido. Por exemplo, dadas duas distribuições uniformes distintas, a soma das duas dará uma nova distribuição que, neste caso, é triangular. Para obter mais informações sobre diferentes técnicas de geração de números aleatórios, de acordo com uma dada função, sugerimos ao leitor o trabalho de Everett e Cashwell [11]. Nas nossas simulações fizemos uso de três diferentes tipos de distribuição de probabilidade: a distribuição uniforme, a distribuição bimodal e a distribuição gaussiana. A primeira, muito fácil de ser gerada, pois bastava chamarmos a função geradora de números aleatórios, foi usada para gerar as constantes de acoplamento entre spins distribuídas uniformemente. A segunda foi utilizada tanto para gerar as constantes de acoplamento

distribuídas bimodalmente, como também foi usada para gerar as configurações do sistema em altas temperaturas, permitindo aos spins terem valores  $-1, +1$  com uma mesma probabilidade. Para gerá-la bastava chamar a função que gerava um número aleatório uniformemente distribuído no intervalo dado e observar se este número era maior que a metade do intervalo; se fosse, então atribuíamos o valor 1 a variável, caso contrário atribuíamos  $-1$ . Por último a distribuição gaussiana, que também fez parte do nosso estudo, merece uma atenção especial no seu processo de geração. Por ser uma forma de distribuição das mais usadas em cálculos estatísticos e físicos, várias técnicas surgiram para gerar números aleatórios distribuídos gaussianamente. Em particular, utilizamos o método, que se baseia no teorema do limite central, e que nos garante que a soma de números aleatórios uniformemente distribuídos em um certo intervalo converge para a distribuição gaussiana no limite de muitos números.

Citamos anteriormente que a soma de dois números aleatórios uniformemente distribuídos nos dava um terceiro distribuído de acordo com uma distribuição triangular; se continuamos a somar mais números distribuídos uniformemente, a partir da soma de seis desses números, é praticamente impossível de se distinguir a distribuição resultante da distribuição gaussiana [6]. Como o valor esperado da distribuição uniforme no intervalo  $[0,1]$  é  $0.5$ , e a variância  $\frac{1}{12}$ , temos pela definição de valor esperado e variância

$$E(R_n) = \frac{n}{2}; V(R_n) = \frac{n}{12}. \quad (2.14)$$

Normalmente, queremos uma distribuição Gaussiana padrão, ou seja, com média zero e variância um. Então usamos

$$\frac{R_n - \frac{n}{2}}{\frac{n}{12}} \rightarrow R \in [0, 1], \quad (2.15)$$

que se reduz a  $R_{12} - 6$ , quando efetuamos a soma entre doze números como foi o caso.

## 2.4 O Algoritmo de Metrópolis

Façamos agora uma análise do método de Monte Carlo voltado exclusivamente ao caso da Mecânica Estatística. Vamos tomar um sistema com  $N$  variáveis  $s_i$ , onde cada variável pode assumir um certo valor no conjunto  $M$ . No nosso caso, por exemplo, tratamos do modelo de Ising, onde  $s_i$  representa o valor da variável de spin do sítio  $i$  e  $M = \{-1, 1\}$ . Seja  $O(s_1, s_2, \dots, s_N)$  uma observável, da qual gostaríamos de calcular o valor médio

$$\langle O \rangle = \left( \sum_{s_1, \dots, s_N} O(s_1, \dots, s_N) W(s_1, \dots, s_N) \right) \left( \sum_{s_1, \dots, s_N} W(s_1, \dots, s_N) \right)^{-1}, \quad (2.16)$$

onde  $W(s_1, s_2, \dots, s_N)$  é a probabilidade que a variável de spin 1 assuma o valor  $s_1$ , a variável 2 assuma o valor  $s_2$  e assim em diante. A conexão com a Mecânica Estatística vem através da função de partição identificada como o denominador da eq.(2.16). Se escolhermos  $W(s_1, \dots, s_N)$  como sendo a função de distribuição de Boltzmann, teremos

$$\langle O \rangle = \left( \sum_{s_1, \dots, s_N} O(s_1, \dots, s_N) \exp[-\beta E(s_1, \dots, s_2)] \right) \left( \sum_{s_1, \dots, s_N} \exp[-\beta E(s_1, \dots, s_2)] \right)^{-1}. \quad (2.17)$$

Neste momento, fica claro o motivo de termos feito previamente uma discussão acerca da utilidade da função peso. Se vamos calcular numericamente a eq.(2.17), utilizando o procedimento de Monte Carlo, então a primeira coisa que deveríamos fazer era aproximarmos a soma sobre todos os pontos do espaço de fase (que implicaria numa tarefa impossível) por apenas alguns pontos escolhidos aleatoriamente, assim como discutido anteriormente. Porém, devido ao fator de Boltzmann, a distribuição de probabilidade tem um máximo acentuado na região do espaço de fase, onde as quantidades extensivas tem os seus valores próximos ao valor médio  $\langle O \rangle$ , com este pico dado aproximadamente por uma gaussiana com meia largura da ordem de  $N^{-\frac{1}{2}}$ . Logo, se fossemos aplicar o método sem a preocupação de escolhermos uma amostragem representativa onde a nossa soma seria calculada, o que iria ocorrer era que teríamos uma convergência extremamente lenta para o valor real, que terminaria por nos levar a interromper o processo antes de termos encontrado um resultado razoável. O que

tem que ser feito é sortear os pontos dentro da importante região do espaço de fase, ou seja nas proximidades do pico da função de distribuição. A questão agora é: como construir um *ensemble* que corresponda a uma dada distribuição de probabilidade? E mais: como gerar estados suficientes do *ensemble*, a fim de podermos calcular uma dada observável com a precisão desejada? Já vimos que nem todos os estados são igualmente importantes no cálculo de médias, a função  $W(a)$  nos dá o peso do estado  $a$ .

O algoritmo de Metrópolis [5] é uma receita de como se alcançar um desejado *ensemble* partindo de um qualquer. O que ele faz é repor estados dados por novos, levando em consideração o seu peso estatístico, de forma que no limite de grandes reposições teremos a correta distribuição de probabilidade. Este algoritmo, assim como outros do gênero, tem a vantagem de nos conduzir sempre ao *ensemble* de equilíbrio independentemente de onde tenhamos partido, além de nos manter neste *ensemble* (uma vez alcançado). Veremos que a distribuição desejada é um ponto fixo do algoritmo a seguir, onde faremos alguns comentários sobre processos Markovianos.

### 2.4.1 Processos Markovianos

Um processo Markoviano é definido por uma probabilidade de evolução  $P(b \leftarrow a)$  (onde a probabilidade de se alcançar  $b$  partindo de  $a$  é dada por  $P(b \leftarrow a)$  e não depende de passos prévios apenas depende do precedente), que gera um *ensemble*  $[b]_Q$  a partir de  $[a]_Q$ . Ou seja, quando aplicamos  $P$  a cada membro do *ensemble*  $[a]_Q$ , ele gera  $[b]_Q$ . Vamos agrupar todos os estados do *ensemble*  $[a]_Q$  em um vetor  $Q(a)$ . Podemos então pensar  $P(b \leftarrow a)$  como sendo uma matriz, que atuando no vetor  $Q(a)$ , resulta em  $Q'(b)$

$$Q'(b) = \sum_a P(b \leftarrow a)Q(a). \quad (2.18)$$

Para que fique mais claro, tomemos como exemplo um sistema biológico, onde partiremos de um estado inicial com mesma probabilidade de uma célula estar viva ou morta  $Q_0 = (0.5, 0.5)$ . Denominamos de morta a célula ressecada (desidratada), porém com uma probabilidade de regeneração. Vamos supor que tenhamos para este

dados sistema a seguinte matriz de evolução [12]

$$P = \begin{pmatrix} 0.6 & 0.4 \\ 0.3 & 0.7 \end{pmatrix}, \quad (2.19)$$

que significa que se a célula estiver viva, ela terá após um dia 60% de chance de permanecer viva, ou se estiver morta terá 70% de probabilidade de permanecer morta. Pois bem, calculemos o estado do sistema após a aplicação de  $P$ ,  $Q_1 = Q_0P = (0.45, 0.55)$ , o que mostra que, após um dia, a célula tem uma maior probabilidade de estar morta. Poderemos repetir o processo para um segundo dia, de forma que obteremos

$$Q_2 = Q_1P = Q_0PP = Q_0P^2 = (0.435, 0.565), \quad (2.20)$$

ou seja uma probabilidade ainda maior de a célula ser encontrada morta. Repetidas aplicações de  $P$  nos levam à distribuição de equilíbrio  $W = Q_{eq} = (0.4286, 0.5714)$ . O que nós desejamos do nosso algoritmo é que, uma vez atingida a distribuição de equilíbrio, repetidas aplicações de  $P$  nos gerem o mesmo *ensemble*, se isto for verdade, independente de  $Q_0$ , devemos ter  $P$  satisfazendo a seguinte equação

$$\lim_{n \rightarrow \infty} P^n Q_0 = W. \quad (2.21)$$

Definimos um ponto fixo de  $P$  como sendo o valor de  $Q$ , para o qual  $Q'$  na eq.(2.18) coincide com  $Q$ . Uma condição necessária a ser satisfeita pela eq.(2.21) é que  $W$  seja um ponto fixo de  $P$ , o que nos leva a escolher  $P$  de forma que

$$PW = W. \quad (2.22)$$

Temos ainda que garantir não só que  $W$  seja um ponto fixo de  $P$ , mas também que seja o único, pois se não existiria mais de uma solução para o nosso problema. A fim de garantir que isto ocorra, temos que impor algumas condições:

- Devemos ter a conservação de probabilidade

$$\sum_b P(b \leftarrow a) = 1, \quad (2.23)$$

pois, qualquer estado  $b$  deve ser alcançado por um precedente.

- Devemos também exigir que

$$P(b \leftarrow a) > 0, \quad (2.24)$$

que é chamada de condição forte de ergodicidade, uma vez que nos garante que existe sempre uma probabilidade diferente de zero de partirmos de uma configuração inicial e alcançarmos uma configuração final, através de um passo de Markov. Se esta condição não fosse satisfeita, poderíamos ter na matriz  $P$  da eq.(2.19) uma coluna nula por exemplo, e isto nos levaria, após aplicar  $P$  ao vetor inicial, a um estado, donde o sistema não poderia evoluir, mesmo após sucessivas aplicações, implicando em estados absorvedouros, proibidos a princípio.

- E por último

$$\sum_a Q(a) = 1, \quad (2.25)$$

pois em qualquer passo da evolução o sistema deverá estar em um dos estados permitidos.

Chamaremos de processo Markoviano um processo cuja probabilidade de evolução obedece aos vínculos acima. Geralmente  $P$  é escolhida de forma a satisfazer uma outra condição, que, apesar de ser suficiente para que  $P$  tenha as propriedades desejadas, não é necessária. A condição é a do balanceamento detalhado

$$P(b \leftarrow a)W(a) = P(a \leftarrow b)W(b), \quad (2.26)$$

que é satisfeita pelo algoritmo de Metrópolis. O que esta condição nos garante é que o sistema é reversível microscopicamente. Fica agora trivial mostrar que, se estas condições forem satisfeitas, teremos  $W$  sendo autovetor de  $P$  com autovalor unitário. Basta somarmos a eq.(2.26) em  $a$  e depois usarmos a condição de normalização, implicando em

$$\sum_a P(b \leftarrow a)W(a) = \sum_a P(a \leftarrow b)W(b) = W(b). \quad (2.27)$$

Existe um teorema devido a Perron [13] (está demonstrado na ref.[14]), que nos garante que este autovalor de  $P$  é único e excede em módulo qualquer outro autovalor. Ou seja, qualquer outro autovalor de  $P$ , cujo autovetor não seja o de equilíbrio, terá módulo menor que um (uma vez normalizados); logo, partindo de  $Q_0$  e aplicando  $P$  sucessivas vezes, anularemos todos os autovetores até que  $Q_0$  começa a se superpor com o *ensemble* de equilíbrio  $W$  e repetidas aplicações preservarão apenas  $W$ .

## 2.4.2 O Algoritmo

Após toda esta discussão em torno do método de Monte Carlo, chegamos à receita desenvolvida por Metrópolis et al. O que se quer é obter um conjunto de pontos  $a$ , em um espaço multidimensional, distribuídos com densidade de probabilidade  $W(a)$ . O algoritmo de Metrópolis gera uma sequência de pontos  $a_0, a_1, \dots, a_N$ , como uma sequência visitada por uma caminhada aleatória no espaço  $a$ , e a medida em que a caminhada se torna maior, os pontos visitados são mais próximos da distribuição desejada. A regra para a caminhada é a seguinte: partimos de um ponto qualquer  $a_n$  no espaço de configuração. Para obtermos o ponto seguinte  $a_{n+1}$ , deveremos passar por uma etapa intermediária para um ponto  $a_t$ . Este ponto pode ser escolhido ao acaso dentro de uma vizinhança  $\delta$  em torno de  $a_n$ . O ponto será aceito ou rejeitado, de acordo com a taxa

$$r = \frac{W(a_t)}{W(a_n)}. \quad (2.28)$$

Se  $r$  for maior que um, logo o passo intermediário será aceito e teremos  $a_{n+1} = a_t$ . Porém, se  $r$  for menor que um, então o passo intermediário será aceito com probabilidade  $r$ . O que se faz na prática é sortear aleatoriamente um número uniformemente distribuído no intervalo  $[0,1]$ , e o comparamos com  $r$ : se ele for menor que  $r$ , então o passo será ainda aceito e teremos  $a_{n+1} = a_t$ , e, se não for, teremos  $a_{n+1} = a_n$ . É importante ressaltar que qualquer ponto  $a_0$  pode ser escolhido para começarmos a caminhada aleatória, pois vimos que o algoritmo deve convergir para o equilíbrio independentemente do estado inicial.

Para provarmos que este algoritmo nos leva a uma sequência de pontos distribuídos de acordo com  $W$ , vamos considerar um grande número de "passistas aleatórios", começando de diferentes pontos de partida, e caminhando independentemente pelo espaço  $a$ . Se  $N_n(a)$  é a densidade de passistas em  $a$  depois de  $n$  passos, então teremos um número resultante de passistas se movendo de  $a$  para  $b$  no próximo passo dado por

$$\begin{aligned} \Delta N(a) &= N_n(a)P(a \rightarrow b) - N_n(b)P(b \rightarrow a) \\ &= N_n(b)P(a \rightarrow b) \left[ \frac{N_n(a)}{N_n(b)} - \frac{P(b \rightarrow a)}{P(a \rightarrow b)} \right]. \end{aligned} \quad (2.29)$$

Quando o equilíbrio é atingido, não teremos uma variação do número resultante em um dado ponto  $a$ , ou seja,

$$\frac{N_n(a)}{N_n(b)} = \frac{N_e(a)}{N_e(b)} = \frac{P(b \rightarrow a)}{P(a \rightarrow b)},$$

e, antes de atingi-lo, as variações em  $N_n(a)$  conduzirão ao equilíbrio; logo, se  $\frac{N_n(a)}{N_n(b)}$  for maior do que o seu valor de equilíbrio, teremos  $\Delta N$  positivo. É, então, bastante plausível esperar que, após um grande número de passos, a população de passistas atingirá o seu valor de equilíbrio  $N_e$ . Falta mostrar que a probabilidade de transição do algoritmo de Metrópolis leva a distribuição de equilíbrio  $N_e(a) \sim W(a)$ . A proba-

bilidade total de se dar um passo de um ponto  $a$  para um ponto  $b$  é dada por

$$P(a \rightarrow b) = T(a \rightarrow b)A(a \rightarrow b), \quad (2.30)$$

onde  $T$  representa a probabilidade de se dar um passo intermediário de  $a$  para  $b$ , e  $A$ , a probabilidade de se aceitar o passo. Se pudermos atingir  $b$ , partindo de  $a$  em um único passo, o que implica em dizer que  $b$  pertence a vizinhança de  $a$ , então teremos

$$T(a \rightarrow b) = T(b \rightarrow a), \quad (2.31)$$

de forma que a distribuição de equilíbrio do algoritmo satisfaz

$$\frac{N_e(a)}{N_e(b)} = \frac{A(b \rightarrow a)}{A(a \rightarrow b)}. \quad (2.32)$$

Se  $W(a) > W(b)$ , logo a probabilidade de se aceitar o passo, partindo de  $b$  para  $a$ , é um, ou seja  $A(b \rightarrow a) = 1$  e teremos

$$A(a \rightarrow b) = \frac{W(b)}{W(a)}, \quad (2.33)$$

enquanto que se  $W(a) < W(b)$  pela definição do algoritmo,, teremos

$$A(b \rightarrow a) = \frac{W(a)}{W(b)}, \quad (2.34)$$

e  $A(a \rightarrow b) = 1$ . Em ambos os casos, temos a população de equilíbrio do algoritmo de Metrópolis, satisfazendo

$$\frac{N_e(a)}{N_e(b)} = \frac{W(a)}{W(b)}, \quad (2.35)$$

o que nos garante que a distribuição alcançada é a desejada. Observemos que, apesar de termos escolhido o passo intermediário  $a_t$  na vizinhança de  $a_n$ , poderíamos ter escolhido quaisquer transições e regras de aceitação que satisfizessem

$$\frac{W(a)}{W(b)} = \frac{T(b \rightarrow a)A(b \rightarrow a)}{T(a \rightarrow b)A(a \rightarrow b)}. \quad (2.36)$$

A questão toda é saber como escolher o tamanho  $\delta$  do passo intermediário, a fim de otimizar o algoritmo. Suponha-se que tenhamos  $a_n$  no máximo de  $W$ , ou seja, no lugar mais esperado de se estar. Se escolhermos  $\delta$  grande, logo a maioria dos passos intermediários serão rejeitados, já que  $W(a_t)$  seria bem menor que  $W(a_n)$ , levando a uma amostra insuficiente de  $W$ . Se  $\delta$  for muito pequeno, vários passos intermediários serão aceitos, porém o passista jamais se afastará muito do ponto de partida, acarretando no mesmo problema. Uma boa regra é tomar o tamanho do passo de forma que metade dos passos intermediários sejam aceitos.

Um cuidado que temos que ter, ao aplicar o algoritmo de Metrópolis a fim de simular uma distribuição, é que os pontos  $a_0, a_1, \dots, a_N$ , gerados por ele, não são independentes um do outro, isto é muito simples de se observar, pois, da forma que foram gerados, os  $a_t$  preferem estar sempre na vizinhança de  $a_n$ . Logo, apesar de estarem distribuídos com a distribuição de equilíbrio desejada após várias interações, os pontos não são independentes, o que implica num cuidado adicional no seu uso para calcular integrais, visto que a eq.(2.5), que nos dá a variância do nosso método, só é válida se os pontos forem estatisticamente independentes. Para diminuir este problema, o que se faz é esperar algumas interações, de forma que os pontos escolhidos, separados por um certo intervalo, sejam totalmente descorrelacionados. Vamos, neste momento, implementar o algoritmo para simular um modelo de Ising bidimensional.

### 2.4.3 Modelo de Ising 2D

Queremos obter as propriedades termodinâmicas de um dado modelo, fazendo uso do método de Monte Carlo. Como o sistema que utilizamos neste trabalho pode ser obtido através de modificações no modelo de Ising bidimensional, então implementaremos o método para o modelo Ising-2D e, no próximo capítulo, discutiremos as mudanças necessárias. A primeira coisa é identificar o Hamiltoniano do modelo, que neste caso é dado por

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j - H \sum_i S_i. \quad (2.37)$$

Este modelo consiste de um conjunto de spins distribuídos numa rede quadrada, que interagem entre si através de uma constante de acoplamento  $J$ , apenas entre primeiros vizinhos, assim como com um campo magnético  $H$ . Para eliminarmos os efeitos de superfície, utilizamos condições de contorno periódicas. O conjunto de valores permitidos à variável de spin é ( $S_i = -1, +1$ ). Pois bem, uma vez definido o modelo temos agora que ver como simulá-lo através do algoritmo de Metrópolis.

O primeiro passo é gerar uma rede bidimensional, onde cada sítio da rede pode ter valores  $\pm 1$  com mesma probabilidade. Esta configuração corresponde à descrição do sistema em altas temperaturas, ou seja na região paramagnética, que pode ser considerada uma boa configuração de partida para aplicarmos o algoritmo [15]. Temos agora que seguir a receita do algoritmo

$$P(a \rightarrow b) = 1, \Delta E < 0 \quad (2.38a)$$

$$P(a \rightarrow b) = \frac{w(b)}{w(a)}, \Delta E \geq 0. \quad (2.38b)$$

Vamos tomar os estados  $a$  e  $b$ , diferindo apenas pela inversão de um spin, ou seja  $a = (s_1, s_2, \dots, s_N)$  e  $b = (-s_1, s_2, \dots, s_N)$ . O que fazemos é escolher um dado spin e tentar invertê-lo. Calculamos, primeiramente, a energia do sistema na configuração  $a$ ,  $E(a)$ , e depois a energia na configuração  $b$ ,  $E(b)$  utilizando a eq.(2.37). Se  $E(b) < E(a)$ , logo a nova configuração do nosso sistema será a configuração  $b$  e partiremos então para o segundo spin. Porém, ainda que a energia da configuração  $b$  não seja menor, calculemos a probabilidade do sistema encontrar-se neste estado

$$w(b) = Z^{-1} \exp[-\beta E(b)] \quad (2.39)$$

e a dividimos pela probabilidade do sistema encontrar-se na configuração  $a$ , determinando o fator  $r = \exp[-\beta \Delta E]$ , que nos dá a probabilidade do sistema sair da configuração  $a$  para  $b$ . Para isto sorteamos um número aleatório  $\gamma$  uniformemente distribuído no intervalo  $[0,1]$ , e se  $\gamma < r$ , logo a nova configuração  $b$  será aceita; caso contrário o sistema permanece com a configuração  $a$  e o algoritmo prossegue tentando

a inversão do segundo spin. Na prática o valor de  $r$  é calculado pela fórmula

$$r = \exp[-2S_i(J \sum_{l=1}^4 s_l + H)], \quad (2.40)$$

já que o resto da rede permanece inalterado, contribuindo apenas com um fator constante para a energia. Isto se repete até varrer toda a rede, fazendo a atualização dos spins. A nossa escala de tempo é o MCS/spin, que é o tempo gasto para se percorrer toda a rede, atualizando os spins. Observemos que poderíamos ter tentado inverter mais de um spin no passo intermediário do algoritmo, porém quanto mais spins tentarmos inverter de uma só vez, maior será a probabilidade de rejeição do novo estado, implicando numa amostragem insuficiente.

Agora só nos restam questões técnicas, como por exemplo, quantas vezes devemos varrer a rede até que encontremos o *ensemble* assintótico? Ou ainda, após atingido o ensemble de equilíbrio, quantas varreduras são necessárias para descorrelacionar as medidas? Estas questões não possuem soluções definidas, o que temos então que fazer é ir para prática e analisar os dados obtidos de forma a tentar resolvê-las. A solução da primeira questão surge naturalmente na prática. O que temos que fazer é simplesmente fazer medidas da observável em questão (no nosso caso a magnetização), e ir computando a diferença entre estas medidas em sucessivas varreduras, até que esta diferença atinja um valor mínimo que nós estabeleceremos. Uma vez atingido este valor, tomaremos o valor  $n_0$  de varreduras como o valor mínimo necessário para se alcançar o ensemble assintótico. A outra questão porém tem uma análise mais delicada. Após alcançarmos o *ensemble* de equilíbrio, ou seja, depois de termos realizado  $n_0$  varreduras no sistema, queremos tomar  $m$  valores da nossa observável e fazer uma média destes. Se tomarmos configurações correlacionadas para realizar esta média, ao utilizarmos a eq.(2.5) para calcular o erro associado às nossas medidas, estaremos comprometendo seriamente o resultado, uma vez que o erro assim calculado seria a cota inferior do erro real. O que podemos fazer é partir destas configurações altamente correlacionadas (separadas apenas por 1 MCS/spin) e tomar a média dos  $m$  valores calculados nestas configurações, obtendo desta forma o valor médio da nossa

observável e o erro subestimado. Em seguida, tomemos configurações separadas por 2 MCS/spin e calculamos de novo o erro. Depois, repetimos o mesmo procedimento para 3 MCS/spin e assim por diante, obtendo valores que nos permitem traçar um gráfico do erro em função do número  $i$  de MCS/spin. O que é observado é que este erro é uma função crescente de  $i$ , porém existe uma saturação do seu valor para um dado valor de  $i$ , que chamaremos de  $i_d$ . Logo, consideraremos  $i_d$  como o "tempo" necessário para que haja uma decorrelação das configurações e só iremos considerar para a média configurações separadas por este tempo. Além disso, iremos inicializar outras amostras semelhantes, de forma que, além da média entre medidas de um grupo, será feita outra média entre amostras. No capítulo seguinte, comentaremos sobre as nossas escolhas para a quantidade de amostras e grupos a serem rodados, assim como acerca da quantidade de MCS/spin usados para a termalização.

# Bibliography

- [1] E. Ising, *Z. Phys.* **31**, 253 (1925).
- [2] K. Huang, "Statistical Physics ", ed. Wiley (1987) p.361.
- [3] Yeomans, "Statistical Mechanics of Phase Transition", ed. Oxford (1992)
- [4] L. Onsager, *Phys. Rev.* **65**, 117 (1944).
- [5] N. Metrópolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, A. H. Teller, E. Teller, *J. Chem. Phys.* **21**, 1087 (1953).
- [6] F. James, *Rep. Prog. Phys.* **43** 1146-1189 (1980).
- [7] Frigério N. A. and Clark N., *Trans. Am. Soc.* **22**, 283-4 (1975).
- [8] Frigério N. A., Clark N. and Tyler S., *Toward Truly Random Numbers, Argonne National Laboratory Rep. ANL/ES-26 Part 4.*
- [9] Knuth D., *The Art of Computer Programming* vol 2 (Reading, Mass.: Addison-Wesley) pp1-160 (1969).
- [10] S. Kirkpatrick e E.P. Stoll, *J. Comput. Phys.* **40**, 517 (1981).
- [11] Everett C. J. and Cashwell E. D., *A Monte Carlo Sampler, Los Alamos Scientific Laboratory Informal Rep. LA-5061-MS.*
- [12] M. P. Allen and D. J. Tildesley, "Computer Simulation of Liquids ", ed. Oxford (1987).
- [13] O. Perron, *Math. Ann.* **64**, 1-76, 248-63 (1907).

- [14] G. Bhanot, *Rep. Prog. Phys.* **51** 429-457 (1988).
- [15] K. Binder, *J. Comp. Phys.* **59**, 1 (1985).

# Chapter 3

## Simulação e resultados dos VS bidimensionais

### 3.1 INTRODUÇÃO

Trabalhos recentes têm questionado sobre as técnicas tradicionais do grupo de renormalização e regras de universalidade utilizadas em sistemas uniformes, quando aplicadas a sistemas desordenados, em particular nos vidros de spin.

Graças à teoria do grupo de renormalização, as regras de universalidade para os expoentes críticos em transições de fase de segunda ordem são extremamente bem estabelecidas. Estas nos garantem a dependência dos expoentes críticos apenas com a dimensão espacial  $d$  do sistema em questão e o número  $n$  de componentes dos spins [1]. Nenhum outro parâmetro é pertinente.

Entretanto, em vidros de spin, que são sistemas com interações aleatórias e frustradas, tem se discutido que as transformações lineares, usadas em grupo de renormalização não são apropriadas para tais sistemas; seriam necessárias transformações não-lineares, as quais implicam em um espectro de índices críticos como estudado nos trabalhos de J.R.L. de Almeida [2] e S. Coutinho *et al* [3]. Logo, não existem provas concretas de que a universalidade, assim como concebida, continue válida para tais sistemas; ao contrário, mostraremos neste capítulo que resultados de simulações de

Monte Carlo em vidros de spin de Ising são consistentes com o comportamento, que deveríamos esperar, se a forma da distribuição de probabilidade fosse um parâmetro pertinente para a transição. Este fato nos leva a uma violação das regras tradicionais de universalidade (valores idênticos dos expoentes para todos os membros de uma classe de sistemas com  $d$  e  $n$  fixos).

O propósito, então, desta etapa do nosso trabalho foi o de investigar as propriedades termodinâmicas de tais materiais, através de simulações de Monte Carlo do modelo bidimensional de Edwards-Anderson [4], que é um modelo de vidros de spin, no qual desordem e frustração são introduzidos através de uma distribuição aleatória de probabilidade  $\rho(J_{ij})$  (gaussiana) para as interações entre os primeiros vizinhos. Restringimo-nos, no entanto, a spins unidimensionais.

Começamos por simular o modelo exatamente como descrito acima, comparando, em seguida, os nossos resultados com os de Kinzel e Binder [5] para o mesmo modelo. O valor obtido para o expoente  $\Delta$ , associado à divergência da susceptibilidade, está de acordo com o que eles obtiveram dentro da barra de erro. Em seguida, fizemos modificações na distribuição  $\rho(J_{ij})$  e também no grau de liberdade do spin a fim de estudarmos como as mudanças na desordem e nos valores quânticos dos spins afetavam o valor do expoente crítico.

## 3.2 A simulação

Começamos o nosso problema partindo do modelo de Ising bidimensional numa rede quadrada de 60x60 spins. Montamos o programa para simular tal modelo e, em seguida, generalizamos, introduzindo a desordem através da distribuição de probabilidade das constantes de acoplamento e permitindo aos spins possuírem outros valores quânticos, ou seja, implementamos o seguinte Hamiltoniano

$$\mathcal{H}\{S\} = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} S_i S_j - H \sum_i S_i \quad (3.1)$$

onde o símbolo  $\langle i, j \rangle$  refere-se à soma sobre todos os pares de primeiros vizinhos e  $H$  é o campo externo aplicado. Os valores de  $J_{ij}$  são escolhidos aleatoriamente, dentro de um certo intervalo, com distribuição de probabilidade gaussiana:

$$P(J) = (2\pi)^{-\frac{1}{2}} \exp\left[-\frac{J^2}{2}\right]. \quad (3.2)$$

Inicializamos o nosso sistema em altas temperaturas, onde o campo era então aplicado, e começamos a diminuir lentamente a temperatura, realizando para diferentes valores de temperatura medidas da magnetização ( $M_{FC}$ ). A cada temperatura especificada, o valor da magnetização era medido fazendo uma média em 100 amostras independentes

$$\overline{M}(T, H) = \frac{1}{N} \sum_i \overline{M}_i(T, H) \quad (3.3)$$

com  $N = 100$  e  $\overline{M}_i(T, H)$  dado por

$$\overline{M}_i(T, H) = \frac{1}{L} \sum_l M\{S_l\}. \quad (3.4)$$

Dentro de uma mesma amostra, procuramos descorrelacionar as configurações utilizadas para realizar o cálculo da média, adotando o procedimento descrito na última seção do capítulo anterior.

A fig.(3-1) mostra o comportamento da susceptibilidade com a temperatura para alguns valores de campo  $H$ . Em equilíbrio térmico, a susceptibilidade varia com a temperatura de acordo com a lei de Curie [6]

$$\lim_{H \rightarrow 0} \frac{M_{eq}(T, H)}{H} = \frac{1}{T}, \quad (3.5)$$

uma vez que o nosso sistema não apresenta transição de fase a uma temperatura finita.

Entretanto, é interessante observar que em baixas temperaturas os resultados desviam drasticamente da lei de Curie (representada na fig.(3-1) pela linha (—)), fato

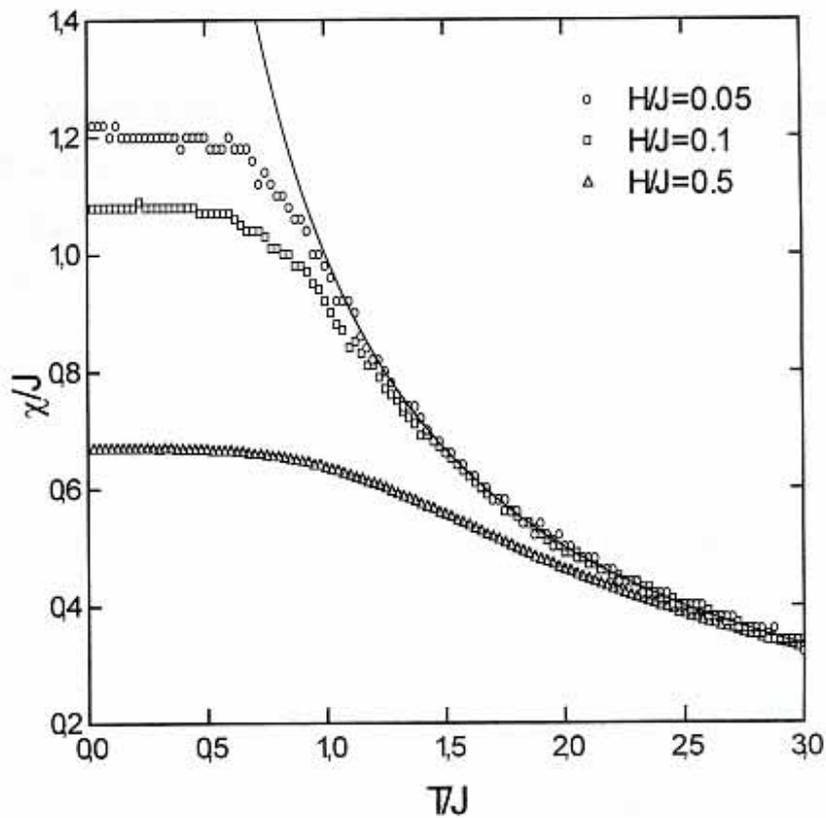


Figure 3-1: Susceptibilidade  $\frac{M}{H}$  vs. temperatura calculada via simulação de Monte Carlo para três valores de campo  $H$ . A linha sólida corresponde a lei de Curie, da qual os resultados desviam no limite de baixas temperaturas. Observamos que quando diminuímos o campo  $H$ , a susceptibilidade satura em valores cada vez maiores de acordo com uma lei de escala, o que nos permite calcular o expoente crítico associado. (Dist. Gaussiana,  $S = \pm 1$ ).

também observado experimentalmente [7]. Existem dois prováveis motivos para esta aberração dos nossos resultados: Observemos que mesmo que tenhamos  $M_{FC} = M_{eq}$ , pode ser que o campo  $H$  não seja pequeno o suficiente para observarmos o comportamento limite da eq.(3.5), ou senão pode ser que o sistema congele em estados não ergódicos, de forma que a magnetização medida ( $M_{FC}$ ) seja menor do que a magnetização de equilíbrio. É verdade que ambos os motivos juntos podem levar a tal comportamento[5].

Visto que ao atingir um dado patamar de equilíbrio a magnetização passa a ser constante, fica fácil obter  $M_{eq}(T = 0, H)$ . De posse destes valores para diferentes valores de campo  $H$ , podemos então ajustar os nossos resultados com uma lei de escala do tipo

$$\frac{M_{eq}(T = 0, H)}{H} \propto H^{-\frac{1}{\Delta}}, \quad (3.6)$$

pois observamos na fig.(3-1) que a susceptibilidade diverge no limite de pequenos valores de campo. Para obtermos o valor do expoente  $\Delta$ , plotamos em um gráfico log-log os valores da susceptibilidade no limite  $T \rightarrow 0$  para alguns valores de campo magnético. Em seguida, fizemos um ajuste dos pontos e calculamos o valor do expoente e o erro associado, levando em consideração as barras de erro dos pontos utilizados para o ajuste. O resultado do ajuste pode ser visto na fig.(3-2).

O valor do expoente  $\Delta = 3.7 \pm 0.3$ , calculado na fig.(3-2), está dentro da barra de erro do valor calculado por Kinzel e Binder [5] ( $\Delta = 3.5 \pm 0.5$ ) para o mesmo modelo também através de simulação de Monte Carlo, o que mostra que nossos resultados são razoáveis.

De posse dos resultados para spins de Ising  $S_i = \pm 1$ , partimos para fazer a simulação de Monte Carlo para o mesmo sistema, porém com os spins assumindo valores  $S_i = 0, \pm 1$ , com o propósito de comparar o expoente crítico  $\Delta$  dos dois casos, para ver se existe dependência do expoente com o valor quântico dos spins na criticalidade.

Como pode ser visto na fig.(3-3), o valor do expoente  $\Delta$  não apresenta uma diferença significativa em relação ao calculado na fig.(3-2), pois os seus valores calculados nos dois casos estão dentro das barras de erro de ambos.

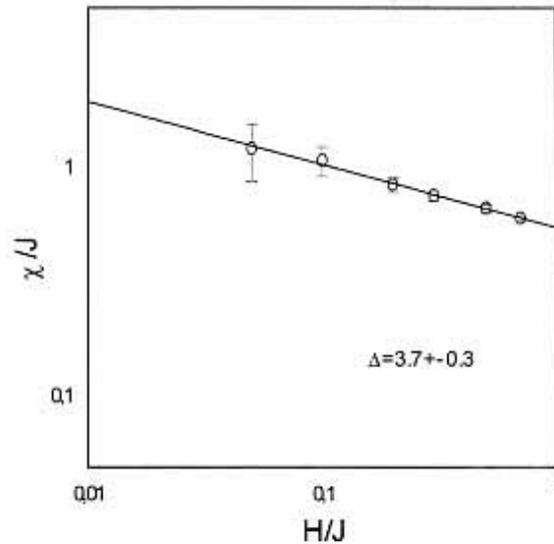


Figure 3-2: Gráfico log-log da susceptibilidade  $\frac{M_{FC}(T \rightarrow 0)}{H}$  vs. campo magnético para pequenos valores de  $H$ . Observamos que os resultados fitam com uma reta de coeficiente  $B = -0.27$ , o que nos sugere uma lei de escala do tipo  $\chi(T = 0) \propto H^B$ . Comparando com a eq.(3.6), obtemos o valor do expoente crítico  $\Delta = 3.7 \pm 0.3$ . (Dist. Gaussiana,  $S = \pm 1$ )

Logo este resultado está de acordo com as regras tradicionais de universalidade, as quais prevêem nenhuma alteração no valor do expoente crítico em relação a essa mudança, uma vez que não estamos alterando a dimensão dos spins, mas apenas aumentando a possibilidade de valores assumidos pelos mesmos numa mesma dimensão.

Notamos que essa regra de universalidade (expoentes críticos do modelo de Ising com spin- $S$  independentes de  $S$ ) foi objeto de resultados contraditórios na literatura [8],[9], antes de ficar permanentemente estabelecida [10]. Por este motivo, o estudo da universalidade com relação à variação dos valores permitidos aos spins  $S$  é pertinente neste trabalho, uma vez que os vidros de spins apresentam uma estrutura complexa dos espaços de fases diferentemente do caso de sistemas uniformes. Para que tenhamos uma melhor compreensão do que está ocorrendo, vamos analisar a

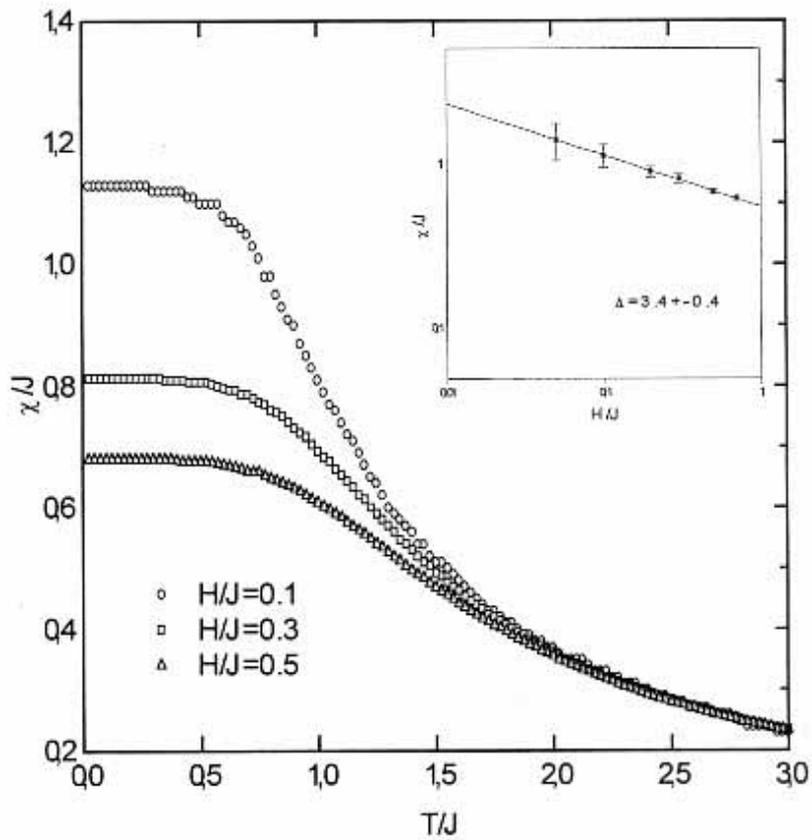


Figure 3-3: Susceptibilidade vs. temperatura (gráfico maior) e gráfico log-log da susceptibilidade vs. campo no limite  $T \rightarrow 0$  (gráfico menor). (Distr. Gaussiana,  $S = 0, \pm 1$ ).

fig.(3-4) que compara os resultados dos diferentes valores assumidos pelos spins para um mesmo valor de campo  $H$  e uma mesma distribuição  $\rho(J_{ij})$ .

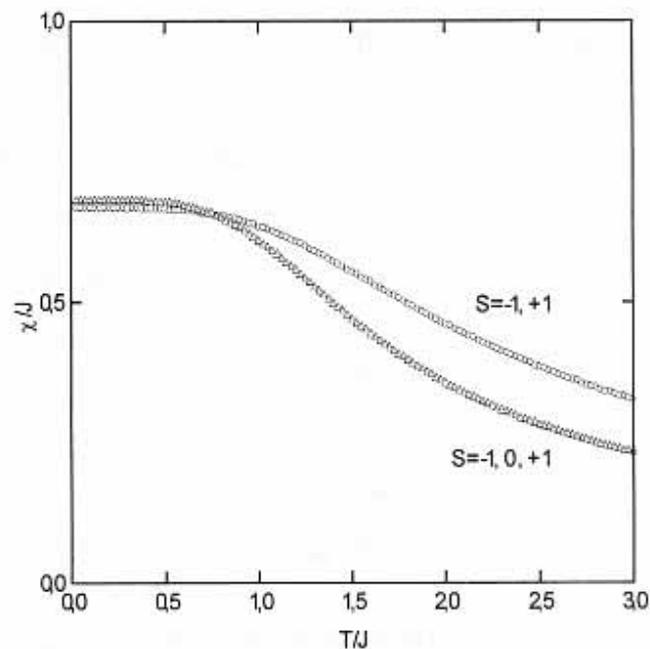


Figure 3-4: Susceptibilidade vs. temperatura para  $\frac{H}{J} = 0.5$  para diferentes graus de liberdade dos spins. Em baixas temperaturas a diferença entre os resultados está dentro do erro.

Na região de baixas temperaturas, vemos que ambos os resultados convergem para um mesmo valor (dentro da barra de erro), o que justifica então o fato de não termos encontrado uma diferença significativa no valor dos expoentes críticos  $\Delta$ , visto que os mesmos são calculados no limite  $T \rightarrow 0$  por definição. Já em altas temperaturas há uma separação das curvas de susceptibilidade.

Podemos entender este comportamento da seguinte forma: Iniciamos o nosso sistema em altas temperaturas onde a agitação térmica faz com que cada spin assumira um dos possíveis valores permitidos com mesma probabilidade. Em seguida, aplicamos o campo  $H$ , que faz com que uma certa direção seja privilegiada (vamos supor

a direção  $S_i = +1$ ). Chamemos de  $E_0$ ,  $E_1$  e  $E_2$  as energias dos estados  $S_i = +1$ ,  $S_i = 0$ ,  $S_i = -1$  respectivamente.

Para o caso  $S_i = \pm 1$  temos uma única taxa de flipagem  $r_1$ , que corresponde à transição de  $E_0$  para  $E_2$ ; já no caso  $S_i = 0, \pm 1$  temos além de  $r_1$  uma taxa  $r_2$  correspondente à transição de  $E_0$  para  $E_1$ , com  $r_2 > r_1$ , uma vez que a taxa de flipagem (eq.(2.40)) é inversamente proporcional à diferença de energia entre os estados para valores fixos de  $H$  e  $T$ . Logo, teremos para o caso  $S_i = 0, \pm 1$  um número maior de spins flipando do estado  $S_i = +1$  para os outros dois possíveis estados do que quando comparado aos que flipam do estado  $S_i = +1$  para o estado  $S_i = -1$  no caso  $S_i = \pm 1$ . Então, a magnetização dada por

$$M = \frac{1}{N} \sum_i S_i, \quad (3.7)$$

onde  $N$  é o número total de spins na rede, será menor no caso do sistema com três níveis. Este fato pode ser observado na fig.(3-4).

Porém, quando vamos diminuindo a temperatura, começam a surgir as correlações de curto alcance. Um dado spin tenderá a orientar o seu vizinho na sua direção ( $J_{ij} > 0$ ) ou na direção contrária ( $J_{ij} < 0$ ), onde os  $J_{ij}$  são distribuídos aleatoriamente com distribuição de probabilidade Gaussiana. Logo no caso  $S_i = 0, \pm 1$ , os estados com  $S_i = 0$  tenderão a desaparecer e teremos uma magnetização aproximadamente igual a do caso  $S_i = \pm 1$ . A análise para altas temperaturas também pode ser feita através da lei de Curie que prevê comportamentos diferentes para a susceptibilidade dependendo do valor quântico do spin.

Continuando com a proposta deste trabalho, mudamos a forma da distribuição de probabilidade para bimodal ( $J_{ij} = \pm J$ ). Os resultados podem ser vistos na fig.(3-5) para o caso  $S_i = \pm 1$ . É interessante observar que o comportamento da susceptibilidade é ligeiramente diferente da observada no sistema com distribuição Gaussiana. Vê-se que a susceptibilidade começa a saturar em um dado valor, porém, logo em seguida, a mesma começa a variar novamente e a saturação ocorre em um valor maior. Isto

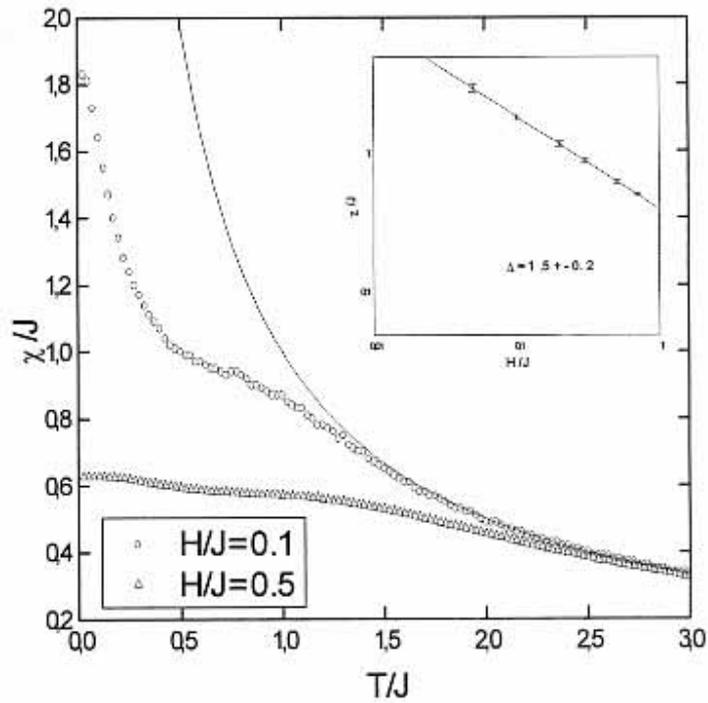


Figure 3-5: No gráfico maior podemos observar o comportamento da susceptibilidade vs. temperatura para dois valores de campo  $H$  no caso da distribuição bimodal com  $S = \pm 1$ . No gráfico menor (log-log) plotamos a susceptibilidade em função do campo para  $T \rightarrow 0$ . O valor do expoente calculado difere do obtido no caso da distribuição Gaussiana.

ocorre devido aos spins com comportamento paramagnético chamados de "crazy" spins.

Quando começamos a diminuir a temperatura e as correlações de curto alcance começam a surgir, existem spins que continuam a se comportar como se só interagissem com o campo  $H$ , já que as interações com seus vizinhos próximos não privilegiam uma dada direção, como pode ser visto no caso do spin central da fig.(3-6). São justamente estes spins paramagnéticos, que, após uma aparente saturação da susceptibilidade, fazem com que a mesma volte a variar para temperaturas mais baixas.

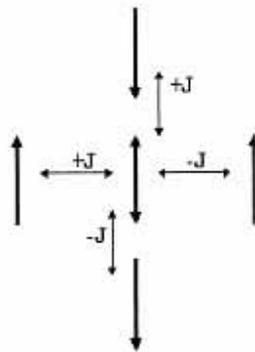


Figure 3-6: Ilustração de uma das possíveis situações onde os spins vizinhos não favorecem nenhuma direção no sítio central de forma que o spin do centro continua a se comportar como se só interagisse com o campo externo. Este spin paramagnético é denominado "crazy spin".

Outro fato que podemos observar na fig.(3-5) é uma diferença significativa do valor do expoente crítico  $\Delta$  em relação ao seu valor para a distribuição Gaussiana. Este resultado evidencia a diferença de classes de universalidade dos dois sistemas com relação às diferentes formas da distribuição de probabilidade das constantes de acoplamento entre primeiros vizinhos.

Apesar da mudança no valor do expoente em relação à distribuição, continuamos a ter invariância com relação a diferentes valores de spin para a distribuição bimodal, fato observado na fig.(3-7).

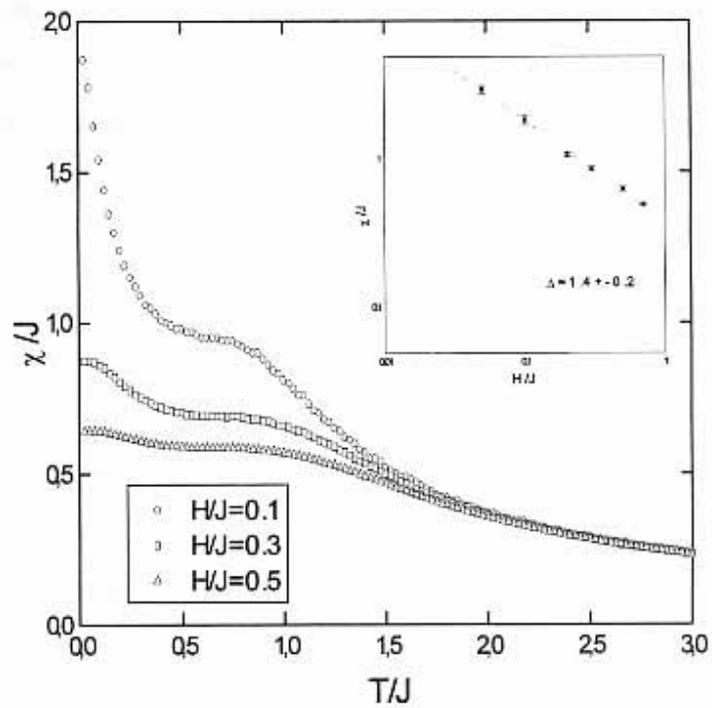


Figure 3-7: Susceptibilidade vs. temperatura (gráfico maior) e gráfico log-log da susceptibilidade vs. campo no limite  $T \rightarrow 0$  (gráfico menor). (Distr. Bimodal,  $S = 0, \pm 1$ ).

Alguns autores [11], [12], também observaram mudanças nos valores de alguns expoentes críticos com relação às diferentes formas de interação, porém em sistemas com  $d = 3, 4, 5$ .

Outro resultado interessante em sistemas desordenados foi obtido por N. Lemke e I. A. Campbell [13]. Em duas dimensões é sabido que os vidros de spin de Ising, com interações de primeiros vizinhos aleatórias, não se ordenam acima de  $T = 0$  [14], [15], resultado este também utilizado no presente trabalho. Porém, os referidos autores observaram uma classe de sistemas de Ising  $2D$ , que apresentam ordem do tipo vidro de spin para temperaturas finitas, contrariando qualquer resultado anterior. Este resultado, no entanto, não interfere nos nossos cálculos, uma vez que nas nossas simulações apenas tratamos o caso de interações entre primeiros vizinhos, o qual não apresenta transição a temperatura finita, diferentemente do caso estudado no trabalho de Lemke *et al*, no qual interações de segundos vizinhos também são consideradas.

Comparando os nossos resultados para diferentes formas de distribuição, podemos observar na fig.(3-8) que, uma vez fixado a possibilidade de valores permitidos aos spins  $S_i = \pm 1$ , o comportamento da susceptibilidade em baixas temperaturas difere, consideravelmente, do caso da distribuição Gaussiana para o caso da distribuição bimodal, porém em altas temperaturas ambas convergem para a lei de Curie.

Em altas temperaturas prevalece a agitação térmica de forma que não existem correlações. Logo, para uma mesma quantidade de estados do sistema, não importa que distribuição de  $J_{ij}$  estamos considerando, já que os spins não conseguem sentir a presença dos vizinhos.

Por outro lado, quando a temperatura é baixa, as correlações de curto alcance começam a surgir e os spins começam a interagir fortemente, de modo que começa a ser importante a forma com que esta interação se dá.

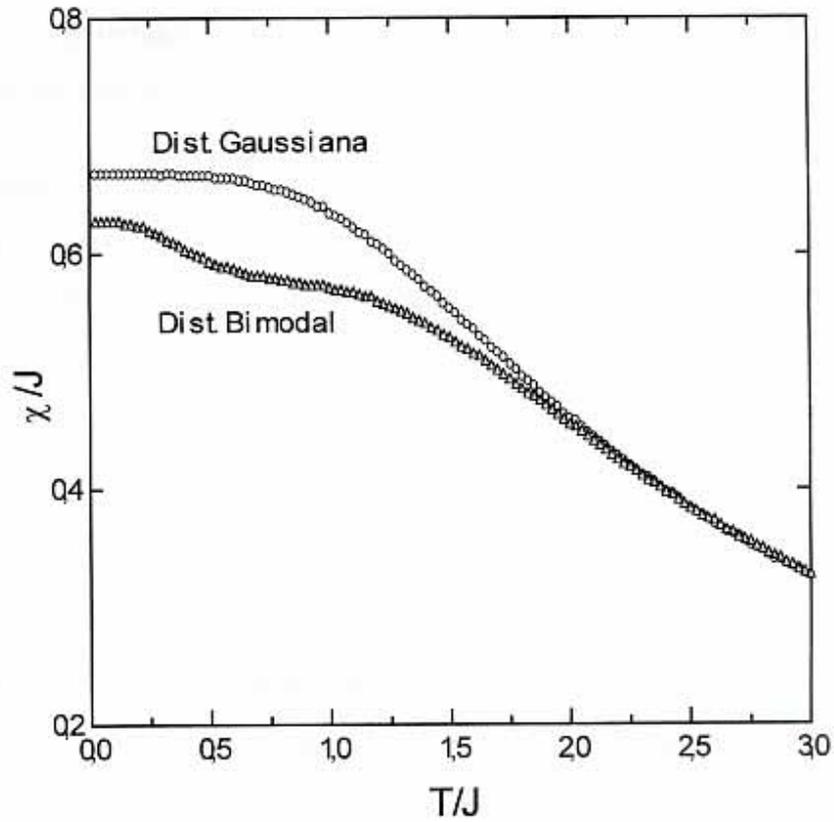


Figure 3-8: Susceptibilidade vs. temperatura com  $\frac{H}{J} = 0.5$  e  $S = \pm 1$  para as distribuições Gaussiana e bimodal. Na região de baixas temperaturas, onde surgem as correlações, podemos observar a diferença do comportamento da susceptibilidade com relação as diferentes formas de distribuição  $\rho(J_{ij})$ .

### 3.3 Conclusões

Dentro da nossa proposta de tentar reproduzir o rico comportamento dos vidros de spin, através de simulações de Monte Carlo no modelo bidimensional de Ising generalizado, com interações aleatorias distribuídas de acordo com as distribuições de probabilidade Gaussiana e bimodal, obtivemos relativo sucesso em descrever algumas propriedades de tais sistemas.

Começando o problema a partir da Hamiltoniana, que nos descreve as interações microscópicas entre os spins, e destes com o campo aplicado, aliado à desordem introduzida através das constantes de acoplamento, procuramos observar mudanças na termodinâmica de sistemas desordenados com relação às modificações, que deixariam o comportamento de sistemas ordenados inalterado. Estas modificações foram a alteração dos valores quânticos dos spins, e a alteração das formas de interação entre spins.

Com os resultados pudemos fazer algumas afirmações acerca da controversa questão da aplicação das técnicas convencionais do grupo de renormalização, formuladas para sistemas ordenados, quando se trata de sistemas onde existe desordem.

Algumas conclusões a que chegamos foram:

- Existe uma divergência da susceptibilidade do modelo, a qual nos permite calcular o valor do expoente  $\Delta$  associado a esta divergência.
- Mudanças nos valores quânticos dos spins ( $S_i = \pm 1$  e  $S_i = 0, \pm 1$ ) não alteram os valores do expoente crítico  $\Delta$  associado à divergência da susceptibilidade, uma vez, que em baixas temperaturas, o que dita o comportamento do sistema é a forma da distribuição  $\rho(J_{ij})$ , mantida inalterada nesta etapa. O fato de  $\Delta$  permanecer inalterado com relação a esta mudança também é observado em sistemas uniformes e está em pleno acordo

com os resultados oriundos do conceito de universalidade dos expoentes críticos.

- A forma da distribuição  $\rho(J_{ij})$  deve ser um parâmetro levado em consideração, se quisermos continuar utilizando o conceito de universalidade, amplamente aplicado e bem estabelecido para sistemas uniformes, em sistemas desordenados, em particular nos vidros de spin, uma vez que observamos uma mudança significativa no valor do expoente  $\Delta$ , quando modificamos a forma da distribuição de probabilidade das constantes de acoplamento.

No próximo capítulo, continuaremos a investigar o comportamento de sistemas desordenados, porém, desta vez, através de resultados numéricos exatos. O intuito é de poder corroborar a hipótese de que a forma da distribuição  $\rho(J_{ij})$ , realmente, seja um parâmetro pertinente para classificar sistemas desordenados em classes de universalidade e também eventualmente encontrar um outro parâmetro[11], [12].

Os resultados aqui discutidos foram apresentados no *XIX ENFMC* [16].

# Bibliography

- [1] Binney, J. J., Dowrick, N. J. Fisher, A. J., e Newman, M. E. J. (1992). *The Modern theory of critical phenomena*. (Clarendon Press, Oxford).
- [2] J. R. L. de Almeida, *J. Phys. A* **26**, 193 (1993).
- [3] S. Coutinho, J. R. L. de Almeida, e E. M. F. Curado, *Proceedings of the IFIP Second International Working Conference on Fractals in the Natural and Applied Sciences-Fractal 93* (Elsevier, Amsterdã).
- [4] S. F. Edwards e P. W. Anderson, *J. Phys. F* **5**, 965 (1975).
- [5] W. Kinzel e K. Binder, *Phys. Rev B* **29**, 1300 (1984).
- [6] K. H. Fischer, *Phys. Rev. Lett.* **34**, 1438 (1975).
- [7] A. P. Malozemoff and Y. Imry, *Phys. Rev. B* **24**, 489 (1981).
- [8] H. E. Stanley e T. A. Kaplan, *J. App. Phys.* **38**, 977 (1967).
- [9] M. A. Moore e J. E. T. Trainin, *J. Phys. C* **5**, L9 (1972).
- [10] T. W. Burkhardt e R. H. Swendsen, *Phys. Rev. B* **13**, 3071 (1976).
- [11] L. Bernardi e I. A. Campbell, *Phys. Rev. B* **17**, 12501 (1995).
- [12] L. Bernardi e I. A. Campbell, *Phys. Rev. B* **1**, 728 (1994).
- [13] N. Lemke e I. A. Campbell, *Phys. Rev. Lett.* **24**, 4616 (1996).
- [14] K. Binder e A. P. Young, *Rev. Mod. Phys.* **58**, 801 (1986).

- [15] R. N. Bhatt e A. P. Young, *Heidelberg Colloquium on Glassy Dynamics*, editado por J. L. van Hemmen e I. Morgenstern (Springer-Verlag, Berlin, 1987).
- [16] Alexandre S. Ramos e J. R. L. de Almeida, *XIX Encontro Nacional da Matéria Condensada (Águas de Lindóia, São Paulo, 1996)*.

## Chapter 4

# Soluções numéricas exatas de VS unidimensionais

### 4.1 Introdução

Os resultados das simulações de Monte Carlo para vidros de spin bidimensionais, obtidos no capítulo 3, indicaram uma não universalidade dos expoentes críticos com relação à distribuição de probabilidade das constantes de acoplamento  $\rho(J_{ij})$  entre primeiros vizinhos. No presente capítulo iremos continuar com o estudo de universalidade nos vidros de spin, porém analisando sistemas unidimensionais.

Existem poucos modelos não triviais, que podem ser resolvidos via mecânica estatística, em dimensões maiores do que um. Uma motivação para considerar modelos unidimensionais, que apresentam soluções exatas, é que suas soluções podem possibilitar uma análise da validade de algumas técnicas de aproximações utilizadas em sistemas tridimensionais. Uma segunda motivação é que os resultados obtidos para modelos unidimensionais podem, muitas vezes, ser generalizados para dimensões superiores. E, finalmente, um modelo unidimensional pode servir como uma boa aproximação para alguns sistemas físicos reais. Por exemplo, existem materiais nos quais os íons magnéticos aparentam formar "cadeias lineares", no sentido que as interações entre spins pertencentes a uma mesma cadeia são muito mais fortes que as interações

entre spins pertencentes a cadeias diferentes.

No nosso caso, o estudo de sistemas unidimensionais permite comparar os nossos resultados numéricos com as soluções exatas existentes para os modelos unidimensionais, obtendo assim uma indicação da concordância de ambos os resultados. Esperamos, desta forma, que os resultados do modelo  $1D$  corroborem os resultados das nossas simulações Monte Carlo em sistemas bidimensionais, de forma a nos deixar mais confortados em relação a uma dependência dos expoentes críticos com relação a  $\rho(J_{ij})$ , indicando que, se quisermos continuar classificando os vidros de spin em classes de universalidade, a forma da distribuição deve ser um fator relevante.

Neste capítulo, iremos calcular os expoentes críticos do modelo para diferentes distribuições  $\rho(J_{ij})$ , e para diferentes números de vizinhos  $z$ .

## 4.2 Estado fundamental de um vidro de spin 1-D

Estudaremos as propriedades do estado fundamental ( $T = 0$ ) de cadeias lineares de spins de Ising com interações (entre  $z$  vizinhos) ferromagnéticas e antiferromagnéticas distribuídas aleatoriamente, através de resultados numéricos exatos.

Podemos decompor o Hamiltoniano  $\mathcal{H}_{L+1}$  de uma cadeia de  $L + 1$  spins, em um Hamiltoniano  $\mathcal{H}_L$  de uma cadeia de  $L$  spins, mais a parte de  $\mathcal{H}_{L+1}$  que contém o spin  $\sigma_{L+1}$  (a princípio estaremos apenas considerando interações entre primeiros vizinhos)

$$\mathcal{H}_{L+1} = \mathcal{H}_L - J_{L,L+1}\sigma_L\sigma_{L+1} - h\sigma_{L+1}. \quad (4.1)$$

Se  $\sigma_L = +1$  denotaremos  $-F_L$  como a energia do estado fundamental. No entanto, se  $\sigma_L = -1$  a energia será  $-G_L$ . Logo, os quatro possíveis estados para os dois últimos spins são

$$1. \sigma_L = \sigma_{L+1} = +1$$

$$-F_{L+1} = -F_L - J_{L,L+1} - h; \quad (4.2)$$

$$2. -\sigma_L = \sigma_{L+1} = +1$$

$$-F_{L+1} = -G_L + J_{L,L+1} - h; \quad (4.3)$$

$$3. \sigma_L = \sigma_{L+1} = -1$$

$$-G_{L+1} = -G_L - J_{L,L+1} + h; \quad (4.4)$$

$$\sigma_L = -\sigma_{L+1} = +1$$

$$-G_{L+1} = -F_L + J_{L,L+1} + h. \quad (4.5)$$

Os valores de  $-F_{L+1}$  e  $-G_{L+1}$  serão determinados pelos mínimos das eqs.(4.2-4.5). Logo, reagrupando as mesmas teremos

$$F_{L+1} = h + \max(F_L + J_{L,L+1}; G_L - J_{L,L+1}) \quad (4.6)$$

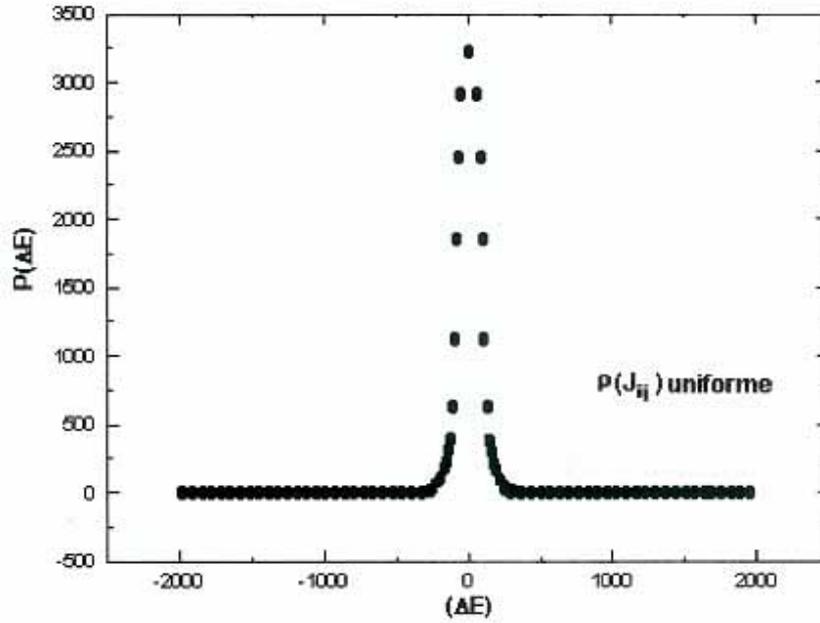


Figure 4-1: Histograma de  $\Delta E = 2C_L \equiv G_L - F_L$ . Observamos que o gráfico apresenta um pico em torno do valor  $\Delta E = 0$  ilustrando o fato de que rapidamente os valores de  $G_L$  e  $F_L$  se igualam. Este pico se torna mais estreito à medida que vamos aumentando o número de iterações.

e.

$$G_{L+1} = -h + \text{máx}(F_L - J_{L,L+1}; G_L + J_{L,L+1}). \quad (4.7)$$

Estas relações de recorrência expressam o fato de que, para calcularmos a energia do estado fundamental de  $\mathcal{H}_{L+1}$ , temos que achar o valor de  $\sigma_L$ , que minimiza  $\mathcal{H}_{L+1}$ .

Montamos, então, um programa que realiza o cálculo das expressões (4.6-4.7). Escolhemos o valor inicial de campo desejado, tomamos como condições iniciais  $F_L = G_L = 0$ , e sorteamos o valor de  $J_{L,L+1}$ , de acordo com uma dada distribuição de probabilidade. Nos nossos cálculos iterávamos as expressões  $10^8$  vezes correspondendo a uma cadeia com  $10^8$  spins. A partir de um certo número de iterações, os valores das expressões (4.6-4.7) se tornam iguais; logo, apesar de termos que calculá-las a cada iteração (por serem dependentes), apenas uma delas é necessária para determinar  $E(h)$ . Os valores de  $F_L$  e  $G_L$  aumentam com  $L$ , porém sua diferença permanece

finita. Se definirmos  $C_L$  como

$$2C_L = G_L - F_L, \quad (4.8)$$

então as equações (4.6-4.7) resultam em

$$C_{L+1} = C_L - h + \max(-C_L - J_{L,L+1}; 0) - \max(C_L - J_{L,L+1}; 0). \quad (4.9)$$

Este resultado pode ser visto na fig.(4-1), a qual mostra a rápida convergência de  $F_L$  e  $G_L$ . Os valores de energia foram determinados realizando uma média em 10 amostras.

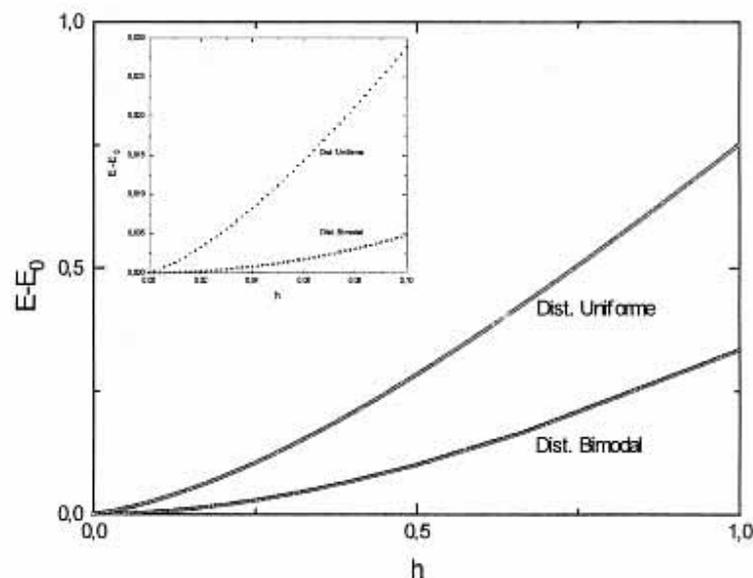


Figure 4-2: Energia da cadeia linear vs. campo magnético, para as distribuições de probabilidade bimodal e uniforme ( $z = 1$ ). No gráfico menor, onde se observa o comportamento para pequenos valores de campo, identificamos que o comportamento de ambas as curvas no limite  $h \rightarrow 0$  são diferentes para as duas diferentes distribuições.

Uma vez obtido o valor da energia, variávamos o valor do campo magnético, obtendo desta forma  $E(h)$ . Podemos observar os resultados de  $E(h)$  para o caso com

interações entre primeiros vizinhos e com distribuição de probabilidade bimodal e uniforme na fig.(4-2).

Em seguida, calculamos a magnetização  $M(T = 0, h)$  para as distribuições bimodal e uniforme, porém o resultado da última só será apresentado mais adiante. Como podemos observar na fig.(4-3) existem descontinuidades na magnetização para certos valores de campo magnético  $h$  [1]. Para entender a razão destas descontinuidades

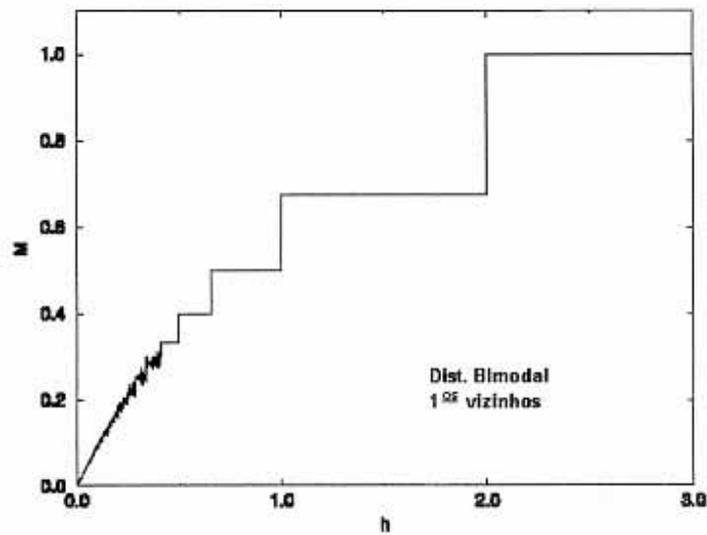


Figure 4-3: Magnetização vs. campo magnético para uma cadeia linear com constantes de acoplamento distribuídas de forma bimodal, e com  $z = 1$ .

observemos a fig.(4-4), a qual ilustra uma cadeia linear de spins de Ising com interações bimodal ( $\pm J$ ) na presença de um campo  $h$  em duas configurações diferentes. Na letra *a*, temos o *i-ésimo* spin, apontando no sentido contrário ao campo  $h$  e, então, a energia da cadeia nesta configuração será  $E_1 = -2J + h + cte$ . Na configuração da letra *b* (na qual o *i-ésimo* spin aponta no mesmo sentido do campo), temos  $E_2 = 2J - h + cte$ , logo a diferença de energia entre as duas configurações é  $\Delta E = 4J - 2h$ . Se  $\Delta E > 0$ , a cadeia inicialmente na configuração da letra *a* permanece sem sofrer alterações; se  $\Delta E < 0$  o *i-ésimo* spin irá *flipar* e a nova configuração será a da letra *b*; porém se  $\Delta E = 0 \Rightarrow h = 2J$ , ambas as configurações serão equivalentes, implicando em um comportamento descontínuo para a magnetização como observado na fig.(4-3). Além

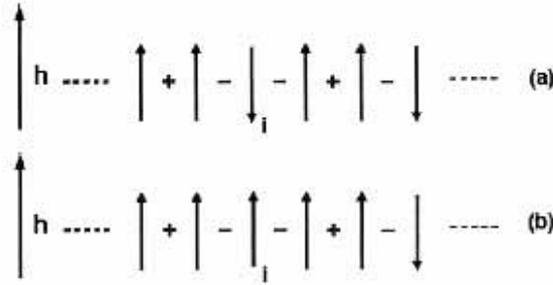


Figure 4-4:

da descontinuidade em  $h = 2J$ , que ocorre devido ao *flip* de spins individuais (como discutimos acima), surgem outras descontinuidades como por exemplo em  $h = J$ ,  $h = \frac{2J}{3}$ ,  $h = \frac{J}{2}$  ...  $h = \frac{2J}{r}$ , devido ao *flip* de clusters de  $r$  spins.

Vamos agora calcular o expoente crítico  $\delta$  definido como

$$M(T = 0, h) \propto h^{\frac{1}{\delta}}, \quad (4.10)$$

para pequenos valores de campo magnético  $h$ . Para o caso da distribuição  $\rho(J_{ij})$  bimodal e, considerando apenas interações entre primeiros vizinhos, obtivemos uma susceptibilidade não divergente, como observado na fig.(4-5), que nos fornece como resultado  $\frac{1}{\delta} = 1.01 \pm 0.02$ . Mudamos a forma da distribuição de discreta para contínua (neste caso uma distribuição uniforme) e observamos uma susceptibilidade divergente como observado na fig.(4-6), com  $\frac{1}{\delta} = 0.33 \pm 0.02$ . Susceptibilidade vs. campo magnético para  $\rho(J_{ij})$  uniforme e com  $z = 1$ . No gráfico menor, aparece o cálculo do expoente crítico  $\delta$  ( $\frac{1}{\delta} = 0.33 \pm 0.02$ ). Observamos que o valor obtido anteriormente para a distribuição bimodal difere consideravelmente deste expoente.

Observamos que o valor do expoente crítico  $\delta$  mudou com relação à forma da distribuição  $\rho(J_{ij})$ . Este resultado já havia sido sugerido por Chen e Ma [2] através de argumentos heurísticos. Os autores estudaram o estado fundamental ( $T = 0$ ) de cadeias unidimensionais, utilizando uma distribuição aleatória para as constantes de acoplamento  $\rho(J_{ij})$ , e concluíram que a magnetização em  $h = 0$  é não-analítica e se

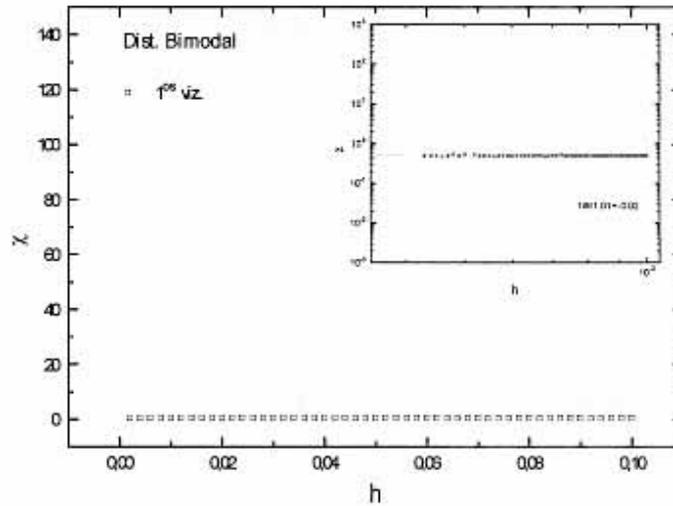


Figure 4-5: Susceptibilidade vs. campo magnético ( $h \rightarrow 0$ ) para  $\rho(J_{ij})$  bimodal e  $z = 1$ . No gráfico menor observamos o cálculo do expoente  $\delta$ . ( $\frac{1}{\delta} = 1.01 \pm 0.02$ )

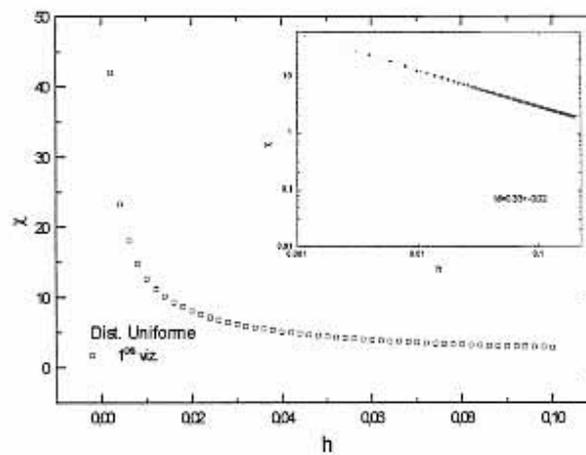


Figure 4-6: Susceptibilidade vs. campo magnético para  $\rho(J_{ij})$  uniforme e com  $z = 1$ . No gráfico menor aparece o cálculo do expoente crítico  $\delta$  ( $\frac{1}{\delta} = 0.33 \pm 0.02$ ). Observamos que o valor obtido anteriormente para a distribuição bimodal, difere consideravelmente deste expoente.

comporta como

$$m = Ch^{\frac{K+1}{K+3}}, \quad (4.11)$$

para  $h \rightarrow 0$  e  $C$  constante. O parâmetro  $K$  que aparece no expoente do campo magnético  $h$  na eq.(4.11), é dado pela forma da distribuição de probabilidade  $\rho(J_{ij})$  em  $J_{ij} = 0$

$$\rho(J_{ij}) \sim A |J_{ij}|^K. \quad (4.12)$$

A distribuição Gaussiana apresenta  $\rho(J_{ij}) \sim \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$  no limite  $J_{ij} \rightarrow 0$ , logo teremos  $K = 0$ . No caso da distribuição bimodal temos  $\rho(J_{ij}) = 0$  para  $J_{ij} \rightarrow 0$ , de forma que teremos  $K = \infty$  uma vez que  $J_{ij} < 1$ . Os resultados que nós obtivemos neste presente trabalho estão em perfeito acordo com os sugeridos no trabalho de Chen e Ma. Para a distribuição bimodal obtivemos  $\alpha \equiv \frac{1}{\delta} = 1.01 \pm 0.02$ , onde o valor esperado é  $\alpha = 1$ . Já para a distribuição uniforme, que assim como a distribuição gaussiana apresenta  $K = 0$ , obtivemos  $\alpha = 0.33 \pm 0.02$  onde o esperado é  $\alpha = \frac{1}{3}$ .

O argumento é simples: na presença de um campo magnético fraco, a magnetização é oriunda do flip de clusters que são delimitados por duas ligações fracas  $J_0$ . A distância entre estas ligações fracas é dada por  $D = \frac{N}{N_c}$ , onde  $N$  é o número total de ligações e  $N_c$  o número de ligações mais fracas que  $|J_0|$  dado por

$$N_c = N \int_{-|J_0|}^{|J_0|} \rho(J_{ij}) dJ_{ij} = N \int_{-|J_0|}^{|J_0|} J_{ij}^K dJ_{ij}. \quad (4.13)$$

Temos então  $N_c \sim N |J_0|^{K+1}$ , o que implica em  $D \sim |J_0|^{-(K+1)}$ . A magnetização é dada por  $m = \sum_i S_i \Rightarrow m^2 = \sum_i \sum_j S_i S_j = \sum_i S_i^2$  (já que  $S_i$  e  $S_j$  são aleatórios de forma que só os termos  $i = j$  sobrevivem). Como  $S_i = \pm 1 \Rightarrow m^2 \sim D$ , teremos a magnetização de um cluster de tamanho  $D$  limitado pelas ligações fracas dada por  $m \sim |J_0|^{-\frac{1}{2}(K+1)}$ . O campo necessário para fliparmos este cluster de comprimento  $D$  é  $h \sim \frac{E}{m} \sim \frac{|J_0|}{m} \Rightarrow h \sim |J_0|^{\frac{(K+3)}{2}}$ . Logo a magnetização por spin da cadeia linear devido ao flip destes clusters é  $m \simeq \frac{D^{1/2}}{D} \sim |J_0|^{\frac{(K+1)}{2}}$ , que expressada em função do campo  $h$  fornece o resultado da eq.(4.11).

Posteriormente, Gardner e Derrida [3] além de calcular exatamente a constante  $C$

que aparece na eq.(4.11), obtiveram uma dependência de  $m$  com  $h$  tal qual prevista por Chen e Ma. No limite de muitas iterações, a eq.(4.9) tem uma distribuição estacionária de probabilidade (fig.(4-1)) dada por

$$P(c) = \int \rho(J)dJ \int P(c')dc' \delta(c - c' + h - \text{máx}(-c' - J; 0) + \text{máx}(c' - J; 0)), \quad (4.14)$$

em função da qual a energia  $E(h)$  fica

$$E(h) = \int_{-\infty}^{+\infty} J\rho(J)dJ + \int_{-\infty}^{+\infty} \rho(J)dJ \left( \int_J^{+\infty} P(c)(c - J)dc + \int_{-\infty}^{-J} P(c)(-c - J)dc \right), \quad (4.15)$$

de onde se obtém analiticamente a magnetização  $m = -\frac{\partial E}{\partial h}$

$$m \simeq 0.7(Ah)^{1/3}. \quad (4.16)$$

Uma vez tendo conseguido êxito na reprodução dos resultados na aproximação de primeiros vizinhos, passamos a considerar interações entre segundos vizinhos, terceiros vizinhos...

### 4.2.1 Caso $z = 2$

Ao considerar interações entre segundos vizinhos, temos que calcular novamente as relações de recorrência para o Hamiltoniano. A diferença é que o número de equações que determinarão o valor da energia da cadeia aumenta. Fazendo uma análise semelhante à feita no caso de primeiros vizinhos, obtemos

$$F_{L+1} = h + J_{L,L+1} + \text{máx}(F_L + J_{L-1,L+1}; H_L - J_{L-1,L+1}) \quad (4.17a)$$

$$H_{L+1} = h - J_{L,L+1} + \text{máx}(G_L + J_{L-1,L+1}; I_L - J_{L-1,L+1}) \quad (4.17b)$$

$$G_{L+1} = h - J_{L,L+1} + \text{máx}(F_L - J_{L-1,L+1}; H_L + J_{L-1,L+1}) \quad (4.17c)$$

$$I_{L+1} = h + J_{L,L+1} + \text{máx}(G_L - J_{L-1,L+1}; I_L + J_{L-1,L+1}). \quad (4.17d)$$

Assim como discutido anteriormente, as eq.(4.17) convergem para um mesmo valor no limite  $L \rightarrow \infty$ . Realizando novamente os cálculos numéricos destas expressões para  $10^8$  spins obtivemos o resultado apresentado na fig.(4-7) para  $E(h)$ . Em seguida

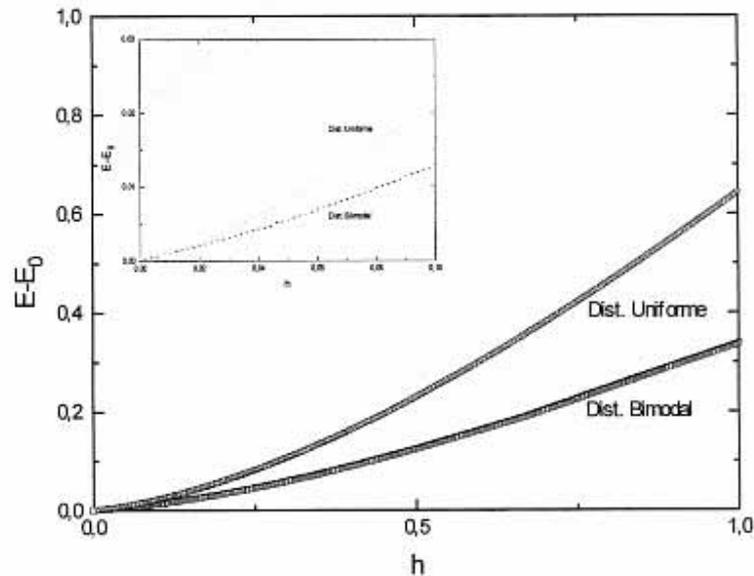


Figure 4-7: Energia vs. campo magnético, para as distribuições de probabilidade bimodal e uniforme ( $z = 2$ ). No gráfico menor podemos observar o comportamento para  $h \rightarrow 0$ .

calculamos a derivada de  $E(h)$  com relação ao campo  $h$  (fig.(4-8)).

Como pode ser observado na fig.(4-8), as descontinuidades não ocorrem necessariamente nos mesmos valores do caso  $z = 1$  ilustrado na fig.(4-3). No presente caso, como existe uma interação de um dado spin com os seus segundos vizinhos (além da interação com os primeiros vizinhos) teremos  $E_1 = -4J + h + cte$  (segundo o raciocínio apresentado anteriormente) para uma dada configuração, e, flipando o spin teremos  $E_2 = 4J - h + cte$ . Logo a diferença de energia das duas configurações é  $\Delta E = 8J - 2h$ . Se  $\Delta E > 0$ , o spin permanecerá inalterado, porém se  $\Delta E < 0$  o spin terá energia suficiente para quebrar as quatro ligações e flipar, passando para uma nova configuração. Os valores de campo onde ocorrerão as descontinuidades serão

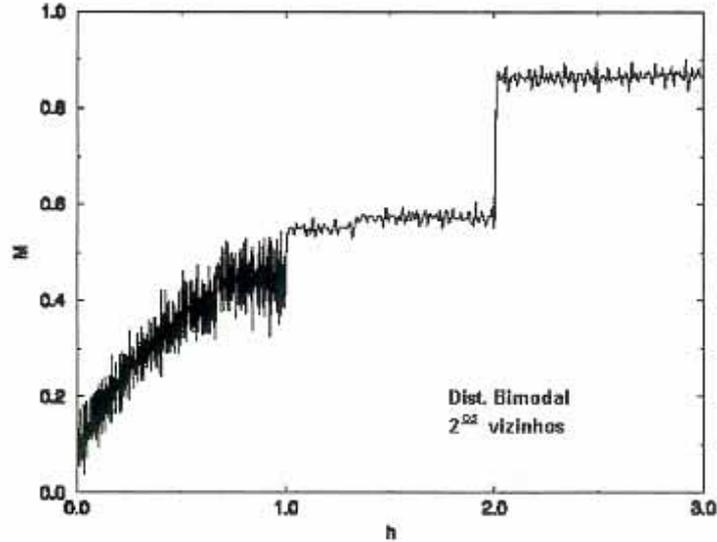


Figure 4-8: Magnetização  $\frac{dE(T=0)}{dh}$  vs. campo magnético para  $\rho(J_{ij})$  bimodal ( $z = 2$ ).

dados por  $\Delta E = 0$ , que implica em  $h = \frac{4J}{r}$  ( $r$  inteiro).

Na fig.(4-8) podemos observar estas descontinuidades para  $r = 2, 3, 4$  (pelo menos). O caso  $r = 1$  não aparece no gráfico por não termos passado do valor de campo  $h = 4$  onde teríamos  $m = 1$ .

Em seguida, calculando a susceptibilidade para ambas as distribuições de probabilidade (fig.(4-9) e fig.(4-10)), observamos que o expoente crítico permanece inalterado no caso da dist. uniforme, porém para a dist. bimodal há uma mudança significativa.

#### 4.2.2 Caso $z = 3$

Apresentaremos a seguir (figs.(4-11),(4-12),(4-13),(4-14),(4-15),(4-16)), não só os resultados para  $z = 3$  (terceiros vizinhos) mas também os dois primeiros casos considerados, de modo que possamos fazer uma comparação dos mesmos. As equações de recorrência para  $z = 3$  são

$$F_{L+1} = h + J_{L,L+1} + J_{L-1,L+1} + \max(L_L - J_{L-2,L+1}; F_L + J_{L-2,L+1}) \quad (4.18a)$$

$$I_{L+1} = h - J_{L,L+1} + J_{L-1,L+1} + \max(M_L - J_{L-2,L+1}; G_L + J_{L-2,L+1}) \quad (4.18b)$$

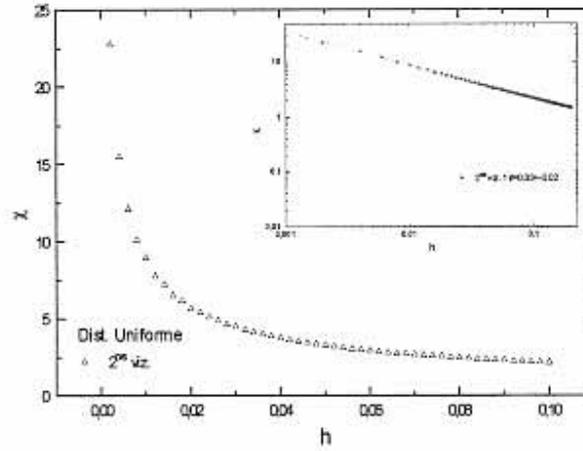


Figure 4-9: Susceptibilidade vs. campo magnético para  $\rho(J_{ij})$  uniforme e  $z = 2$ . No gráfico menor, onde aparece o cálculo do expoente  $\delta$ , observa-se que o seu valor permanece inalterado em relação ao caso  $z = 1$ . ( $\frac{1}{\delta} = 0.33 \pm 0.02$ )

$$L_{L+1} = h + J_{L,L+1} - J_{L-1,L+1} + \text{máx}(I_L + J_{L-2,L+1}; N_L - J_{L-2,L+1}) \quad (4.18c)$$

$$N_{L+1} = h - J_{L,L+1} - J_{L-1,L+1} + \text{máx}(H_L + J_{L-2,L+1}; K_L - J_{L-2,L+1}) \quad (4.18d)$$

$$G_{L+1} = -h - J_{L,L+1} - J_{L-1,L+1} + \text{máx}(F_L - J_{L-2,L+1}; L_L + J_{L-2,L+1}) \quad (4.18e)$$

$$H_{L+1} = -h + J_{L,L+1} - J_{L-1,L+1} + \text{máx}(M_L + J_{L-2,L+1}; G_L - J_{L-2,L+1}) \quad (4.18f)$$

$$M_{L+1} = -h - J_{L,L+1} + J_{L-1,L+1} + \text{máx}(N_L + J_{L-2,L+1}; I_L - J_{L-2,L+1}) \quad (4.18g)$$

$$K_{L+1} = -h + J_{L,L+1} + J_{L-1,L+1} + \text{máx}(H_L - J_{L-2,L+1}; K_L + J_{L-2,L+1}) \quad (4.18h)$$

### 4.3 Conclusões

Listaremos a seguir algumas das conclusões deste capítulo:

1. Sistemas lineares com ligações ferro e antiferromagnéticas aleatoriamente distribuídas, apresentam  $m \sim h^\alpha$  onde  $\alpha$  depende da forma da distribuição das constantes de acoplamento.

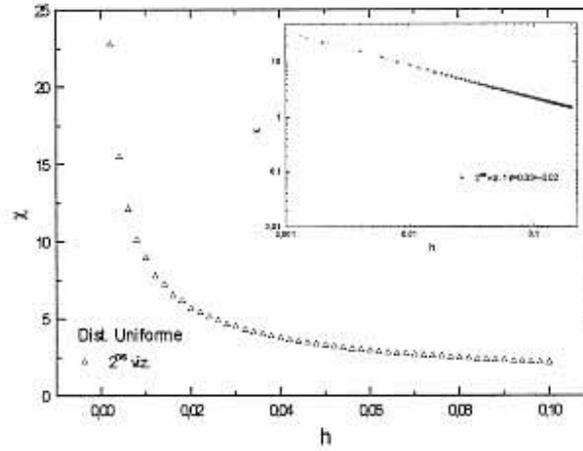


Figure 4-9: Susceptibilidade vs. campo magnético para  $\rho(J_{ij})$  uniforme e  $z = 2$ . No gráfico menor, onde aparece o cálculo do expoente  $\delta$ , observa-se que o seu valor permanece inalterado em relação ao caso  $z = 1$ . ( $\frac{1}{\delta} = 0.33 \pm 0.02$ )

$$L_{L+1} = h + J_{L,L+1} - J_{L-1,L+1} + \text{máx}(I_L + J_{L-2,L+1}; N_L - J_{L-2,L+1}) \quad (4.18c)$$

$$N_{L+1} = h - J_{L,L+1} - J_{L-1,L+1} + \text{máx}(H_L + J_{L-2,L+1}; K_L - J_{L-2,L+1}) \quad (4.18d)$$

$$G_{L+1} = -h - J_{L,L+1} - J_{L-1,L+1} + \text{máx}(F_L - J_{L-2,L+1}; L_L + J_{L-2,L+1}) \quad (4.18e)$$

$$H_{L+1} = -h + J_{L,L+1} - J_{L-1,L+1} + \text{máx}(M_L + J_{L-2,L+1}; G_L - J_{L-2,L+1}) \quad (4.18f)$$

$$M_{L+1} = -h - J_{L,L+1} + J_{L-1,L+1} + \text{máx}(N_L + J_{L-2,L+1}; I_L - J_{L-2,L+1}) \quad (4.18g)$$

$$K_{L+1} = -h + J_{L,L+1} + J_{L-1,L+1} + \text{máx}(H_L - J_{L-2,L+1}; K_L + J_{L-2,L+1}) \quad (4.18h)$$

### 4.3 Conclusões

Listaremos a seguir algumas das conclusões deste capítulo:

1. Sistemas lineares com ligações ferro e antiferromagnéticas aleatoriamente distribuídas, apresentam  $m \sim h^\alpha$  onde  $\alpha$  depende da forma da distribuição das constantes de acoplamento.

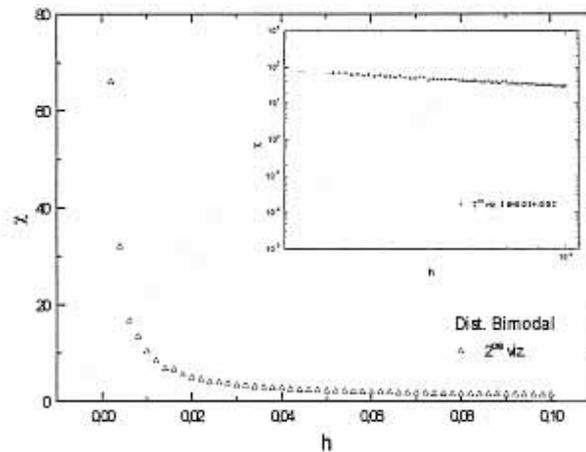


Figure 4-10: Susceptibilidade vs. campo magnético para  $\rho(J_{ij})$  bimodal e  $z = 2$ . Diferentemente da dist. uniforme, a dist. bimodal apresenta uma mudança no valor do expoente  $\delta$  quando passamos de  $z = 1$  para  $z = 2$ . ( $\frac{1}{\delta} = 0.01 \pm 0.02$ )

2. Para as distribuições contínuas, uniforme e Gaussiana, os valores de  $\alpha$  são iguais.
3. No caso das distribuições contínuas (fig.(4-13)e fig.(4-16)), não conseguimos identificar nenhuma dependência  $\alpha = \alpha(z)$ , ou seja não observamos nenhuma alteração do valor de  $\alpha$  com relação ao número de vizinhos considerados.
4. Analisando o comportamento da energia do estado fundamental em relação ao número de vizinhos para a distribuição bimodal obtemos a seguinte tabela

$z$	$-E_0$	$-\frac{E_0}{\sqrt{z}}$
1	1.000	1.000
2	1.333	0.943
3	1.615	0.932
4	1.703	0.852
5	1.789	0.801
6	1.874	0.765
SK		0.763...

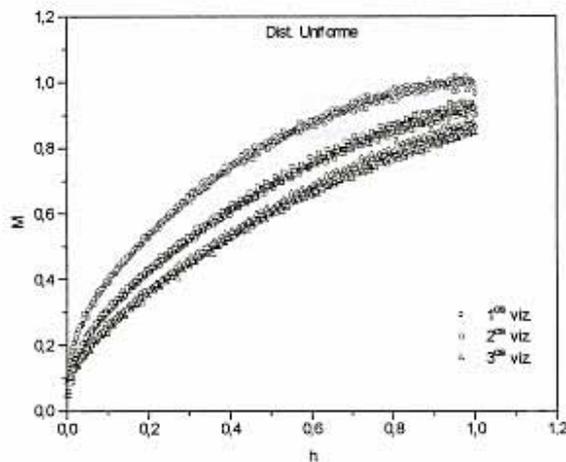


Figure 4-11: Magnetização vs. campo magnético para  $\rho(J_{ij})$  uniforme.

na qual podemos observar que no limite  $z \rightarrow \infty$ , a energia do estado fundamental tende ao valor da energia do modelo de alcance infinito de Sherrington e Kirkpatrick. Temos assim, uma outra forma de se obter  $E_0$  independente de réplicas.

5. Para a distribuição  $\rho(J_{ij})$  bimodal, existe diferença no valor de  $\alpha$  de primeiros para segundos vizinhos, porém, de segundos para terceiros,  $\alpha$  permanece inalterado.

Os resultados aqui discutidos foram apresentados no XX ENFMC [4].

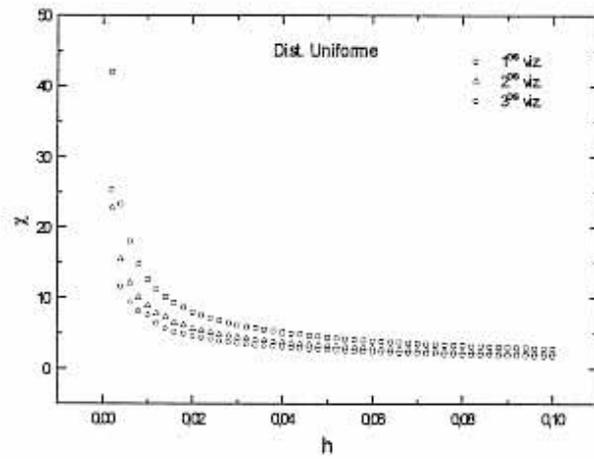


Figure 4-12: Susceptibilidade vs. campo magnético para  $\rho(J_{ij})$  uniforme.

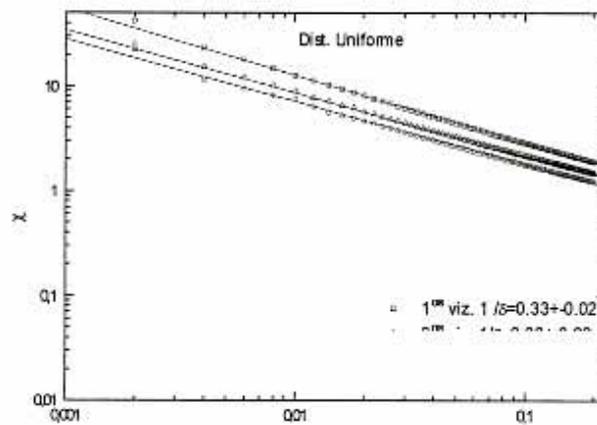


Figure 4-13: Cálculo do expoente crítico  $\delta$  para a distribuição uniforme. Não houve variações do expoente até onde pudemos precisar.

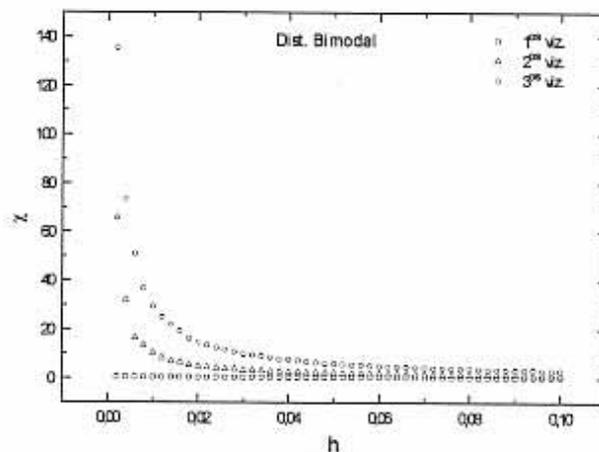


Figure 4-14: Susceptibilidade vs. campo magnético para a dist. bimodal.

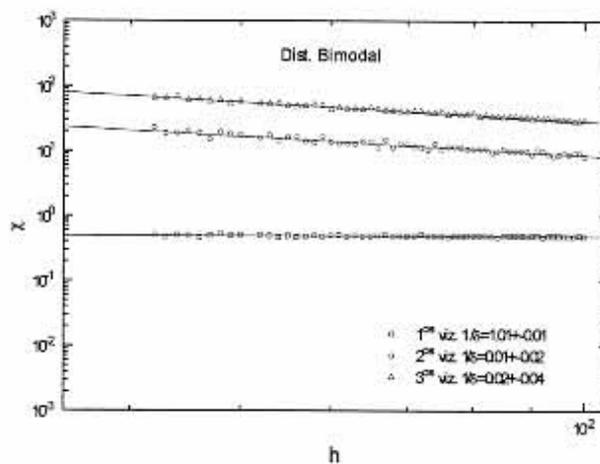


Figure 4-15: Cálculo do expoente  $\delta$  para a dist. bimodal. Observa-se uma variação do expoente com relação a  $z$  quando se passa de  $z = 1$  para  $z = 2$ , porém esta variação não existe aparentemente de  $z = 2$  para  $z = 3$ .

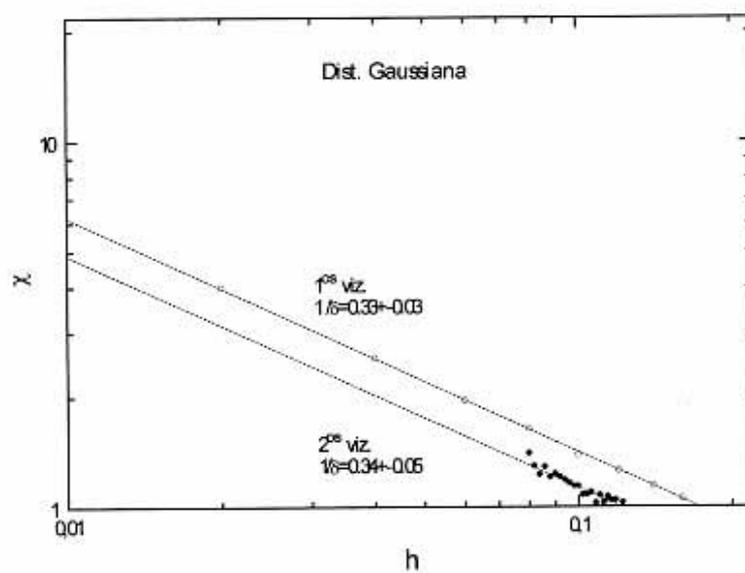


Figure 4-16: Cálculo do expoente  $\delta$  para a dist. Gaussiana. Neste caso, assim como no caso da dist. uniforme, não se observa alteração no valor do expoente  $\delta$ .

# Bibliography

- [1] B. Derrida, J. Vannimemus, and Y. Pomeau, *J. Phys.* **C11** 4749 (1978).
- [2] Hsin-Hsiung Chen and Shang-keng Ma, *Journal of Statistical Physics*, **29**, No. 4 (1982).
- [3] E. Gardner and B. Derrida ...
- [4] Alexandre S. Ramos e J. R. L. de Almeida, *XX Encontro Nacional da Matéria Condensada (Caxambu, São Paulo, 1997)*.

# Chapter 5

## Discussão Geral e Perspectivas

### 5.1 Conclusões

Discutiremos de forma geral algumas conclusões a que chegamos, mesclando os resultados do capítulo 3 com os do capítulo 4, uma vez que ambos os capítulos já apresentam suas próprias conclusões.

Segue um resumo de algumas das nossas conclusões:

1. Universalidade dos expoentes críticos em relação aos valores quânticos dos spins ( $S_i = \pm 1$  e  $S_i = 0, \pm 1$ ) foi observada para os VS bidimensionais. Este estudo para sistemas desordenados foi pertinente, visto que a aceitação da universalidade com relação a  $S_i$  para sistemas uniformes se deu de forma lenta ([8],[9],[10]).
2. Os resultados obtidos através de simulações de Monte Carlo para os VS bidimensionais, assim como os resultados numéricos obtidos para os VS unidimensionais, indicaram uma não universalidade dos expoentes críticos com relação à forma da distribuição  $\rho(J_{ij})$ . Estes resultados sugerem que  $\rho(J_{ij})$  deve ser um parâmetro pertinente na classificação de sistemas desordenados em classes de universalidade.
3. Até onde pudemos precisar, os expoentes críticos para os sistemas desordenados unidimensionais não dependem do alcance das interações entre spins, ou seja, os

expoentes continuam universais com relação ao número de vizinhos  $z$ . A única exceção foi para a distribuição bimodal, que continuou a apresentar expoentes iguais para  $z \geq 2$ , porém com valores diferentes do caso  $z = 1$ .

## 5.2 Perspectivas

- Entre as nossas perspectivas futuras citamos:
- Estender o cálculo de Monte Carlo para um Hamiltoniano mais complexo do tipo BEG, assim como realizá-lo para dimensões superiores.
- Substituir os spins de Ising ( $\sigma_i = \pm 1$ ) por spins vetoriais clássicos  $\mathbf{S}_i$ .
- Realizar o estudo de universalidade com relação a outras formas de distribuições ( $\rho(J_{ij})$ ), como, por exemplo, para as distribuições triangulares, exponenciais e outras.
- Completar o trabalho através de um tratamento analítico.
- Estender o modelo de  $z$  vizinhos para temperaturas finitas.