

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO NORTE
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E DA TERRA
DEPARTAMENTO DE FÍSICA TEÓRICA E EXPERIMENTAL
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

O MODELO DE ISING INOMOGÊNICO: UMA INTERPOLAÇÃO CONTÍNUA
ENTRE AS REDES QUADRADA E TRIANGULAR

Leonardo Mafra Bezerril

*Dissertação realizada sob a orientação do Prof.
Dr. Ananias Monteiro Mariz, apresentada ao
Programa de Pós-Graduação em Física do De-
partamento de Física Teórica e Experimental
da UFRN em preenchimento parcial dos requi-
sitos para a obtenção do grau de Mestre em Fí-
sica.*

Natal, Setembro de 2007.

À minha esposa **Emanuella**, e aos meus **Pais**.

Agradecimentos

Em primeiro lugar a Deus por me abençoar nessa difícil jornada que apenas está começando;

Aos meus pais pelo suporte, carinho, amor e atenção sem medidas que me são dados desde criança;

À minha esposa, pelo amor e paciência dedicada ao longo desses dois anos de mestrado;

Ao professor Ananias Monteiro Mariz, pela orientação e apoio que me foram úteis na concretização deste trabalho;

Ao professor Fernando Dantas Nobre, pela co-orientação e pelas excelentes disciplinas ministradas a mim, enquanto professor do DFTE;

Aos professores Luciano Rodrigues, Rui Tertuliano, José Wilson, Dory Hélio e Artur Carriço, pela minha formação profissional;

Aos meus colegas, pelo suporte e companheirismo, em especial a Darlan Araújo Moreira e Antônio Soares dos Anjos Filho pelas proveitosas discussões e por me apresentarem às técnicas de simulações computacionais em geral;

Aos funcionários do Programa de Pós-Graduação em Física PPGF, em especial à Celina, pelos serviços prestados e amizade;

Ao CNPQ pelo apoio financeiro.

Resumo

Investigamos o diagrama de fases do modelo de Ising, com interações ferromagnéticas e antiferromagnéticas, em uma rede bidimensional inhomogênea caracterizada por duas constantes de troca (J_1 e J_2), a qual permite interpolar continuamente as redes quadrada ($J_2 = 0$) e triangular ($J_2 = J_1$) uniformes. Utilizando o método de simulação de Monte Carlo, através da dinâmica de Metropolis aplicada de forma seqüencial, calculamos a magnetização e a susceptibilidade para redes de diversos tamanhos e aplicando técnicas de escalonamento para tamanhos finitos obtemos, através de um colapso de dados, valores para a temperatura crítica e expoentes críticos em função do parâmetro $\alpha = \frac{J_2}{J_1}$, contido no intervalo $[0, 1]$.

No caso ferromagnético observamos que a temperatura crítica T_c cresce linearmente com α em todo o intervalo de variação deste parâmetro, enquanto no caso antiferromagnético, o comportamento linear (decrecente) de T_c é observado somente para pequenos valores de α ; no intervalo $[0.6, 1]$, onde os efeitos de frustração são mais pronunciados, a temperatura crítica sofre uma redução mais significativa, possivelmente não linear, para seu valor limite $T_c = 0$, que corresponde à rede triangular homogênea, antiferromagnética, completamente frustrada.

Abstract

The ferromagnetic and antiferromagnetic Ising model on a two dimensional inhomogeneous lattice characterized by two exchange constants (J_1 and J_2) is investigated. The lattice allows, in a continuous manner, the interpolation between the uniform square ($J_2 = 0$) and triangular ($J_2 = J_1$) lattices. By performing Monte Carlo simulation using the sequential Metropolis algorithm, we calculate the magnetization and the magnetic susceptibility on lattices of different sizes. Applying the finite size scaling method through a data collapse, we obtained the critical temperatures as well as the critical exponents of the model for several values of the parameter $\alpha = \frac{J_2}{J_1}$ in the $[0, 1]$ range.

The ferromagnetic case shows a linear increasing behavior of the critical temperature T_c for increasing values of α . In which concerns the antiferromagnetic system, we observe a linear (decreasing) behavior of T_c , only for small values of α ; in the range $[0.6, 1]$, where frustration effects are more pronounced, the critical temperature T_c decays more quickly, possibly in a non-linear way, to the limiting value $T_c = 0$, corresponding to the homogeneous fully frustrated antiferromagnetic triangular case.

Sumário

1	Introdução	1
2	Transições de Fases e o Método de Monte Carlo	4
2.1	Introdução	4
2.2	Teoria das Transições de Fases	5
2.3	Simulações de Monte Carlo	12
2.3.1	O algoritmo de Metropolis	17
2.4	Teoria de Escala para Tamanhos Finitos " <i>Finite Size Scaling</i> "	17
2.5	Conclusão	21
3	Frustração em Modelos de Spins	22
3.1	Introdução	22
3.2	A Física dos Vidros de Spins	22
3.2.1	O método das réplicas	26
3.3	Aplicações	30
3.4	Conclusão	31
4	O Modelo	32
4.1	Introdução	32
4.2	O modelo de Ising	32
4.2.1	Outras aplicações do modelo de Ising	35

Sumário

4.2.1.1	O modelo de gás de rede	35
4.2.1.2	Ordem-desordem em uma liga binária	36
4.3	A solução de Onsager	37
4.4	Introdução de frustrações em redes planares	41
5	Resultados	43
5.1	Caso ferromagnético	43
5.2	Caso antiferromagnético	52
6	Conclusões	60
	Referências Bibliográficas	62

Lista de Figuras

2.1	Diagrama de Fases de um fluido típico.	7
2.2	Linha de coexistência líquido-vapor.	8
2.3	Magnetização a campo nulo de um ferromagneto simples.	9
3.1	Frustração em dois sistemas de spins. (a) Sem frustração. (b) Com frustração.	24
4.1	Representação esquemática do modelo de Ising.	33
4.2	Representação esquemática do modelo do gás de rede.	36
4.3	Representação esquemática da rede utilizada.	42
5.1	Colapso de dados da Magnetização para $\alpha = 0$, caso ferromagnético. .	45
5.2	Colapso de dados da Suscetibilidade para $\alpha = 0$, caso ferromagnético.	46
5.3	Colapso de dados da Magnetização para $\alpha = 0.6$, caso ferromagnético.	47
5.4	Colapso de dados da Suscetibilidade para $\alpha = 0.6$, caso ferromagnético.	48
5.5	Colapso de dados da Magnetização para $\alpha = 1.0$, caso ferromagnético.	49
5.6	Colapso de dados da Suscetibilidade para $\alpha = 1.0$, caso ferromagnético.	50
5.7	Dependência da temperatura crítica com α , caso ferromagnético. . . .	51

Lista de Figuras

5.8	Colapso de dados da Magnetização da subrede para $\alpha = 0$, caso anti-ferromagnético.	53
5.9	Colapso de dados da Magnetização da subrede para $\alpha = 0.2$, caso anti-ferromagnético.	54
5.10	Colapso de dados da Magnetização da subrede para $\alpha = 0.4$, caso anti-ferromagnético.	55
5.11	Colapso de dados da Magnetização da subrede para $\alpha = 0.6$, caso anti-ferromagnético.	56
5.12	Dependência da temperatura crítica com α , caso antiferromagnético. .	57
5.13	Dependência da temperatura crítica com α , caso ferro e antiferromagnético.	58

Lista de Tabelas

4.1	Temperaturas críticas para as rede quadrada e triangular em unidades de J/k_B	40
4.2	Expoentes críticos para o modelo de Ising em duas dimensões.	41
5.1	Temperatura crítica para diversos valores do parâmetro α em unidades de J/k_B , caso ferromagnético.	44
5.2	Expoentes críticos para o caso ferromagnético.	44
5.3	Temperatura crítica para diversos valores do parâmetro α em unidades de J/k_B , caso antiferromagnético.	59
5.4	Expoentes críticos para o caso antiferromagnético.	59

1 Introdução

Os sistemas magnéticos [1, 2], fazem parte do mais amplo campo de investigação dos fenômenos críticos, por vários motivos:

(i) razões históricas, já que juntamente com os fluidos (Van der Waals), as teorias de Weiss e de Néel e o modelo de Ising se constituíram nos primeiros esforços consistentes de modelagem de um fenômeno crítico;

(ii) interesse científico, pois estes sistemas apresentam uma vasta gama de efeitos não triviais associados com suas propriedades críticas, que vão desde diferentes tipos de ordenamento (ferromagnetismo, antiferromagnetismo, fases moduladas, vidros de spins,...) passando por aplicações tecnológicas (por exemplo, o caso das magnetoresistências gigantes) até conexões com outras áreas de física como redes neurais (via vidros de spins), quase-cristais (super-redes magnéticas aperiódicas), fractais (observados na vizinhança do ponto crítico), entre outras conexões conhecidas;

(iii) acessibilidade para abordagens teóricas/computacionais, pois existem inúmeros modelos estatísticos de spins (localizados ou itinerantes) que são capazes de descrever, de forma adequada, as principais propriedades físicas destes sistemas, e para os quais são conhecidas inúmeras técnicas de investigação, quer teóricas (séries de altas e baixas temperaturas, campo médio, grupo de renormalização,...) quer computacionais (simulações de Monte Carlo).

Uma propriedade particularmente interessante que os sistemas magnéticos podem apresentar, é a frustração de spins [3–7], representada por uma multiplicidade de pos-

1 Introdução

sibilidades de orientação de spins (pois existem várias configurações energeticamente equivalentes) que pode ser provocadas por interações antiferromagnéticas puras ou combinadas com ligações ferromagnéticas e que são características (junto com a desordem) de certos materiais chamados vidros de spins, constituídos por impurezas magnéticas diluídas em um substrato não magnético. Entre os efeitos decorrentes da frustração, temos o aparecimento de uma enorme degenerescência do estado fundamental do sistema e tempos de relaxação extremamente longos, o que exige especial precaução no estudo de suas propriedades de equilíbrio termodinâmico.

Neste trabalho analisamos a introdução de frustração de uma forma contínua, utilizando como protótipo o modelo de Ising em duas dimensões numa rede interpolante, a qual simula, em seus casos limites, as redes quadrada e triangular. O comportamento crítico do sistema é estudado via "finite size scaling" [8–11], através da técnica conhecida como "data collapse". Apesar de tratar unicamente o modelo de Ising, a metodologia desenvolvida pode ser aplicada a outros modelos estatísticos como o modelo de Potts, Heisenberg, XY, etc. .

No próximo capítulo apresentamos, de forma breve, a teoria das transições de fases, bem como o método de simulação utilizado para a obtenção do diagrama de fases do sistema em estudo, o método de Monte Carlo. Salientamos os pontos mais importantes em uma transição de fases, exemplificando os possíveis comportamentos próximo do ponto crítico, juntamente com o tipo de dinâmica empregada para a evolução temporal do modelo. No capítulo 3, abordamos o conceito de frustração, vidros de spins e a relação deste com outra área crescente da mecânica estatística, as redes neurais. No capítulo 4, apresentamos o modelo de Ising propriamente dito, e a formulação estudada nesta dissertação. No capítulo 5, exibimos os resultados obtidos para o caso de um sistema ferromagnético e antiferromagnético, o comportamento da temperatura crítica com o aumento da frustração e os valores dos expoentes críticos.

1 Introdução

No Capítulo 6, finalmente expomos as conclusões principais e as expectativas para trabalhos posteriores.

2 Transições de Fases e o Método de Monte Carlo

2.1 Introdução

Muitos problemas em física teórica não são solúveis analiticamente e a utilização de simplificações no modelo estudado tornam-se essenciais embora exijam precauções metodológicas para evitar que os resultados obtidos apresentem discrepâncias significativas com os fatos observados no fenômeno estudado, as quais podem ser devido tanto à introdução artificial de aspectos físicos, como à não consideração de ingredientes essenciais ao sistema. Com o grande avanço do poder de processamento dos sistemas computacionais (e das técnicas computacionais em si), muitos problemas que antes eram intratáveis, como é o caso de certos fenômenos críticos, tornaram-se abordáveis e hoje são facilmente acessíveis à investigação científica. As "experiências" em computadores, ou simulações, permitem superar as limitações que algumas vezes são impostas nos modelos, para efeitos de resolução analítica, tornando os métodos de simulação computacional bastante adequados para a obtenção de informações desejadas, quer seja a respeito da validade de formulações teóricas, quer seja na comparação com dados experimentais. Uma das mais importantes técnicas de simulação computacional é, sem dúvida, a de Monte Carlo, a ser brevemente apresentada

neste capítulo, o qual se inicia com uma introdução às Transições de Fases e Fenômenos Críticos e finaliza apresentando os aspectos essenciais da Teoria de Escala para Tamanhos Finitos ("*Finte Size Scaling*"), que foram exploradas no trabalho desta dissertação.

2.2 Teoria das Transições de Fases

Transições de fases são comuns em uma grande variedade de sistemas macroscópicos, como fluidos, ligas metálicas, materiais magnéticos, supercondutores, etc.. Estas ocorrem quando há uma singularidade na energia livre ou em uma das suas derivadas, o que ocasiona mudanças bruscas globais do sistema, caracterizadas por comportamentos não analíticos de quantidades físicas, como calor específico, densidade, magnetização, suscetibilidade magnética, etc., provocadas por pequenas mudanças em pelo menos uma das variáveis termodinâmicas, como por exemplo a temperatura ou o campo magnético externo [12]. O ingrediente essencial para este fenômeno é a interação mútua entre suas partes microscópicas (átomos, moléculas, spins) que se potencializa em comportamentos não lineares responsáveis pelo aparecimento de tais singularidades (não analiticidade) nas funções termodinâmicas que representam o sistema.

As transições de fases podem ser classificadas (seguindo Ehrenfest) de acordo com a descontinuidade na derivada de menor ordem da energia livre. Assim se a primeira derivada da energia livre for descontínua temos uma transição de primeira ordem (a transição sólido-líquido, por exemplo), se a segunda derivada for descontínua a transição é dita de segunda ordem (como a transição líquido-gás em um de seus pontos extremos) e assim por diante. Uma classificação mais moderna é a que divide as transições em descontínuas (que apresentam calor latente não nulo e variação descontínua do parâmetro de ordem), ou contínuas (quando o calor latente e a variação

do parâmetro de ordem se anulam).

Como exemplo, consideremos o diagrama de fases de um fluido típico mostrado na Fig. 2.1. A medida que a pressão e temperatura variam, a substância em questão pode existir tanto como sólido, como líquido ou como vapor. Nota-se que as fases são separadas por fronteiras bem definidas, e que ao passarmos de uma fase para outra através de umas destas fronteiras há uma descontinuidade na densidade e no calor latente. Na Fig. 2.2, para a linha de coexistência líquido-vapor, nota-se que ao aumentarmos a temperatura as diferenças nas densidades da líquido e do vapor diminuem continuamente até atingirem zero a uma temperatura T_c , temperatura crítica. A partir deste ponto não há mais distinção entre as fases líquida e gasosa. É possível então, passar da fase líquida para a gasosa, ou vice-versa, de forma contínua. Este ponto especial é chamado de ponto crítico e na sua vizinhança diversas grandezas termodinâmicas apresentam um comportamento singular caracterizado por um conjunto de expoentes (expoentes críticos) [13–16].

Um outro exemplo é o ferromagneto simples, o qual perde sua magnetização espontânea ao ser aquecido acima de uma temperatura crítica T_c , denominada temperatura de Curie. Na Fig. 2.3 temos o comportamento típico da magnetização do ferromagneto como função da temperatura, na ausência de um campo externo. Neste caso existem duas fases ordenadas (simétricas com magnetizações iguais e de orientações opostas) das quais somente uma se concretiza. É possível notar que ao atravessarmos a fronteira que separa tais fases, (o que pode ser feito aplicando-se um pequeno campo externo e invertendo o seu sinal) à uma temperatura inferior a T_c , há uma mudança abrupta na magnetização. Para temperaturas superiores à T_c , somente a fase desordenada (de magnetização espontânea nula) se estabiliza. Vemos assim novamente outro exemplo de ponto crítico.

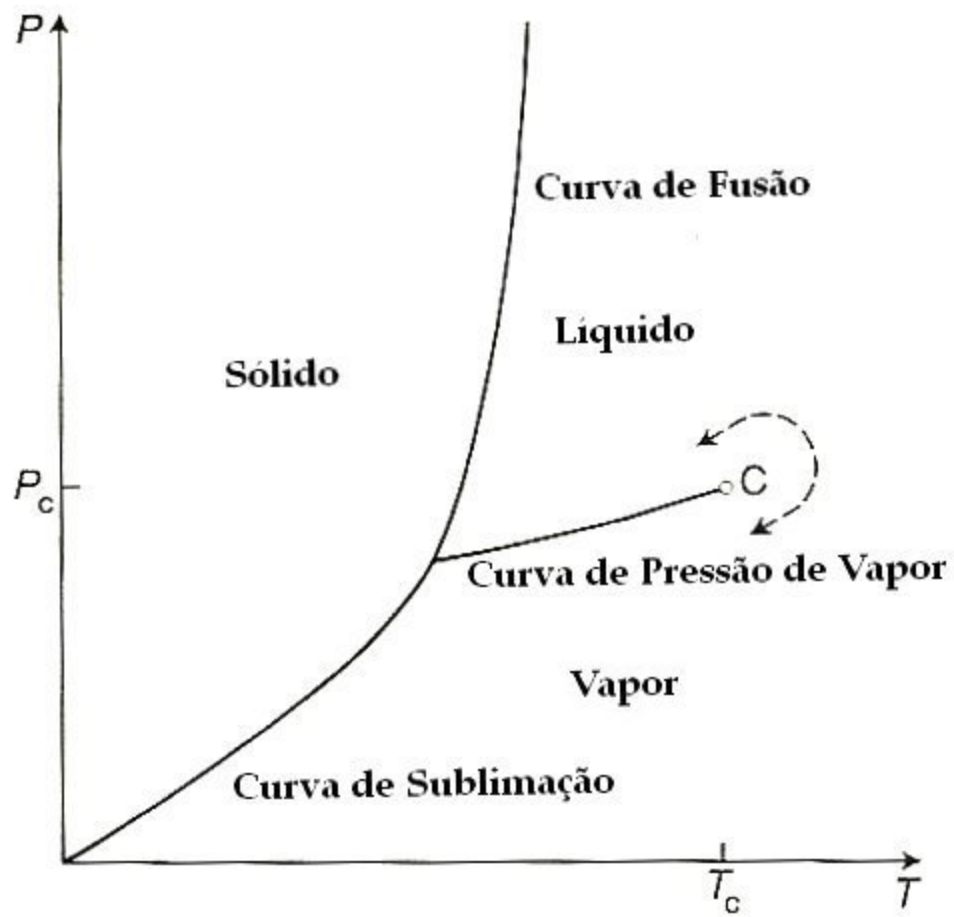


Figura 2.1: Diagrama de Fases de um fluido típico.

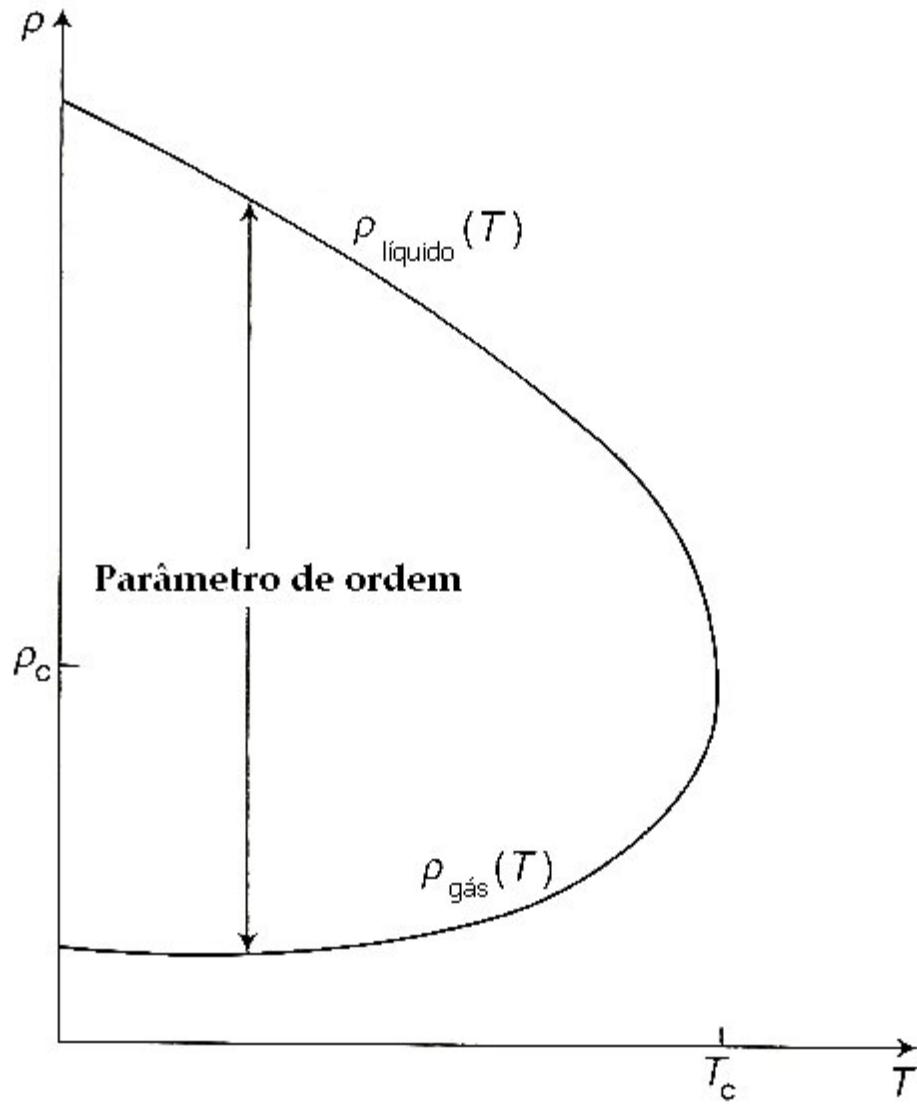


Figura 2.2: Linha de coexistência líquido-vapor.

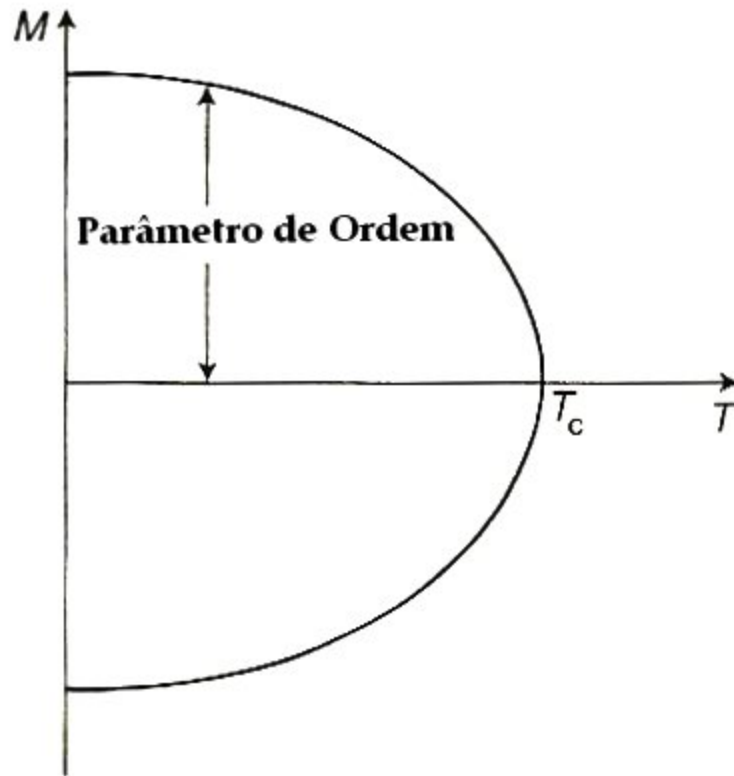


Figura 2.3: Magnetização a campo nulo de um ferromagneto simples.

Como foi observado anteriormente, existem algumas grandezas termodinâmicas que apresentam um certo valor não nulo para temperaturas inferiores a T_c e zero acima destas. Tais variáveis servem como parâmetros para descrever o comportamento do sistema perto da criticalidade. Grandezas que apresentam estas características são chamadas convenientemente de parâmetros de ordem. No caso de um fluido podemos tomar a diferença nas densidades das fases líquida e gasosa como o parâmetro de ordem para a transição líquido-gás, e no caso do ferromagneto simples a magnetização a campo nulo.

Outras grandezas relevantes são os expoentes críticos que descrevem a natureza

2 Transições de Fases e o Método de Monte Carlo

das singularidades de quantidades físicas mensuráveis nas vizinhanças do ponto crítico, sendo seis os principais expoentes denotados pelas seguintes letras gregas: α , β , γ , δ , η e ν . É comum definirmos a temperatura reduzida por [17]:

$$t = \frac{T - T_c}{T_c}, \quad (2.1)$$

a qual mede a "distância" que o sistema se encontra em relação ao ponto crítico.

Assim, para um sistema magnético no ponto crítico, representado por $t = \lim_{T \rightarrow T_c} \rightarrow 0$ e $H = 0$, é possível decompor qualquer quantidade termodinâmica em duas partes, uma "regular", a qual permanece finita e analítica, e outra parte "singular", a qual pode ser divergente, apresentar derivadas divergentes ou outros tipos de singularidades, que podem ser caracterizadas representando-se estas quantidades como potências de variáveis que medem a distância do ponto crítico, como t ou H .

Com efeito de introduzir as expressões para os principais expoentes críticos, vamos considerar um ferromagneto na presença de um campo externo H . Para tal sistema temos as seguintes relações [18]:

$$C \sim |t|^{-\alpha}, \quad H = 0, \quad (2.2)$$

$$M \sim (-t)^\beta, \quad H = 0 \quad T < T_c \quad (2.3)$$

$$\chi \sim |t|^{-\gamma}, \quad H = 0, \quad (2.4)$$

$$M \sim H^{1/\delta}, \quad t = 0, \quad (2.5)$$

2 Transições de Fases e o Método de Monte Carlo

$$\xi \sim |t|^{-\nu}, \quad H = 0, \quad (2.6)$$

$$G(r) \sim r^{d-2+\eta}, \quad t = H = 0, \quad (2.7)$$

onde,

M = magnetização do sistema,

C = calor específico,

χ = suscetibilidade,

ξ = comprimento de correlação,

$G(r)$ = função de correlação.

Na verdade, as equações que definem os expoentes críticos descritos, α , γ e ν devem ser escritas para $T < T_c$ e para $T > T_c$, resultando assim em dois expoentes críticos para algumas equações, ou seja, teríamos α e α' e assim por diante. Porém com a utilização da hipótese de escala de Widom e da teoria de grupo de renormalização (ver por exemplo [18, 19]) é possível mostrar que estes expoentes de mesma natureza são idênticos para $T > T_c$ e $T < T_c$.

A importância dos expoentes críticos encontra-se no fato de sua universalidade [20]. Diferentes sistemas termodinâmicos, com diferentes temperaturas críticas, apresentam um mesmo conjunto de expoentes críticos, como é o caso de fluidos simples e sistemas magnéticos uniaxiais, ou seja, tais sistemas pertencem à mesma classe de universalidade, a qual é caracterizada somente pela dimensionalidade do espaço e pela simetria do parâmetro de ordem. Porém, nem todos os expoentes são independentes; pode-se mostrar através de considerações termodinâmicas que estes expoentes obedecem à várias desigualdades, como por exemplo:

$$\alpha' + 2\beta + \gamma' \geq 2, \quad (2.8)$$

$$\alpha' + \beta(1 + \delta) \geq 2, \quad (2.9)$$

$$\gamma \geq \beta(\delta - 1), \quad (2.10)$$

$$dv' \geq 2 - \alpha, \quad (2.11)$$

$$dv \geq 2 - \alpha, \quad (2.12)$$

onde, nas duas últimas equações, d é a dimensionalidade do espaço.

Contudo, evidências experimentais mostravam que estas desigualdades deveriam ser satisfeitas como igualdades, o que foi justificado pela hipótese de escala.

2.3 Simulações de Monte Carlo

Considere o seguinte problema: como calcular as propriedades macroscópicas de um sistema a partir de suas propriedades microscópicas? Como exemplo suponha que queiramos calcular a pressão P de um gás encerrado em um recipiente de volume V . O número típico de moléculas neste sistema é da ordem de 10^{23} partículas, de forma que, em princípio, teríamos que escrever um número igual de equações de movimento acopladas e resolvê-las para obter a evolução do sistema e então calcularmos os observáveis correspondentes às grandezas macroscópicas. Como pode-se notar esta forma de abordar o problema é inviável. Uma outra tentativa é a de supor que o sistema em estudo é ergódico e então aplicarmos as técnicas da mecânica estatística para obtermos a função de partição do sistema e assim através desta calcularmos os observáveis desejáveis. Porém, são poucos os casos em que a função de

partição pode ser calculada analiticamente. Poderíamos pensar em tentar resolver este problema utilizando algum método numérico de resolução de equações diferenciais, mas logo esta tentativa se mostra desastrosa. Há essencialmente um método numérico mais efetivo, capaz de calcular as funções termodinâmicas de um sistema com tantos graus de liberdade, e este método é conhecido como Simulação de Monte Carlo.

São conhecidos como métodos de Monte Carlo uma grande classe de algoritmos computacionais para a simulação do comportamento de diversos sistemas físicos e matemáticos, que têm como característica comum o fato de serem métodos estocásticos, ou seja, não determinísticos (apesar do uso de equações de evolução temporal bem definidas) que simulam aspectos randômicos (como as flutuações térmicas) pelo uso de variáveis aleatórias (pseudo-aleatórias, para ser mais preciso) [21–24]. O método de Monte Carlo é bastante útil no estudo de sistemas com muitos graus de liberdades, como por exemplo líquidos, materiais desordenados, estruturas celulares, sistemas magnéticos, polímeros, etc.. Tal procedimento nos permite obter os observáveis desejados, quer acompanhando sua evolução temporal e as propriedades de relaxação que lhe são associadas, quer seus valores finais de equilíbrio (nos quais estamos interessados neste trabalho), através de cálculos de médias termodinâmicas sobre um conjunto de configurações (trajetórias) no espaço de fase do sistema em questão, onde somente as configurações mais importantes (as que aparecem com maior probabilidade) são consideradas para as médias. Resta-nos agora saber como gerar tais configurações e como calcular tais médias.

A média de um grandeza física Q é definida no contexto da mecânica estatística como:

$$\langle Q \rangle = \frac{\sum_{\mu} Q_{\mu} \exp(-\beta E_{\mu})}{\sum_{\mu} \exp(-\beta E_{\mu})}, \quad (2.13)$$

com a probabilidade de ocorrência do estado μ dada pelo peso de Boltzmann, onde

2 Transições de Fases e o Método de Monte Carlo

$\beta = \frac{1}{k_B T}$, k_B representa a constante de Boltzmann e E_μ a energia do sistema no estado μ . Note que na Eq. (2.33) o somatório é realizado sobre todos os estados possíveis μ . Como pode-se perceber facilmente para sistemas grandes isto não é possível, do ponto de vista computacional, uma vez que o número de estados acessíveis é enorme. O que o método de Monte Carlo faz é realizar uma amostragem de M estados $\{\mu_1 \cdots \mu_M\}$, dentre todos os possíveis estados, de forma aleatória com uma dada probabilidade p_μ específica. Dessa forma nossa melhor estimativa para Q é dada por:

$$\langle Q_M \rangle = \frac{\sum_{i=1}^M Q_{\mu_i} p_{\mu_i}^{-1} \exp(-\beta E_{\mu_i})}{\sum_{i=1}^M p_{\mu_i}^{-1} \exp(-\beta E_{\mu_i})}, \quad (2.14)$$

onde Q_M é chamado de estimador de Q .

Como já dito anteriormente, apenas alguns estados vão contribuir mais apreciavelmente para o cálculo da média de Q . Vamos escolher então um conjunto de estados M cuja probabilidade de ocorrência de um dado estado μ_i seja dada por:

$$p_{\mu_i} = Z^{-1} \exp(-\beta E_{\mu_i}). \quad (2.15)$$

Esta forma de amostragem em que apenas as configurações mais importantes são utilizadas é conhecida como "*Importance Sampling*" [25]. Utilizando a Eq. (2.15) na Eq. (2.14) vemos que a média da grandeza Q é dada por uma simples média aritmética:

$$Q_M = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M Q_{\mu_i}. \quad (2.16)$$

Para que a Eq. (2.16) nos forneça um valor confiável ainda precisamos saber como gerar uma configuração de M estados com a probabilidade de ocorrência dada pela Eq. (2.15). O processo utilizado para gerar tal configuração é conhecido como processo de Markov.

2 Transições de Fases e o Método de Monte Carlo

Formalmente um processo markoviano é aquele em que a probabilidade de transição de um estado μ para ν , conhecida como probabilidade de transição $P(\mu \rightarrow \nu)$, satisfaz as seguintes condições [26–29]: não varia com o tempo e, depende apenas das propriedades dos estados atuais μ e ν , ou seja, os estados anteriores são irrelevantes para a predição dos estados seguintes, desde que o estado atual seja conhecido. Esta última propriedade é conhecida como memória markoviana.

Na simulação de Monte Carlo utilizamos repetidos processos de Markov para gerar uma cadeia de Markov de estados. Assim, a partir de um estado μ , utilizamos este estado para gerar outro estado ν que utilizamos para gerar outro estado λ e assim por diante. O processo markoviano é escolhido de tal forma que, para um longo tempo computacional, as probabilidades de ocorrência de um dado estado tendem para uma distribuição de Boltzmann (quando o sistema atinge o equilíbrio termodinâmico). Para que a condição de equilíbrio termodinâmico seja atingida impomos duas condições sobre o processo markoviano: que este seja ergódico e que satisfaça a condição conhecida como "balanceamento detalhado".

A condição ergódica é a imposição de que a partir de um dado estado seja possível, para nosso processo markoviano, alcançar qualquer outro, para um longo tempo computacional (exceto um conjunto de medida nula). Já a condição de balanceamento detalhado é a que assegura que após um longo tempo obtemos uma distribuição de Boltzmann para a probabilidade de ocorrência de um dado estado. A equação que governa a evolução temporal dos processos markovianos é chamada de equação mestra [30]. Esta é definida como:

$$\frac{\partial p_\mu(t)}{\partial t} = \sum_\nu [p_\nu P(\nu \rightarrow \mu) - p_\mu P(\mu \rightarrow \nu)]. \quad (2.17)$$

Nos estados estacionários, a probabilidade $p_\mu(t)$ não deve ser função explícita do tempo, ou seja,

$$\frac{\partial p_\mu(t)}{\partial t} = 0, \quad (2.18)$$

na situação de equilíbrio. Note que uma condição suficiente para que o equilíbrio seja atingindo é dada pela Eq. (2.17) com a imposição dada pela Eq. (2.18), esse é o chamado de princípio do balanceamento detalhado:

$$p_\mu P(\mu \rightarrow \nu) = p_\nu P(\nu \rightarrow \mu). \quad (2.19)$$

Fisicamente a Eq. (2.19) nos diz que, no equilíbrio, devemos ter o mesmo número de transições do estado μ para ν ou na direção contrária. Assim, como desejamos que, no equilíbrio, a distribuição de probabilidades seja uma distribuição de Boltzmann, devemos escolher os p_μ como sendo os pesos de Boltzmann. Dessa forma a equação do balanço detalhado nos diz que:

$$\frac{P(\mu \rightarrow \nu)}{P(\nu \rightarrow \mu)} = \exp[-\beta(E_\nu - E_\mu)]. \quad (2.20)$$

A Eq. (2.20) é o vínculo que garante as condições de ergodicidade e uma distribuição de Boltzmann no equilíbrio. Assim uma vez escolhida um probabilidade de transição que satisfaça a Eq. (2.20), implementaremos um algoritmo que gere cadeias de Markov com a dada probabilidade de transição. Porém este vínculo nos deixa ainda, de certa forma, à vontade para a escolha da probabilidade de transição. Esta será exposta na subseção seguinte, quando definirmos a dinâmica utilizada nas simulações.

2.3.1 O algoritmo de Metropolis

Um dos algoritmos mais importantes utilizados na geração de cadeias de Markov é o conhecido como algoritmo de Metropolis [31–36], criado por Nicolas Metrópolis *et al.* em 1953 [37]. Para gerar um dado estado ν a partir de outro estado μ procede-se da seguinte forma. Calcula-se as energias dos referentes estados, se a variação da energia ($\Delta E = E_\nu - E_\mu$) for negativa, então a nova configuração é prontamente aceita, uma vez que estamos nos dirigindo para um estado de menor energia; se, ao contrário, a variação é positiva, a nova configuração é aceita com probabilidade proporcional à $\exp[-\beta(E_\nu - E_\mu)]$. Em outras palavras, podemos tomar a probabilidade de transição de um estado μ para o estado ν como sendo dada por:

$$P(\mu \rightarrow \nu) = \begin{cases} \exp[-\beta(E_\nu - E_\mu)], & \text{se } E_\nu > E_\mu \\ 1, & \text{se } E_\nu < E_\mu \end{cases}. \quad (2.21)$$

A implementação deste algoritmo em simulações é bastante simples, sendo esta uma das razões do seu grande sucesso.

2.4 Teoria de Escala para Tamanhos Finitos "*Finite Size Scaling*"

O método de Escala para Tamanhos Finitos, ou "*Finite Size Scaling*", é um método extrapolativo que nos permite obter grandezas físicas no limite termodinâmico ($N \rightarrow \infty$), e nas proximidades do ponto crítico a partir de extrapolações feitas de seus valores medidos em sistemas de diferentes tamanhos L finitos [38–40]. Neste método não precisamos conhecer aprioristicamente a temperatura crítica, como em outros métodos extrapolativos, a qual é obtida ao aplicarmos esta técnica. Para ilustrar o método vejamos como obter o expoente γ da suscetibilidade definida na Eq.

(2.4). Eliminando $|t|$ entre as Eqs. (2.4) e (2.6) temos [41]:

$$\chi \sim \xi^{\gamma/\nu}. \quad (2.22)$$

O comprimento de correlação apresenta divergência quando nos aproximamos da temperatura crítica, em sistemas de tamanho infinito, o que implica que a suscetibilidade também apresentará um comportamento semelhante. Porém, para sistemas de tamanho finito, nem o comprimento de correlação nem a suscetibilidade apresentam tal divergência. Podemos representar matematicamente tal comportamento da seguinte forma. Seja ξ o comprimento de correlação para um sistema de tamanho infinito a temperatura t , assim a divergência ocorre quando $\xi > L$. Contudo que $\xi \ll L$, o valor de χ deve ser o mesmo que ele apresentaria para um sistema de tamanho infinito. Podemos expressar isto da seguinte forma:

$$\chi = \xi^{\gamma/\nu} \chi_0(L/\xi), \quad (2.23)$$

onde χ_0 é uma função adimensional de uma variável, a qual apresenta as seguintes propriedades:

$$\chi_0(x) = \text{constante} \quad \text{para } x \gg 1, \quad (2.24)$$

e

$$\chi_0(x) \sim x^{\gamma/\nu} \quad \text{para } x \rightarrow 0. \quad (2.25)$$

A Eq. (2.23) contém toda a informação necessária a respeito do comportamento do nosso sistema em função do seu tamanho L . Porém, esta contém o termo ξ o qual ainda não temos conhecimento. Por esse motivo é conveniente reorganizar a equação de forma a eliminarmos esta dependência. Definindo uma nova função adimensional

$\tilde{\chi}$,

$$\tilde{\chi}(x) = x^{-\gamma/\nu} \chi_0(x^\nu), \quad (2.26)$$

e utilizando a Eq. (2.6) obtemos:

$$\chi = L^{\gamma/\nu} \tilde{\chi}(L^{1/\nu} |t|). \quad (2.27)$$

Na verdade, deveríamos ter duas equações como a Eq. (2.27), uma para t positivo e outra para t negativo. Porém podemos estender a definição da Eq. (2.27) de forma a atender ambos os casos da seguinte maneira:

$$\chi = L^{\gamma/\nu} \tilde{\chi}(L^{1/\nu} t). \quad (2.28)$$

Dessa forma a Eq. (2.28) nos mostra como a suscetibilidade deve variar como o tamanho do sistema L para sistemas finitos próximo da temperatura crítica. A Eq. (2.28) apresenta uma função desconhecida $\tilde{\chi}(x)$ a qual é chamada de função de escala para a suscetibilidade. Apesar de não conhecermos sua forma explícita, conhecemos algumas das suas propriedades como:

$$\tilde{\chi}(x) \rightarrow x^{-\gamma} (x^\nu)^{\gamma/\nu} = \text{constante} \quad \text{para } x \rightarrow 0. \quad (2.29)$$

Outro ponto importante na Eq. (2.28) é que toda dependência em L aparece de forma explícita, ou seja, se medirmos $\tilde{\chi}(x)$ deveremos obter o mesmo resultado independentemente do tamanho do sistema. É este último fato que nos permite obter os expoentes γ , ν e o valor da temperatura crítica T_c .

Suponha agora que tenhamos realizado uma série de simulações de Monte Carlo, sobre uma faixa de temperaturas na qual inferimos que se encontra o ponto crítico, e tenhamos obtido vários valores de suscetibilidade para diferentes tamanhos do sis-

tema, ou seja, para cada L medimos $\chi_L(t)$ para varios valores de t . Invertendo a Eq. (2.28) obtemos:

$$\tilde{\chi}(L^{1/\nu}t) = L^{-\gamma/\nu}\chi_L(t), \quad (2.30)$$

e temos uma estimativa da função de escala $\tilde{\chi}$ para diferentes valores da variável de escala:

$$x = L^{1/\nu}t. \quad (2.31)$$

Uma vez que a função de escala é suposta ser a mesma para todos os tamanhos do sistema, estas estimativas devem coincidir nas proximidades do ponto crítico, ou seja, todas coalescem em uma mesma curva se superpormos os gráficos. Contudo, e este é o ponto crucial desta técnica, isso apenas ocorrerá se na Eq. (2.30) utilizarmos os valores corretos dos expoentes γ e ν , bem como o valor de T_c que está embutido na definição da temperatura reduzida t . Assim, a idéia central por trás desta técnica é calcular $\tilde{\chi}(x)$ para diferentes tamanhos L , e em seguida variar os parâmetros γ e ν e a temperatura crítica até que as curvas resultantes colapsem umas com as outras.

Este método pode ser facilmente extendido para outras grandezas termodinâmicas, como o calor específico e a magnetização do sistema, levando às seguintes relações de escala:

$$C = L^{\alpha/\nu}\tilde{C}(L^{1/\nu}t), \quad (2.32)$$

$$m = L^{-\beta/\nu}\tilde{m}(L^{1/\nu}t). \quad (2.33)$$

Invertendo as Eqs. (2.32) e (2.33) obtemos:

$$\tilde{C}(L^{1/\nu}t) = L^{-\alpha/\nu}C_L(t), \quad (2.34)$$

$$\tilde{m}(L^{1/\nu}t) = L^{\beta/\nu}m_L(t). \quad (2.35)$$

Dessa forma, realizando o colapso de dados utilizando as Eqs. (2.28), (2.34) e (2.35) podemos determinar os expoentes críticos bem como a temperatura crítica e testar a consistência destes resultados, uma vez que as temperaturas críticas, assim como o expoente ν , encontrados a partir de cada uma destas equações devem ser os valores esperados (a menos da barra de erro).

2.5 Conclusão

Neste capítulo fizemos uma explanação sucinta a respeito da Teoria de Transições de Fases e Fenômenos Críticos e como tais fenômenos são caracterizados nas vizinhanças da criticalidade por um conjunto de expoentes, bem como a relação de dependência que os expoentes críticos apresentam entre si, no caso de sistemas magnéticos (sistema típico desta dissertação). Discutimos também o método de Monte Carlo para simulação de um sistema físico e como este deve ser aplicado, postergando sua implementação para um capítulo posterior, onde será descrito o modelo. E, por fim, apresentamos também uma breve introdução à Teoria de Escala para Tamanhos Finitos ("*Finte Size Scaling*"), utilizada para obtenção dos expoentes críticos e da temperatura crítica do modelo em estudo.

3 Frustração em Modelos de Spins

3.1 Introdução

O sucesso no entendimento do comportamento coletivo de materiais magnéticos convencionais aumentou o interesse por sistemas que exibem outros tipos de ordenamento, como por exemplo, aqueles que apresentam desordem e/ou interações competitivas. De particular relevância é o fenômeno de frustração que ocorre em sistemas magnéticos quando não há uma direção única para o spin se orientar a fim de minimizar a energia do sistema, o que pode provocar a presença de múltiplos estados fundamentais. Um exemplo de material desordenado com frustração magnética é o vidro de spins que apresenta, como consequência da frustração, comportamentos inesperados à baixas temperaturas devido ao alto grau de degenerescência do estado fundamental. A frustração pode ser encontrada também em um sistema, que à primeira vista, não apresenta nenhuma correlação com o tema, como é o caso de redes neurais. Na próxima seção vamos descrever brevemente o problema do vidro de spins e, em seguida, apresentar brevemente alguns exemplos de aplicações.

3.2 A Física dos Vidros de Spins

Os vidros de spins despertaram um grande interesse na comunidade científica desde a sua descoberta nos anos 70 (ver por exemplo [42–45]), quando medidas expe-

3 Frustração em Modelos de Spins

rimentais da susceptibilidade em uma liga metálica com impurezas magnéticas apresentaram um pico a uma certa temperatura, sugestiva de uma transição de fases, além de também exibir propriedades de relaxação muito pronunciadas, indicando a existência de longos tempos de termalização. Desde então os físicos vêm buscando uma teoria capaz de explicar este fenômeno. A forma apresentada pela susceptibilidade acontece também em sistemas antiferromagnéticos, fato este que sugere uma transição de fase de segunda ordem. Contudo, o sistema estudado não se tratava de um antiferromagneto, pois observou-se que a magnetização local era diferente de zero, sendo apenas a magnetização global nula. Esses domínios magnéticos são formados graças às interações entre os spins e às impurezas, interações tais que são randômicas em sinais, o que significa que os spins estão competindo entre si [46–48].

Existem uma grande variedade de modelos que podem ser usados para caracterizar os vidros de spin [49, 50]. Um dos mais simples, e mais geral, é sem dúvida derivado do modelo de Ising o qual pode ser representado pelo seguinte Hamiltoniano [51]:

$$\mathcal{H} = - \sum_{i < j}^N J_{ij} S_i S_j. \quad (3.1)$$

Este consiste de um conjunto de N spins de Ising (momentos magnéticos localizados), representado por $\{S_i\}$ ($i = 1, 2, \dots, N$), os quais podem assumir os valores ± 1 . Os spins são localizados nos vértices de algum tipo de rede (quadrada, triangular, cúbica, etc), rotulados pelo índice i . J_{ij} é uma matriz aleatória que representa as energias de acoplamento (ou energias de interação spin-spin) e, no caso de vidros de spins, deve apresentar os dois aspectos físicos destes sistemas: desordem e competição, ou seja, valores positivos e negativos distribuídos segundo alguma distribuição de probabilidades, simétrica em relação à origem, $\langle J_{ij} \rangle = 0$. Uma rápida inspeção da Eq. (3.1) nos mostra que no caso $J_{ij} > 0$ a energia será minimizada se os spins interagentes estiverem orientados paralelamente, enquanto no caso $J_{ij} < 0$ esta condição é

3 Frustração em Modelos de Spins

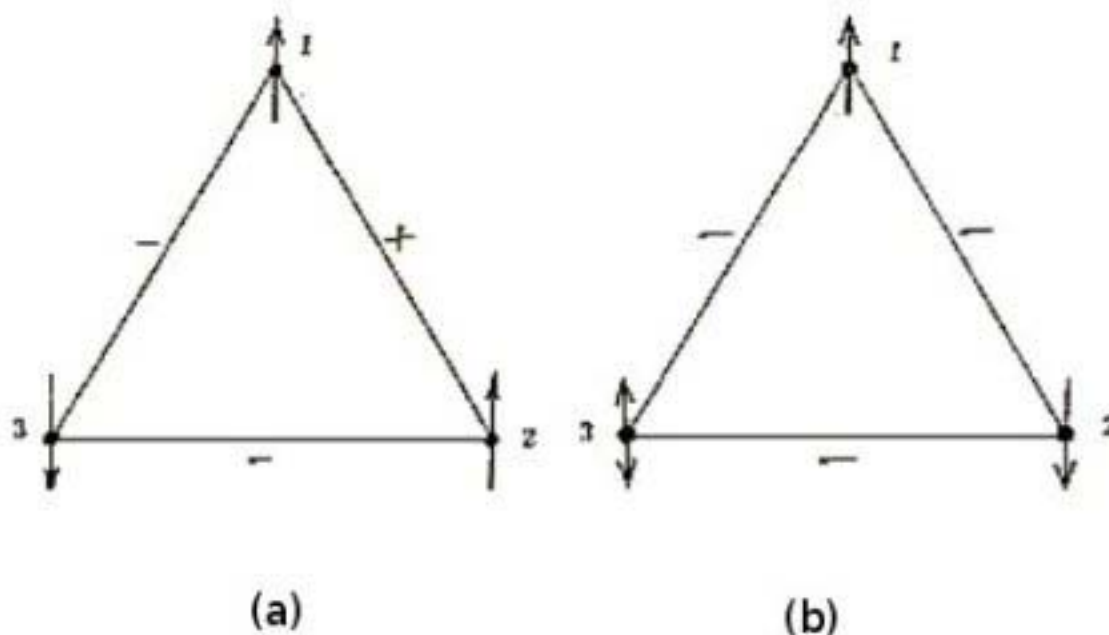


Figura 3.1: Frustração em dois sistemas de spins. (a) Sem frustração. (b) Com frustração.

satisfeita quando os spins estiverem orientados antiparalelamente.

Podemos analisar o efeito provocado por uma dada distribuição (que é mantida fixa) das energias de acoplamento J_{ij} , considerando uma célula elementar, plaqueta, com três spins interagindo de acordo com a Fig. 3.1, de tal modo que as interações sejam iguais em módulo porém diferentes apenas em sinais, ou seja, $J_{ij} = \pm J$. Note que se as três interações J_{12} , J_{23} e J_{13} forem todas positivas, ou duas delas negativas e a outra positiva (o que acontece se o produto dos sinais das interações ao longo do triângulo for positivo), então o estado fundamental de tal configuração de spins será único, a menos da inversão global dos sinais de todos os spins.

Entretanto, se o produto dos sinais das interações ao longo do triângulo for negativo, o que ocorre se apenas uma interação é negativa ou com todas três interações negativas, o estado fundamental será degenerado. Como exemplo, podemos fixar o

3 Frustração em Modelos de Spins

primeiro spin com orientação para cima, então se percorremos o triângulo no sentido horário o segundo spin deve se orientar para baixo (a fim de minimizarmos a energia), enquanto a orientação do terceiro spin permanece indefinida: uma vez que com $J_{23} < 0$, este deveria estar orientado para cima, e de acordo com $J_{13} < 0$, orientado para baixo. Este fenômeno também ocorre numa cadeia fechada de spins, com um número arbitrário de constituintes, no qual o produto das interações ao longo da cadeia tem sinal negativo. A este fenômeno chamamos de frustração topológica, pois é introduzido pela topologia do sistema. Assim, para medirmos a frustração no interior de um contorno fechado de ligações Ω , utilizamos a função frustração [52, 53],

$$\Phi = \prod_{\Omega} \text{sign}(J_{ij}), \quad (3.2)$$

a qual nos permite dizer se o contorno é frustrado, representado por $\Phi = -1$, ou não, $\Phi = 1$.

Devido à aleatoriedade das interações spin-spin J_{ij} , a magnetização por spin do sistema, definida por

$$m = \frac{1}{N} \sum_i \langle S_i \rangle, \quad (3.3)$$

é nula na fase vidro de spins, enquanto a quantidade,

$$q = \frac{1}{N} \sum_i \langle S_i \rangle^2, \quad (3.4)$$

é diferente de zero. A notação $\langle \dots \rangle$ representa aqui a média térmica e a quantidade definida pela Eq. (3.4) é chamada de parâmetro de ordem de Edwards-Anderson. Como uma proposta de campo médio para vidros de spins, temos o modelo de Sherrington e Kirkpatrick (SK), com interações de alcance infinito, ou seja, todos os spins interagem entre si segundo uma mesma distribuição de probabilidades pré-estabelecida.

3.2.1 O método das réplicas

A obtenção das propriedades físicas do sistema pode ser feita através do chamado método de réplicas, que consiste em usar a seguinte identidade matemática:

$$\ln y = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{(y^n - 1)}{n},$$

substituindo y por Z , onde Z é a função de partição do sistema. Assim, seja um sistema de spins descrito pelo Hamiltoniano $\mathcal{H}[\mathcal{J}; \mathcal{S}]$, o qual depende das variáveis de spin $\{S_i\}$ e das energias de interação spin-spin $\{J_{ij}\}$ (como por exemplo a Eq. (3.1)). Do formalismo geral da Mecânica Estatística, sabemos que a energia livre do sistema é dada por:

$$F[J] = -\frac{1}{\beta} \ln Z[J], \quad (3.5)$$

onde

$$Z[J] = \sum_{\{S_i\}} \exp(-\beta H[J; S]) \quad (3.6)$$

é a função de partição do sistema para uma dada realização de interações. No modelo de Sherrington Kirkpatrick as interações spin-spin J_{ij} são descritas pela seguinte distribuição gaussiana,

$$P[J_{ij}] = \sqrt{\frac{N}{2\pi}} \exp\left(-\frac{J_{ij}^2 N}{2}\right), \quad (3.7)$$

de onde vemos que:

$$\langle J_{ij} \rangle_J = 0; \quad \langle J_{ij}^2 \rangle_J = \frac{1}{N}, \quad (3.8)$$

com a média configuracional da quantidade "... " dada por:

$$\langle \dots \rangle_J \equiv \int DJ P[J](\dots),$$

3 Frustração em Modelos de Spins

$$= \sqrt{\frac{N}{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dJ_{ij} \exp \left[-\frac{1}{2} J_{ij}^2 N \right] (\dots). \quad (3.9)$$

A interpretação física do modelo sugerida é que este consiste de um conjunto de n réplicas do sistema, e para a obtenção das propriedades termodinâmicas corretas deve-se tomar o limite do número de réplicas tendendo a zero, e em seguida o limite termodinâmico, número de constituintes (neste caso, número de spins) N tendendo a infinito.

Neste caso, quando as interações J_{ij} são temperadas (do inglês "quenched"), a energia livre termodinâmica deve ser obtida através da média sobre a função de partição, ou seja:

$$F \equiv -\frac{1}{\beta} \langle \ln Z \rangle_J. \quad (3.10)$$

A função de partição do sistema é calculada da seguinte forma: como será necessário a utilização da função de partição elevada a uma potência inteira n , considerando n réplicas independentes do sistema, segue-se que:

$$\begin{aligned} Z^n &= \sum_{\{S_i^{a=1}\}} \exp \left[\beta \sum_{i<j} J_{ij} S_i^{a=1} S_j^{a=1} \right] \cdots \sum_{\{S_i^{a=n}\}} \exp \left[\beta \sum_{i<j} J_{ij} S_i^{a=n} S_j^{a=n} \right], \\ &= \prod_{a=1}^n \sum_{\{S_i^a\}} \exp \left(\beta \sum_{a=1}^n \sum_{i<j} J_{ij} S_i^a S_j^a \right), \end{aligned} \quad (3.11)$$

onde o índice a rotula as réplicas.

Vamos agora calcular a função de partição para o sistema em questão. Antes, porém, definimos a função de partição das réplicas por:

$$Z_n \equiv \langle Z^n \rangle_J. \quad (3.12)$$

Com auxílio das Eqs. (3.9) e (3.11), e lembrando que devemos aplicar a mesma

3 Frustração em Modelos de Spins

distribuição de probabilidades à todos os $\{J_{ij}\}$, em todas as réplicas, temos que:

$$Z_n = \int_{-\infty}^{+\infty} \cdots \int_{-\infty}^{+\infty} \prod_{i<j} \left[\sqrt{\frac{N}{2\pi}} dJ_{ij} \exp\left(-\frac{1}{2}J_{ij}^2 N\right) \right] \prod_{a=1}^n \sum_{\{S_i^a\}} \exp\left(\beta \sum_{a=1}^n \sum_{i<j} J_{ij} S_i^a S_j^a\right),$$

$$= \prod_{a=1}^n \sum_{\{S_i^a\}} \int_{-\infty}^{+\infty} \cdots \int_{-\infty}^{+\infty} \prod_{i<j} \left[\sqrt{\frac{N}{2\pi}} dJ_{ij} \exp\left(-\frac{1}{2}J_{ij}^2 N\right) \right] \exp\left(\beta \sum_{a=1}^n J_{ij} S_i^a S_j^a\right). \quad (3.13)$$

A integral sobre os J_{ij} pode ser efetuada utilizando:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx \exp[-(\alpha x^2 + \gamma x)] = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \exp\left(\frac{\gamma^2}{4\alpha}\right)$$

e então,

$$I = \int_{-\infty}^{+\infty} \prod_{i<j} \left\{ \left[\sqrt{\frac{N}{2\pi}} dJ_{ij} \right] \exp\left[\beta \sum_{a=1}^n J_{ij} S_i^a S_j^a - \frac{1}{2}J_{ij}^2 N\right] \right\}$$

pode ser calculada para cada acoplamento J_{ij} , identificando,

$$\alpha = N/2, \quad \gamma = -\beta \sum_{a=1}^n S_i^a S_j^a, \quad (3.14)$$

de tal maneira que:

$$I = \prod_{i<j} \exp\left[\frac{\beta^2 \left(\sum_{a=1}^n S_i^a S_j^a\right)^2}{2N}\right].$$

Logo a função de partição é dada por:

$$Z_n = \prod_{a=1}^n \sum_{\{S_i^a\}} \exp\left[\frac{\beta^2 \sum_{i<j} \left(\sum_{a=1}^n S_i^a S_j^a\right)^2}{2N}\right]. \quad (3.15)$$

3 Frustração em Modelos de Spins

A Eq. (3.15) pode ser reescrita da seguinte forma:

$$Z_n = \prod_{a=1}^n \sum_{\{S_i^a\}} \exp \left[\frac{1}{4} \beta^2 N n + \frac{\beta^2 N}{2} \sum_{a < b}^n \left(\frac{1}{N} \sum_i^N S_i^a S_i^b \right)^2 \right]. \quad (3.16)$$

Introduzindo a matriz de réplica Q_{ab} através da seguinte equação:

$$Z_n = \prod_{a < b} \int dQ_{ab} \sum_{\{S_i^a\}} \exp \left[\frac{1}{4} \beta^2 N n - \frac{\beta^2 N}{2} \sum_{a < b}^n Q_{ab}^2 + \beta^2 \sum_{a < b}^n \sum_i^N Q_{ab} S_i^a S_i^b \right], \quad (3.17)$$

onde

$$Q_{ab} = \frac{1}{N} \sum_i^N \langle S_i^a S_i^b \rangle, \quad (3.18)$$

pode-se mostrar que a energia livre por spin é dada por:

$$f = -\frac{1}{4} \beta + \lim_{n \rightarrow 0} \left\{ \frac{\beta}{2n} \sum_{a < b}^n Q_{ab}^2 - \frac{1}{\beta n} \ln \left[\sum_{\{S_a\}} \exp \left(\beta^2 \sum_{a < b}^n Q_{ab} S_a S_b \right) \right] \right\}. \quad (3.19)$$

O problema que nos resta é calcular a matriz Q_{ab} a fim de obtermos a energia livre, e assim tomarmos o limite do número de réplicas tendendo a zero. Porém este procedimento pode ser bastante complicado. No caso da aproximação de simetria entre réplicas, onde $Q_{ab} = q$, para todo $a \neq b$, tal análise é simples, com q dado pela condição $\frac{\delta f}{\delta Q_{ab}} = 0$, ou seja:

$$q = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dz}{\sqrt{2\pi}} \exp \left(-\frac{1}{2} z^2 \right) \tanh^2(\beta \sqrt{q} z). \quad (3.20)$$

De acordo com a Eq. (3.19), a solução obtida é o parâmetro de ordem $q(T)$:

$$q = \frac{1}{N} \sum_i^N \langle S_i \rangle^2. \quad (3.21)$$

3.3 Aplicações

Os conceitos que surgem no estudo de vidros de spin têm encontrado aplicações em diversas áreas da ciência, como ciência da computação, redes neurais, dinâmica conformacional de proteínas, etc. Nesta seção vamos comentar brevemente como o conceito de vidro de spins pode ser aplicado ao estudo de redes neurais. Existem duas razões básicas para tal associação. A primeira deve-se ao fato de que vidros de spins apresentam muitos estados de mínimos de energia, uma combinação de estabilidade e diversidade. Tal comportamento é bastante desejável no processo de associação e classificação da memória. A segunda origina-se nas influências conflitantes entre os momentos magnéticos, característica intrínseca de sistemas neurais [54].

Assim como exposto anteriormente, vidros de spins são sistemas extremamente complexos caracterizados por um grande número de estados estáveis e meta-estáveis. Se fizermos a associação de cada um destes estados com uma informação memorizada, tal sistema pode ser utilizado como memórias associativas [55]. Dessa forma o modelo de vidro de spins passa então a ser chamado de rede de neurônios. Podemos representar, ainda que de forma ingênua, um neurônio biológico como sendo um elemento lógico capaz de assumir apenas dois estados possíveis, ativo ou inativo, ou em representação binária $\sigma = \{0, 1\}$. Embora os biólogos prefiram, entretanto, representar a atividade neuronal como um conjunto contínuo de valores em vez de um conjunto discreto, a escolha de variáveis binárias têm demonstrado grande utilidade no que se diz respeito à facilidade de interpretação e computação.

A escolha do conjunto de valores permitido aos neurônios pode ser reescalada através da seguinte transformação:

$$S = 2\sigma - 1, \quad (3.22)$$

3 Frustração em Modelos de Spins

tornando dessa forma imediata a analogia entre a atividade neuronal e os estados acessíveis às variáveis de spin no modelo de Ising. Podemos assim modelar o potencial associado à transmissão de sinais nos neurônios através do Hamiltoniano de Ising, onde neste caso a matriz J_{ij} é agora chamada de matriz de conexão sináptica. Nesse ponto cabe notar que J_{ij} é a medida de interação do neurônio i com o neurônio j , e esta por sua vez não é simétrica (a interação entre dois neurônios depende do histórico destes), ou seja, o potencial de transmissão representado pelo Hamiltoniano de Ising não é na verdade um Hamiltoniano pois tal matriz deve ser hermitiana, o que não é o caso em redes de neurônios reais.

Apesar de termos apresentado aqui apenas a conexão entre redes neurais e vidros de spin, outras classes de problemas podem ser tratados através dos métodos provenientes da teoria dos vidros de spins; outras referências podem ser encontradas em [54,56,57].

3.4 Conclusão

Neste capítulo foi introduzido o conceito de frustração e vidros de spins bem como as linhas gerais do método de réplicas, usado no modelo de vidros de spin mais comum, o modelo Sherrington-Kirkpatrick. Apresentamos também de forma breve, a conexão entre vidros de spins e rede neurais.

4 O Modelo

4.1 Introdução

Neste capítulo faremos uma explanação geral acerca do modelo de Ising, bem como modelos isomorfos a este (modelo do gás de rede e da liga binária). Será mencionado também, de forma sucinta, a solução do modelo de Ising em duas dimensões a campo nulo, conhecida como solução de Onsager. Em seguida será apresentado o modelo em estudo neste trabalho, ou seja, a introdução variável de frustrações em uma rede planar que reproduz, em seus casos limites, as redes quadrada e triangular.

4.2 O modelo de Ising

O modelo de Ising [58] foi introduzido como uma tentativa de simular o comportamento de domínios magnéticos de materiais como, por exemplo, ferro e níquel, onde uma fração dos spins atômicos se torna espontaneamente polarizada em uma dada direção, dando origem a um campo magnético macroscópico, Fig. 4.1, que ocorre apenas abaixo de uma certa temperatura, chamada de temperatura de Curie. Proposto por Lenz a seu estudante, o físico alemão Ernst Ising, como tarefa de sua tese de doutorado, este modelo foi resolvido em uma dimensão pelo mesmo, que observou a não existência de transição de fases nestas circunstâncias. Equivocadamente, Ising sugeriu que o mesmo ocorreria em dimensões superiores, o que se mostrou um

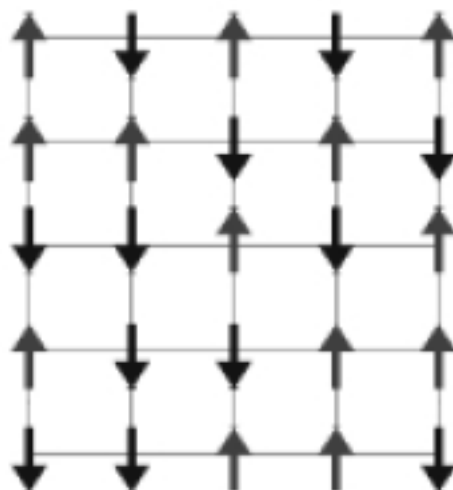


Figura 4.1: Representação esquemática do modelo de Ising.

erro colossal; de fato, a partir de argumentos qualitativos e de métodos aproximados (Ansatz de Bethe e teoria de campo médio) ficou solidamente estabelecido que o modelo podia exibir uma transição de fase, o que foi confirmado pelo famoso trabalho de Onsager [59] em redes bidimensionais (ver seção 4.3). A partir destes resultados, o modelo de Ising tornou-se o mais famoso protótipo da área de Mecânica Estatística com aplicações em áreas tão diversas, como magnetos, fluidos, redes neurais, ligas binárias, etc..

Apesar de sua aparente simplicidade este modelo tem se mostrado capaz de reproduzir os aspectos essenciais de fenômenos críticos cooperativos, tendo sido usado como ponto de partida para a formulação de outros modelos mais gerais de spins localizados, quer na sua variante clássica em que não há termos não comutativos (Potts, Ashkin-Teller, $Z(N)$), como em sua versão quântica (Heisenberg, XY). Uma extensa bibliografia sobre estes modelos e suas aplicações pode ser encontrada em [41].

No caso mais comum, em dimensão arbitrária, a energia de uma dada configuração

4 O Modelo

de N spins $\{S_i\}$ sujeita a um campo externo H é dada por:

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} S_i S_j - H \sum_{i=1}^N S_i, \quad (4.1)$$

onde o símbolo $\langle ij \rangle$ se refere a interação do tipo primeiros vizinhos, de forma que a primeira soma contém $\gamma N/2$ termos, onde γ é o número de primeiros vizinhos de um dado sítio. E com o intuito de simplificar a Eq. (4.1), vamos nos concentrar no caso onde a matriz de interação J_{ij} é isotrópica, e igual a um dado número J . Dessa forma a energia na Eq. (4.1) assume a seguinte forma:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j - H \sum_{i=1}^N S_i. \quad (4.2)$$

A função de partição para o sistema em questão é dada então por:

$$Z = \sum_{S_1} \sum_{S_2} \cdots \sum_{S_N} \exp(-\beta \mathcal{H}\{S_i\}). \quad (4.3)$$

As propriedades termodinâmicas são obtidas através das derivadas energia livre de Helmholtz $F(H, T)$, a qual está relacionada com a função de partição da maneira usual, Eq. (3.5), da seguinte forma:

$$U(H, T) = -k_B T \frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{F}{k_B T} \right), \quad (4.4)$$

$$C(H, T) = \frac{\partial U}{\partial T}, \quad (4.5)$$

$$M(H, T) = -\frac{\partial}{\partial H} \left(\frac{F}{k_B T} \right) = \left\langle \sum_i^N S_i \right\rangle. \quad (4.6)$$

4.2.1 Outras aplicações do modelo de Ising

4.2.1.1 O modelo de gás de rede

O modelo de Ising não é aplicado somente a sistemas magnéticos; existem outros problemas que podem ser mapeados no modelo de Ising, ou seja, são isomorfos a este. Um exemplo simples é o chamado gás de rede, Fig. (4.2). Este é formado por uma coleção de átomos cujas posições podem assumir apenas valores discretos. Tais valores formam a rede de uma dada geometria, com γ primeiros vizinhos, sendo cada sítio ocupado por apenas um único átomo. Se definirmos n_j como o número de ocupação do sítio j que pode assumir apenas dois valores, 0 ou 1, μ o potencial químico do sistema de partículas e $-\epsilon$ a energia de interação associada à ocupação de dois sítios vizinhos temos que a energia total do sistema é dada por:

$$\mathcal{H} = -\epsilon \sum_{\langle ij \rangle} n_i n_j - \mu \sum_j^N n_j. \quad (4.7)$$

Neste caso a grande função de partição é definida como:

$$\Xi = \sum_{n_1=0}^1 \sum_{n_2=0}^1 \cdots \sum_{n_N=0}^1 \exp \left[\beta \epsilon \sum_{\langle ij \rangle}^N n_i n_j + \beta \mu \sum_j^N n_j \right]. \quad (4.8)$$

A equivalência entre o modelo de Ising e o gás de rede pode ser facilmente verificada fazendo uma simples mudança de variável semelhante a Eq. (3.22), ou seja, $n_j = \frac{S_j+1}{2}$. Dessa forma a Eq. (4.8) fica reescrita como:

$$\Xi = \sum_{S_1=-1}^{+1} \sum_{S_2=-1}^{+1} \cdots \sum_{S_N=-1}^{+1} \exp \left[\beta \frac{\epsilon}{4} \sum_{\langle ij \rangle}^N (S_{i+1})(S_{j+1}) + \beta \frac{\mu}{2} \sum_j^N (S_j + 1) \right], \quad (4.9)$$

4 O Modelo

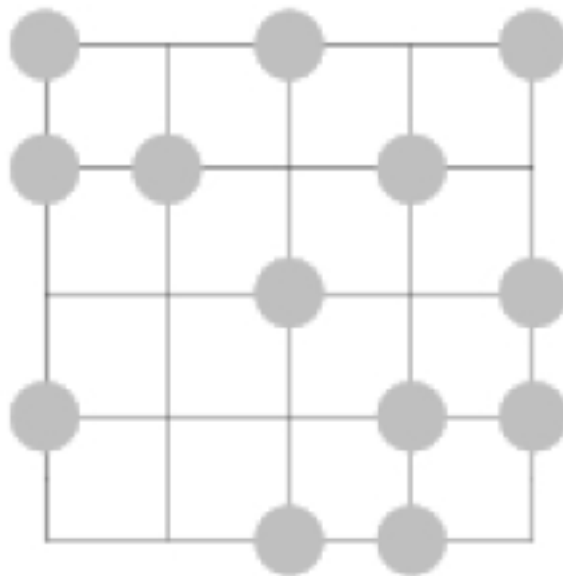


Figura 4.2: Representação esquemática do modelo do gás de rede.

que é equivalente à função de partição de Ising feitas as seguintes modificações:

$$H \leftrightarrow \frac{\mu}{2}, \quad (4.10)$$

$$J \leftrightarrow \frac{\epsilon}{4}, \quad (4.11)$$

$$S_j \leftrightarrow 2n_j - 1. \quad (4.12)$$

Um sistema que pode ser bem modelado pelo modelo de gás de rede é a adsorção de hidrogênio numa superfície (110) de ferro.

4.2.1.2 Ordem-desordem em uma liga binária

Um exemplo de liga binária é a chamada β -brass. Esta consiste de um número igual de átomos de zinco e cobre localizados nos vértices de uma rede cúbica de corpo

4 O Modelo

centrado, ou bcc. A altas temperaturas a rede é ocupada aleatoriamente tanto por zinco quanto por átomos de cobre. À medida que se diminui a temperatura, neste caso a $T_c = 733 K$, uma transição de fase contínua para um estado ordenado ocorre, onde cada tipo de átomo ocupa preferencialmente uma das subredes da rede bcc. Definindo como 1, um sítio da rede ocupado por um átomo de cobre, por -1 , um sítio ocupado por um átomo de zinco, e J_{CuCu} , J_{ZnZn} e J_{CuZn} as energias de interações entre dois átomos de cobres, dois átomos de zinco e um átomo de cobre e outro de zinco, respectivamente, podemos expressar a energia de uma dada configuração através da seguinte hamiltoniana:

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & -\frac{1}{4} \sum_{\langle ij \rangle}^N J_{CuCu} (1 + S_i)(1 + S_j) + \frac{1}{4} \sum_{\langle ij \rangle}^N J_{ZnZn} (1 + S_i)(1 + S_j) - \\ & -\frac{1}{4} \sum_{\langle ij \rangle}^N J_{CuZn} \{ (1 + S_i)(1 - S_j) + (1 - S_i)(1 + S_j) \}. \end{aligned} \quad (4.13)$$

Assim como no modelo do gás de rede, este sistema pode ser feito equivalente ao modelo de Ising com as seguintes identificações:

$$H \leftrightarrow \frac{1}{2} (J_{CuCu} - J_{ZnZn}), \quad (4.14)$$

$$J \leftrightarrow \frac{1}{4} (J_{CuCu} + J_{ZnZn} - 2J_{CuZn}). \quad (4.15)$$

Uma exposição detalhada deste problema pode ser encontrada em [17].

4.3 A solução de Onsager

Passado alguns anos, o modelo de Ising, pelo que já foi exposto até o momento, ganhava importância e, em 1944 foi resolvido analiticamente pelo químico e físico norueguês Lars Onsager [59], prêmio Nobel de química em 1968. A propriedade

4 O Modelo

mais importante descoberta por Onsager é que, em duas dimensões, o modelo de Ising apresentava transição de fase, tornando-se assim uma das bases do estudo dos fenômenos críticos e transições de fase. Apesar de ter sido resolvido na ausência de um campo externo, e da solução analítica em três dimensões ainda não ter sido apresentada, a solução de Onsager é muito rica e apresenta um formalismo único. Por isso se faz instrutivo, expor a abordagem básica usada em sua célebre solução, ou seja a formulação em termos da diagonalização de uma matriz (de transferência) [60] que representa, de certa forma, a função de partição do sistema. Para tal vamos, brevemente, mostrar a relação entre a função de partição e a matriz de transferência utilizando como exemplo o modelo de Ising em uma dimensão, onde os cálculos são elementares.

Na presença de um campo magnético e com interações do tipo primeiros vizinhos, em uma dimensão a hamiltoniana que descreve o modelo de Ising assume a seguinte forma:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{i=1}^N S_i S_{i+1} - \frac{H}{2} \sum_{i=1}^N (S_i + S_{i+1}), \quad (4.16)$$

onde foram empregadas condições de contorno periódicas, ou seja, $S_{N+1} = S_1$.

Dessa forma a função de partição pode ser escrita da seguinte maneira:

$$\begin{aligned} Z_N &= \sum_{\{S_i\}} \exp \left[K \sum_{i=1}^N S_i S_{i+1} + L \sum_{i=1}^N (S_i + S_{i+1}) \right] \\ &= \sum_{S_1} \sum_{S_2} \cdots \sum_{S_N} \exp [K S_1 S_2 + L(S_1 + S_2)] \cdots \exp [K S_N S_1 + L(S_N + S_1)], \end{aligned} \quad (4.17)$$

sendo $K = \beta J$ e $L = \frac{\beta H}{2}$.

4 O Modelo

Definindo o elemento de matriz T_{ij} por:

$$T_{ij} = \langle S_i | T | S_j \rangle = \exp [KS_i S_j + L(S_i + S_j)], \quad (4.18)$$

temos que a função de partição pode ser reescrita como:

$$\begin{aligned} Z_N &= \sum_{S_1} \sum_{S_2} \cdots \sum_{S_N} \langle S_1 | T | S_2 \rangle \langle S_2 | T | S_3 \rangle \cdots \langle S_N | T | S_1 \rangle \\ &= \sum_{S_1=\pm 1} \langle S_1 | T^N | S_1 \rangle = \text{Tr}(T^N) = \sum_i \lambda_i^N. \end{aligned} \quad (4.19)$$

Apesar da Eq. (4.19) ter sido obtida para um caso particular, ela é igualmente válida para outras dimensões. Consideremos agora que λ_1 seja o maior autovalor associado à matriz de transferência T de forma que:

$$Z_N = \sum_i \lambda_i^N = \lambda_1^N \sum_{i \neq 1} \left(\frac{\lambda_i}{\lambda_1} \right)^N. \quad (4.20)$$

Dessa forma, no limite termodinâmico, a energia livre de Helmholtz por spin é dada por:

$$-\beta f = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln Z_N. \quad (4.21)$$

Mas podemos facilmente ver que:

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln Z_N = \lim_{N \rightarrow \infty} \left\{ \ln \lambda_1 + \frac{1}{N} \ln \sum_{i \neq 1} \left(\frac{\lambda_i}{\lambda_1} \right)^N \right\} = \ln \lambda_1, \quad (4.22)$$

uma vez que

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{\lambda_i}{\lambda_1} \right)^N \rightarrow 0, \quad (4.23)$$

logo

$$-\beta f = \ln \lambda_1. \quad (4.24)$$

4 O Modelo

Temperatura Crítica	Ferromagneto	Anti-ferromagneto
Rede Quadrada	2.269185	2.269185
Rede Triangular	3.640956	0

Tabela 4.1: Temperaturas críticas para as rede quadrada e triangular em unidades de J/k_B .

Desta forma, vemos que o problema se reduz ao cálculo do maior autovalor da matriz de transferência.

O cálculo exato em 2 dimensões, para campo magnético externo nulo, foi realizado por Onsager [59] e se constitui em um verdadeiro "tour de force" matemático, cuja reprodução não será feita aqui. Uma versão simplificada pode ser encontrada em [17]. No que se relaciona com os nossos resultados, vale ressaltar os seguintes fatos:

1. Na rede quadrada, existe um isomorfismo (mesma temperatura crítica e mesmos expoentes críticos) entre o modelo ferromagnético ($J \geq 0$) e antiferromagnético ($J \leq 0$), que é consequência da auto dualidade deste modelo na rede quadrada.
2. Na rede triangular o isomorfismo é quebrado: A fase antiferromagnética não existe à $T \neq 0$ pois o sistema é completamente frustrado (ver capítulo anterior), o que impede a estabilização de ordem de longo alcance.

Nas Tabelas 4.1 e 4.2 podemos ver os expoentes críticos bem como as temperaturas críticas para o caso de duas redes bidimensionais, com e sem frustração, a rede quadrada e a rede triangular.

4 O Modelo

	α	β	γ	δ	ν	η
Expoentes críticos	0(log)	0.125	1.75	15	1	0.25

Tabela 4.2: Expoentes críticos para o modelo de Ising em duas dimensões.

4.4 Introdução de frustrações em redes planares

O modelo estudado nesta dissertação consiste na introdução de frustrações, no modelo de Ising, a partir de uma rede mista que interpola a rede quadrada, a qual sabemos não apresentar frustrações topológicas para interações uniformes, e a rede triangular, a qual pode apresentar frustrações por razões já expostas em seções anteriores.

A rede empregada é composta de seis ligações em cada sítio, porém com constantes de trocas diferentes como pode ser visto na Fig. 4.3. Existem quatro ligações com constante de troca J_1 e duas com constante J_2 . Note que no caso limite $J_2 \rightarrow 0$, recuperamos a rede quadrada, e no limite $J_2 \rightarrow J_1$, recuperamos a rede triangular uniforme com suas seis ligações idênticas. Investigaremos a evolução da temperatura crítica do sistema em questão ao longo do intervalo de interpolação, usando como parâmetro de teste os valores conhecidos das temperaturas críticas das redes quadrada e triangular nos casos ferromagnéticos e antiferromagnético. Vamos definir um parâmetro adimensional α , que mede a "distância" que o sistema se encontra em relação à rede quadrada uniforme, da seguinte forma:

$$\alpha(J_1, J_2) = \frac{J_2}{J_1}. \quad (4.25)$$

Dessa forma, os casos limites $J_2 = 0$ e $J_2 = J_1$ podem ser representados simbolicamente por $\alpha = 0$ e $\alpha = 1$, respectivamente.

Após o caso ferromagnético (interações positivas), analisaremos a introdução de

4 O Modelo

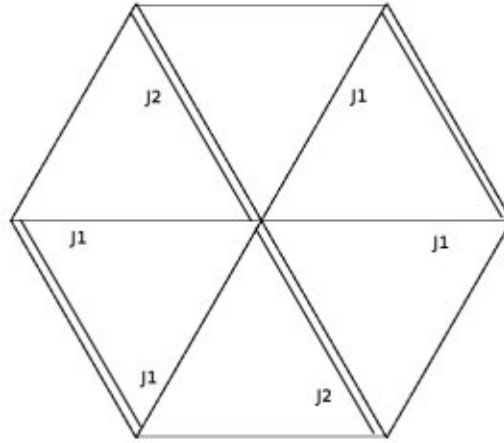


Figura 4.3: Representação esquemática da rede utilizada.

frustração no sistema (antiferromagnetismo), que é obtida quando trocamos o sinal das interações, $J_1 \rightarrow -J_1$ e $J_2 \rightarrow -J_2$.

5 Resultados

As simulações foram efetuadas em diversos tamanhos de redes, com o intuito de aplicar a técnica de colapso de dados para a extração dos expoentes críticos e das temperaturas críticas. Os tamanhos de rede utilizados foram $L = 20, 40, 80$ e 160 , com tempo de termalização e tempo para cálculo das médias termodinâmicas da ordem de L^2 . Apresentaremos na próxima seção os resultados referentes à simulação de um sistema ferromagnético, e em seguida os resultados para o caso antiferromagnético. A priori esperamos que a temperatura crítica, no caso ferro, aumente com o aumento do parâmetro α , partindo desde T_{cQ} (temperatura crítica da rede quadrada uniforme) até T_{cT} (temperatura crítica da rede triangular uniforme), e que no caso antiferro tenhamos uma diminuição da temperatura crítica, uma vez que na rede triangular frustrada $T_{cT} = 0$.

5.1 Caso ferromagnético

A seguir, vamos expor os resultados dos colapsos de dados, para a magnetização e suscetibilidade, para os caso limites $\alpha = 0$ e 1 , bem como para um valor intermediário do parâmetro $\alpha = 0.6$. Devido à universalidade dos expoentes críticos, esperamos que estes sejam os mesmos para todos os valores de α estudados e, como podemos ver é o que acontece dentro das barras de erro.

Utilizando o procedimento descrito na seção 2.4 obtemos as Figs. 5.2 a 5.7, as quais

5 Resultados

α	0	0,2	0,4	0,6	0,8	1,0
T_c	2.269(4)*	2.576(4)	2.862(5)	3.134(6)	3.393(4)	3.643(5)

* O número entre parênteses indica o valor do erro na última casa decimal.

Tabela 5.1: Temperatura crítica para diversos valores do parâmetro α em unidades de J/k_B , caso ferromagnético.

	β	γ	ν
Expoentes críticos	0.124(6)	1.75(2)	1.01(3)

Tabela 5.2: Expoentes críticos para o caso ferromagnético.

apresentam ótimos resultado para estimar a temperatura e expoentes críticos. Na Fig. 5.7 podemos ver que a temperatura crítica cresce linearmente com o aumento do parâmetro α . Vemos também que o ajuste linear para a temperatura crítica cobre os extremos da simulação, representados por $\alpha = 0$ e $\alpha = 1$, dentro das barras de erro. Os expoentes críticos β , γ e ν , bem como as temperaturas críticas estimadas encontram-se sumarizadas nas Tabelas 5.1 e 5.2 e devem ser comparados com os resultados exatos, expostos nas tabelas 4.1 e 4.2 respectivamente.

Ainda com relação à Fig. 5.7, podemos perceber que a equação da reta que melhor ajusta os dados obtidos, tem como coeficiente angular aproximadamente 1.374, exatamente o valor do coeficiente angular de uma reta que passe pelos pontos (0, 2.269) (rede quadrada) e (1, 3.643) (rede triangular), ou seja, apesar da equação encontrada para o ajuste dos pontos nos fornecer aproximadamente 2.284 como valor da temperatura crítica no caso $\alpha = 0$, vemos que este fato deve-se apenas a forma de linearização utilizada, e não à deficiência dos dados. Na verdade, dentro das barras de erro para o coeficiente linear, conseguimos recuperar o valor da temperatura crítica para a rede quadrada.

5 Resultados

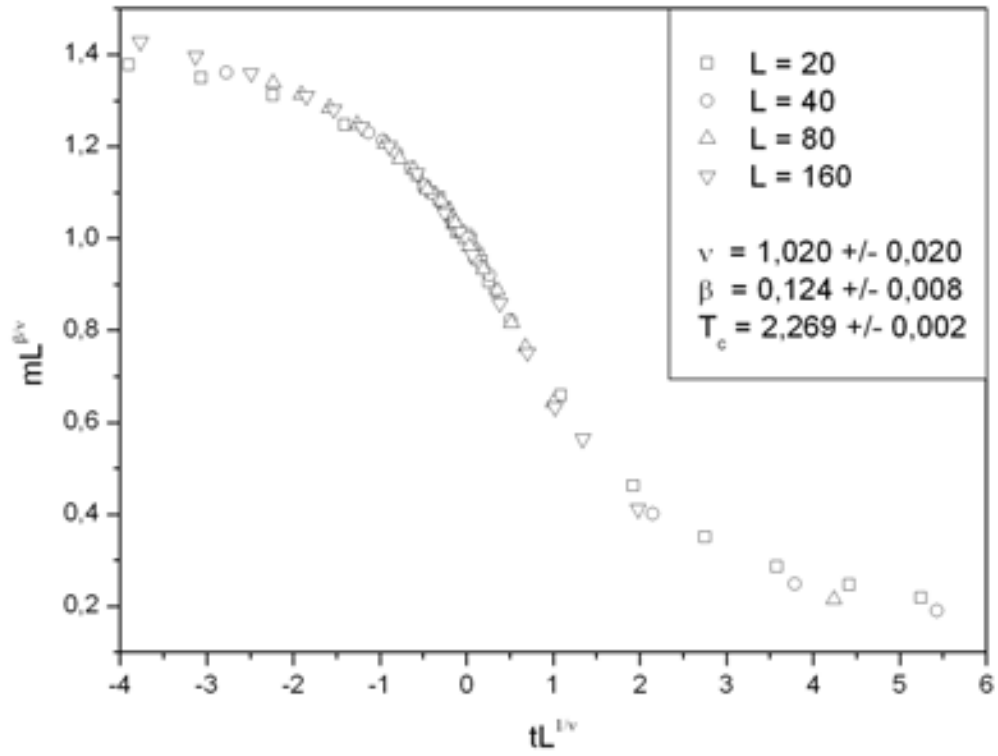


Figura 5.1: Colapso de dados da Magnetização para $\alpha = 0$, caso ferromagnético.

5 Resultados

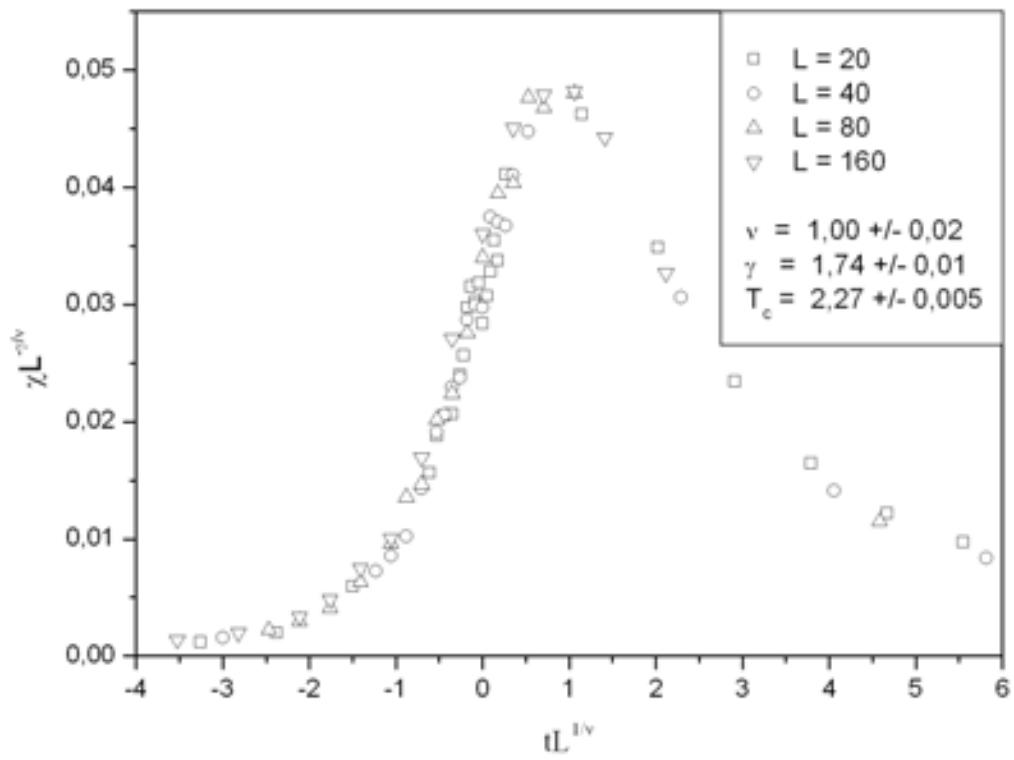


Figura 5.2: Colapso de dados da Suscetibilidade para $\alpha = 0$, caso ferromagnético.

5 Resultados

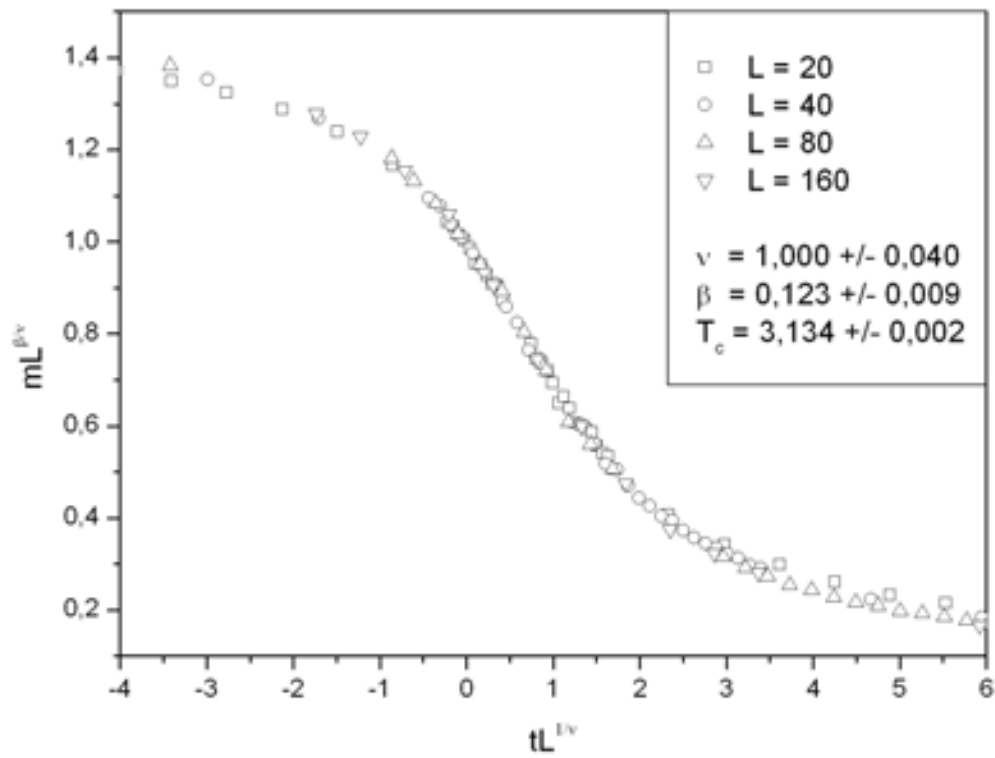


Figura 5.3: Colapso de dados da Magnetização para $\alpha = 0.6$, caso ferromagnético.

5 Resultados

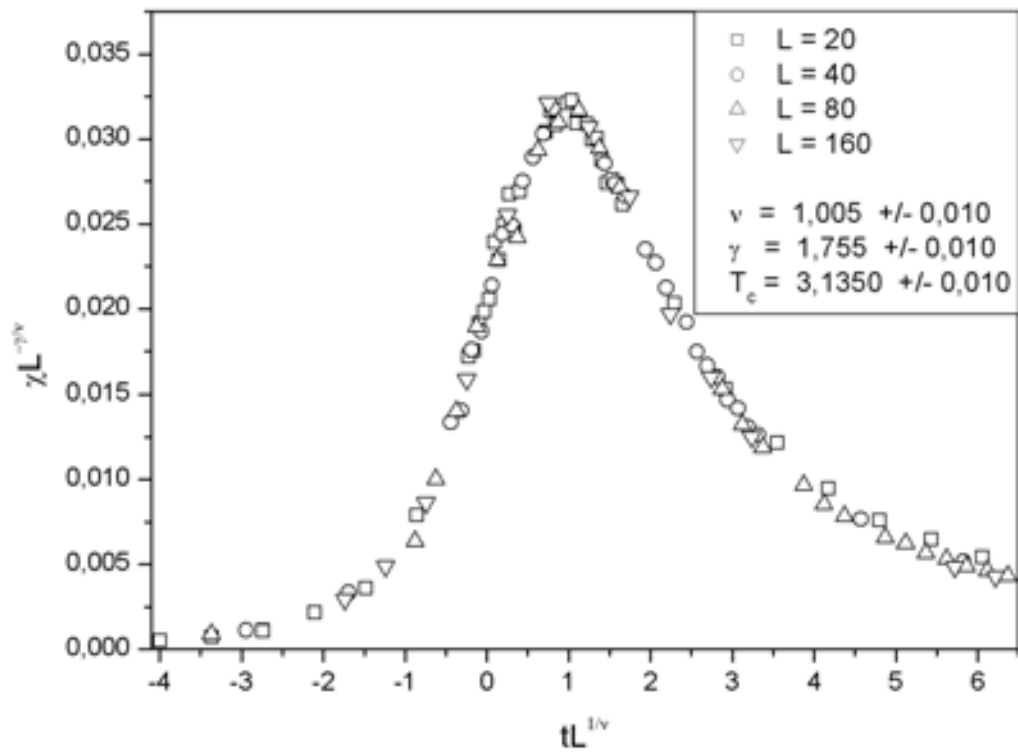


Figura 5.4: Colapso de dados da Suscetibilidade para $\alpha = 0.6$, caso ferromagnético.

5 Resultados

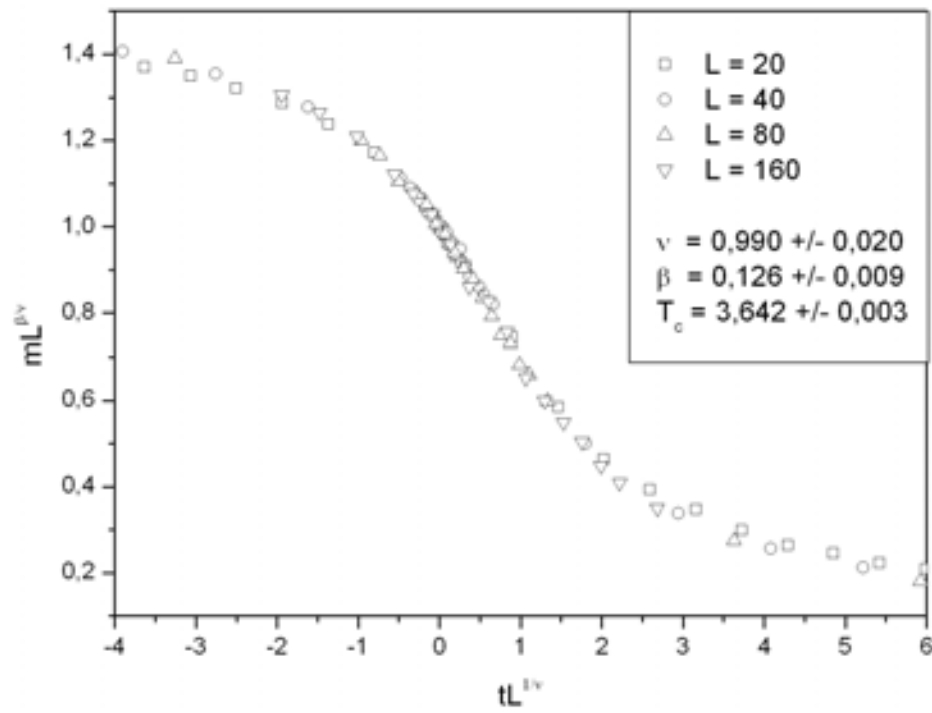


Figura 5.5: Colapso de dados da Magnetização para $\alpha = 1.0$, caso ferromagnético.

5 Resultados

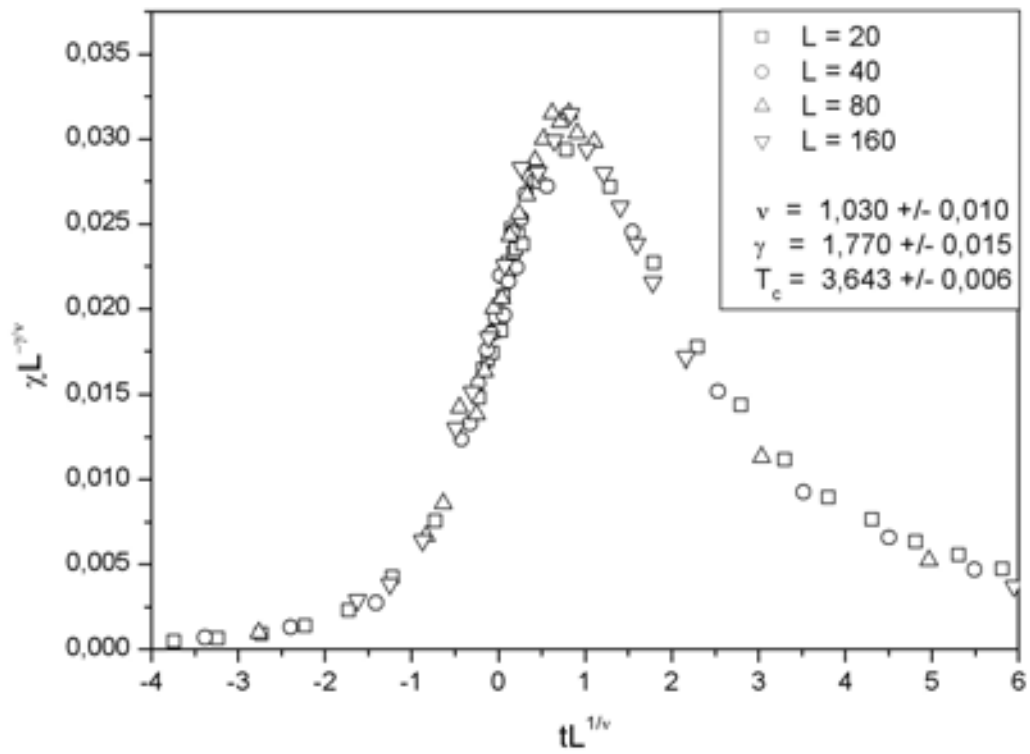


Figura 5.6: Colapso de dados da Suscetibilidade para $\alpha = 1,0$, caso ferromagnético.

5 Resultados

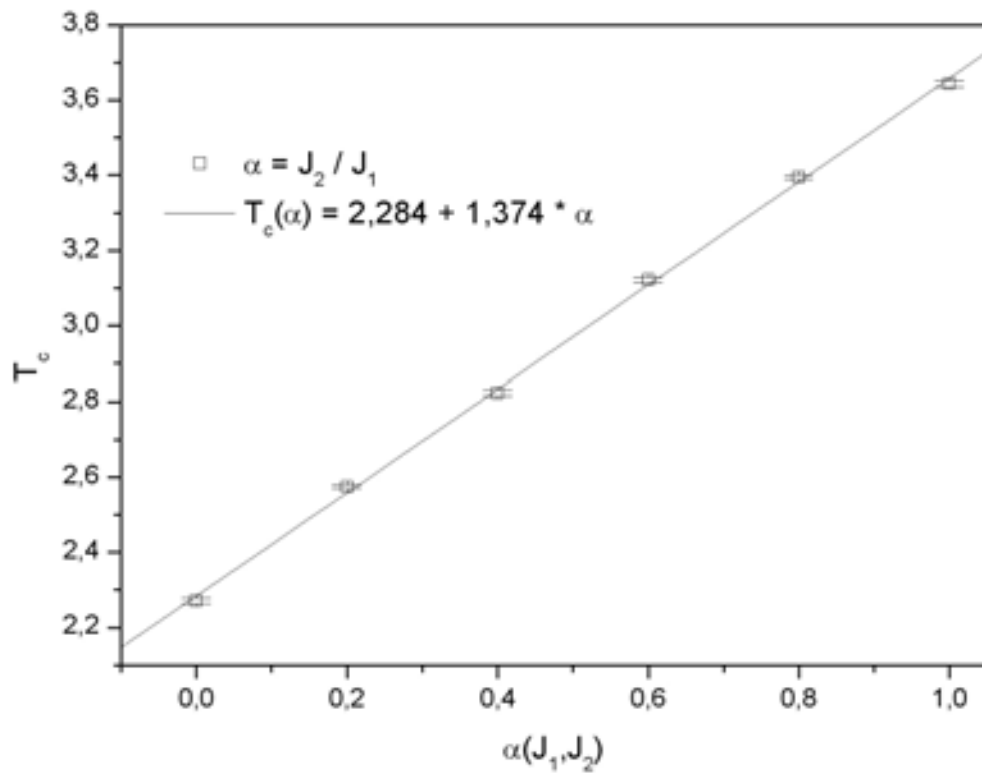


Figura 5.7: Dependência da temperatura crítica com α , caso ferromagnético.

5.2 Caso antiferromagnético

No caso antiferromagnético podemos evidenciar a diminuição da temperatura crítica com o aumento do parâmetro α , como era esperado, uma vez que no caso frustrado ($\alpha = 1$, que corresponde à rede triangular) temos temperatura crítica nula. Podemos ver também que os expoentes críticos calculados eram os mesmos que os encontrados no caso ferromagnético, dentro das barras de erro, uma vez que a dimensão do sistema d e a dimensionalidade dos spin D são os mesmos (universalidade dos expoentes críticos). Os resultados se encontram nas Figs. 5.8 a 5.12.

Podemos observar na Fig. 5.12 que a temperatura crítica só varia linearmente para pequenos valores de α ; à medida que a frustração torna-se mais pronunciada, a temperatura apresenta uma redução mais significativa para o valor nulo (no caso extremo da rede triangular homogênea). Note que as barras de erro são relativamente pequenas, porém no caso $\alpha = 0.8$ os resultados começam a ser menos precisos devido ao reduzido valor da temperatura crítica e ao aumento das frustrações, o que provoca uma maior sensibilidade às flutuações. Neste caso, deve-se empregar técnicas de simulação a baixas temperaturas, técnica não abordada neste trabalho. Na Fig. 5.13 temos uma comparação entre a variação das temperaturas críticas dos dois casos abordados. As temperaturas críticas e os expoentes críticos encontrados estão dispostos nas Tabs. 5.3 e 5.4.

5 Resultados

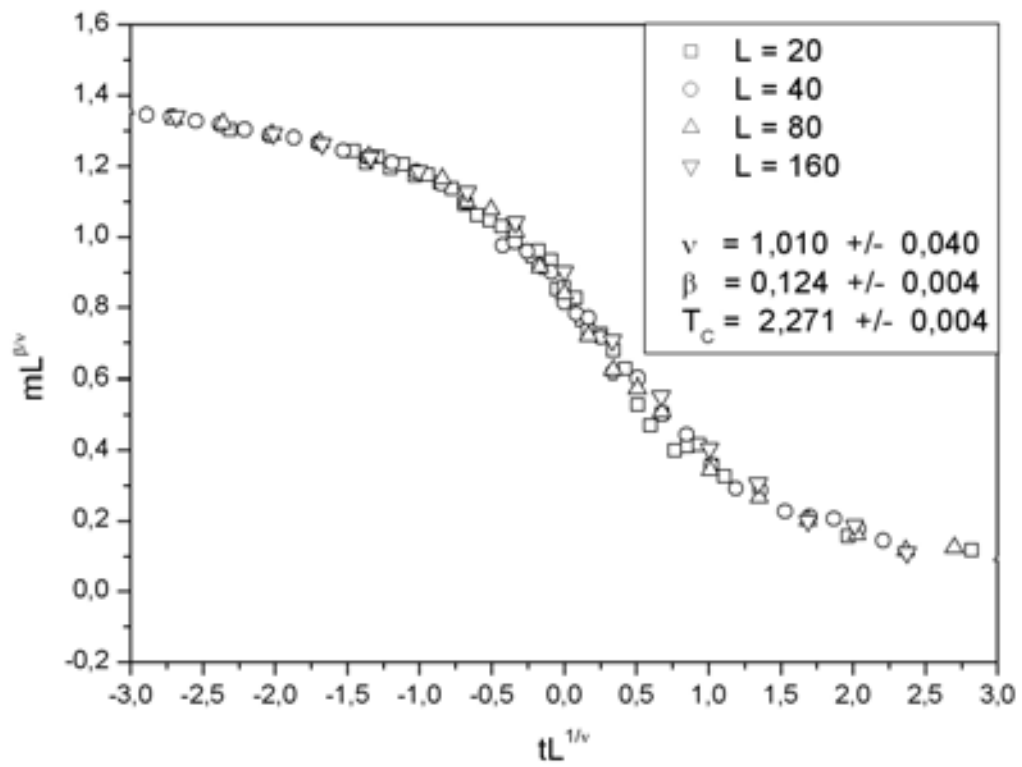


Figura 5.8: Colapso de dados da Magnetização da subrede para $\alpha = 0$, caso antiferromagnético.

5 Resultados

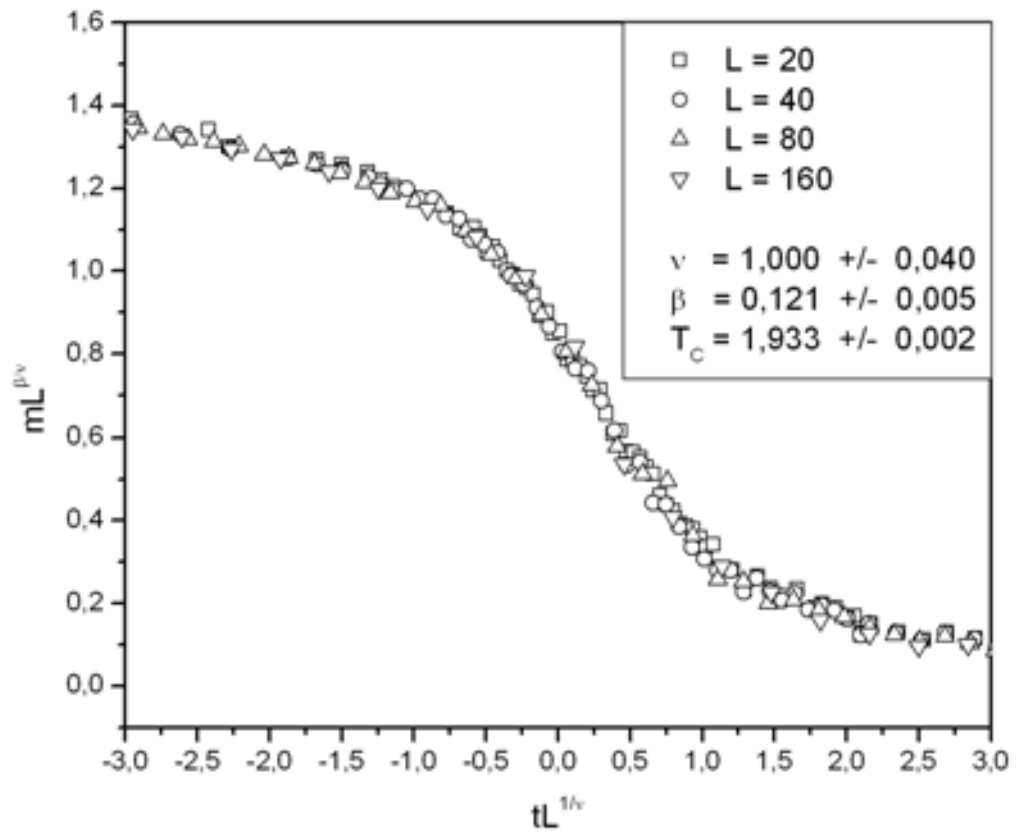


Figura 5.9: Colapso de dados da Magnetização da subrede para $\alpha = 0.2$, caso antiferromagnético.

5 Resultados

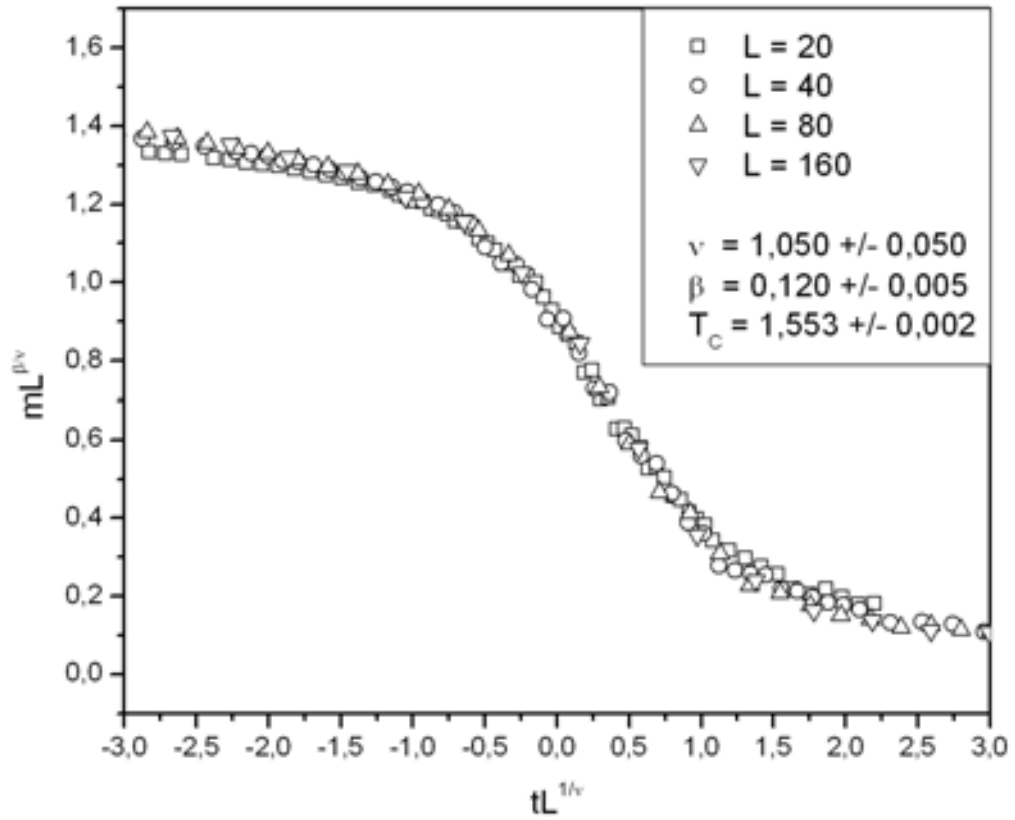


Figura 5.10: Colapso de dados da Magnetização da subrede para $\alpha = 0.4$, caso anti-ferromagnético.

5 Resultados

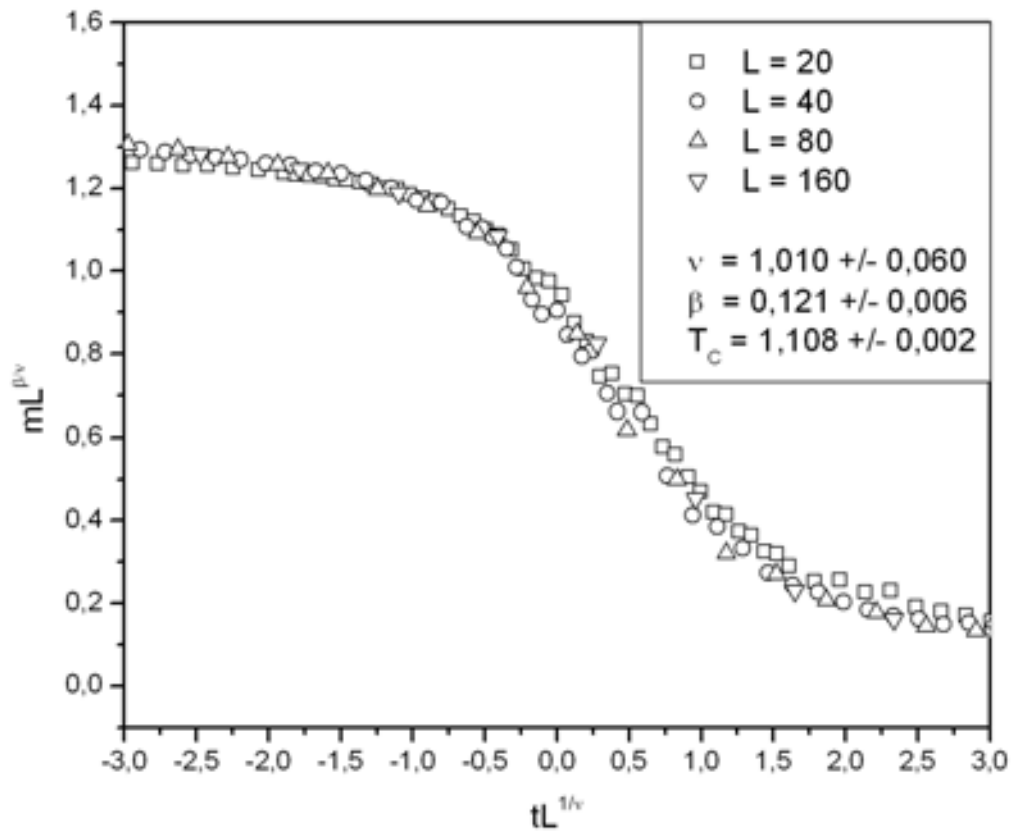


Figura 5.11: Colapso de dados da Magnetização da subrede para $\alpha = 0.6$, caso anti-ferromagnético.

5 Resultados

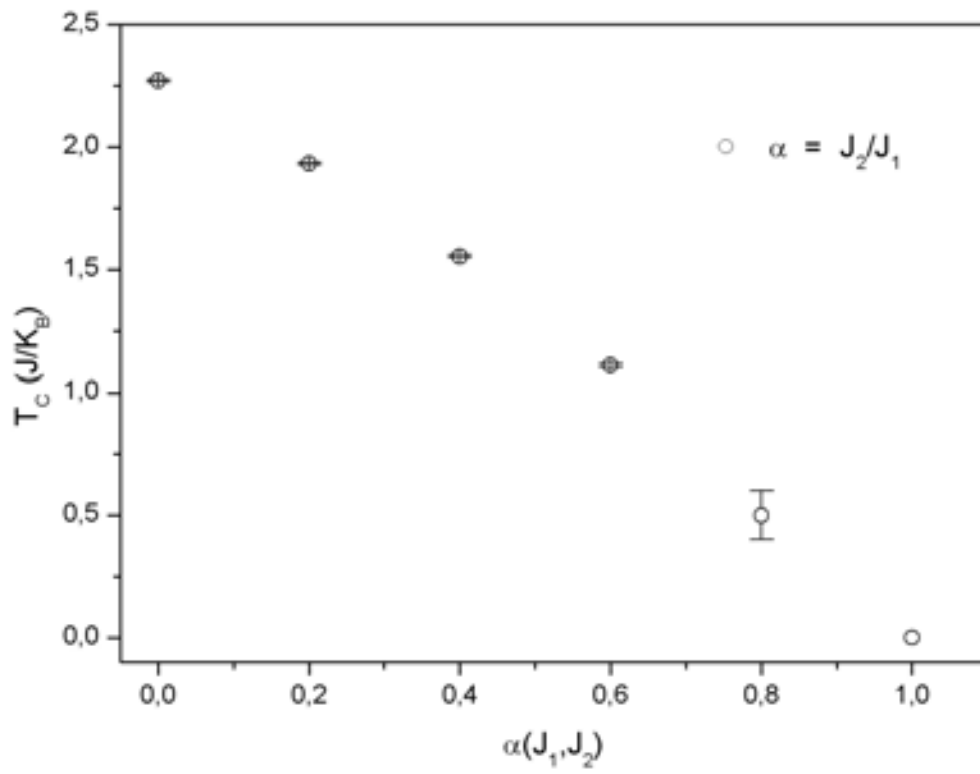


Figura 5.12: Dependência da temperatura crítica com α , caso antiferromagnético.

5 Resultados

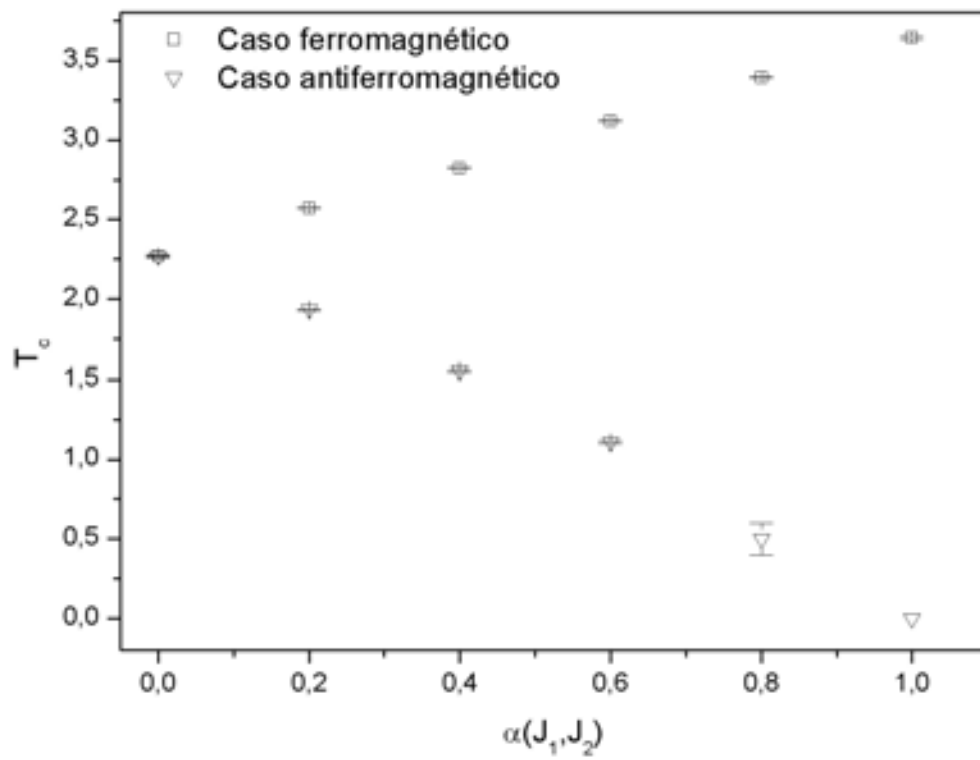


Figura 5.13: Dependência da temperatura crítica com α , caso ferro e antiferromagnético.

5 Resultados

α	0	0,2	0,4	0,6	0,8	1,0
T_c	2.271(4)	1.933(2)	1.533(2)	1.108(2)	0.5(1)	0

Tabela 5.3: Temperatura crítica para diversos valores do parâmetro α em unidades de J/k_B , caso antiferromagnético.

	β	ν
Expoentes críticos	0.122(5)	1.02(1)

Tabela 5.4: Expoentes críticos para o caso antiferromagnético.

6 Conclusões

Neste trabalho estudamos o diagrama de fases do modelo de Ising, com interações ferromagnéticas e antiferromagnéticas, em uma rede bidimensional que interpola de forma contínua as redes quadrada e triangular, descritas pelo parâmetro α que mede a "distância" entre as redes quadrada e triangular, com os seguintes casos limites: $\alpha = 0$ (rede quadrada) e $\alpha = 1$ (rede triangular). Observamos que, no caso ferromagnético, a temperatura crítica aumenta de forma linear com o aumento do parâmetro α , obtendo-se nos casos limites, as temperaturas críticas encontradas na literatura. Já no caso antiferromagnético, a temperatura crítica diminui com o aumento do parâmetro α , de forma linear apenas para pequenos valores de frustração (valores de α próximos de zero). Quando α se aproxima do valor 1 (rede triangular homogênea, onde o sistema é completamente frustrado) a temperatura crítica se reduz mais acentuadamente, possivelmente de forma não linear; as simulações térmicas nesta região apresentam uma maior sensibilidade às flutuações e exigirão métodos alternativos (trabalho em andamento) para que este comportamento seja explicitado com um maior grau de precisão. O método utilizado também permite obter os expoentes críticos do sistema: como esperado, pelo princípio de universalidade, obtivemos os valores (iguais nos casos ferro e antiferromagnético) do modelo de Ising em 2 dimensões.

Apesar de não exposto nesta dissertação, foram realizadas simulações preliminares para valores de α ligeiramente superior a 1. No caso ferromagnético a tendência linear

6 Conclusões

continua enquanto que no caso antiferromagnético o valor nulo para a temperatura crítica persiste (dentro da margem de erro da simulação, que é considerável nesta região).

Pretendemos, em trabalhos futuros, investigar ainda a introdução de frustração de forma percolante, ou seja, em vez de α variar continuamente será introduzido uma probabilidade p de que a ligação J_2 esteja presente com valor igual à $J_2 = J_1$, ou seja de $\alpha = 1$; outras variantes a serem exploradas são a possibilidade de termos simultaneamente constantes de troca com sinais opostos (investigarmos a região de valores negativos de α), bem como a introdução de um campo magnético para o caso antiferromagnético e as mudanças provocadas no diagrama de fase.

Referências Bibliográficas

- [1] MATTIS, D. C. *The theory of magnetism*. Springer Verlag, 1988.
- [2] O'HANDLEY, R. C. *Modern magnetic materials: Principles and applications*. John Wiley & Sons, 1999.
- [3] CATAUDELLA, V. Percolation transition in systems with frustration. *Physica A*, Amsterdam, v. 183, p. 249–254, 1992.
- [4] LIMA, A. B.; COSTA, B. V. Monte Carlo and spin dynamics simulation of the fully frustrated anisotropic two-dimensional Heisenberg model. *J. Magn. Magn. Mater.*, v. 263, p. 324–331, 2003.
- [5] SANNEMO, U.; CHAO, K. A. Frustration in local environment. *Physica A*, Amsterdam, v. 123, p. 605–608, 1984.
- [6] J.F. VALDÉS, W. L.; VOGEL, E. $\pm J$ Ising model on dice lattices. *Physica A*, Amsterdam, v. 385, p. 551–557, 2007.
- [7] YOUNG, A. Phase transitions in spin glasses. *J. Magn. Magn. Mater.*, v. 310, p. 1482–1486, 2007.
- [8] I.A. HADJIAGAPIOU, A. M.; MARTINOS, S. Finite-size scaling of the three-dimensional conserved-order-parameter Ising model via Wang-Landau algorithm. *Physica A*, Amsterdam, v. 373, p. 376–386, 2007.

Referências Bibliográficas

- [9] S.S. MARTINOS, A. M.; HADJIAGAPIOU, I. Finite-size scaling at first- and second-order phase transitions of Baxter-Wu model. *Physica A*, Amsterdam, v. 355, p. 393–407, 2005.
- [10] MERDAN, Z.; ATILLE, D. The effect of the number of simulations on the exponents obtained by finite-size scaling relations for the seven-dimensional Ising model on the Creutz cellular automaton. *Physica A*, Amsterdam, v. 376, p. 327–336, 2007.
- [11] CHRISTOPHE CHATELAINA, BERTRAND BERCHEA, W. J.; BERCHE, P. E. Monte Carlo study of phase transitions in the bond-diluted 3d 4-state Potts model. *Nuclear Physics B*, Amsterdam, v. 719, p. 275–311, 2005.
- [12] ZINN-JUSTIN, J. *Phase transitions and renormalisation group*. Oxford University Press, 2007.
- [13] YEOMANS, J. M. *Statistical mechanics of phase transitions*. Clarendon Press Oxford, 1992.
- [14] PATHRIA, R. K. *Statistical mechanics*. 2. ed. Butterworth-Heinemann, 1996.
- [15] WALTER GREINER, LUDWIG NEISE, H. S.; RISCHKE, D. *Thermodynamics and statistical mechanics*. Springer Verlag, 1995.
- [16] REICHL, L. E. *A modern course in statistical physics*. John Wiley & Sons, Inc., 1998.
- [17] HUANG, K. *Statistical mechanics*. 2. ed. John Wiley & Sons, 1987.
- [18] STANLEY, H. E. *Introduction to phase transitions and critical phenomena*. Clarendon Press Oxford, 1971.
- [19] J. J BINNEY, N. J DOWRICK, A. J. F.; NEWMAN, M. E. J. *The theory of critical phenomena - an introduction to renormalization group*. Clarendon Press Oxford, 1992.

Referências Bibliográficas

- [20] DOMB, C.; GREEN, M. S. *Phase transitions and critical phenomena*. London: Academic Press, 1976. v. 5.
- [21] LANDAU, D. P.; BINDER, K. *A guide to Monte Carlo simulations in statistical physics*. Cambridge University Press, 2000.
- [22] MOONEY, C. Z. *Monte Carlo simulation*. Sage Publications Inc., 1997.
- [23] LEMONS, D. S. *An introduction to stochastic processes in physics*. Johns Hopkins University Press, 2002.
- [24] ROBERT, C. P.; CASELLA, G. *Monte Carlo statistical methods*. Springer Verlag, 2005.
- [25] BINDER, K.; HEERMAN, D. W. *Monte Carlo simulation in statistical physics: An introduction*. 3. ed. Springer-Verlag Telos, 1997.
- [26] TOMÉ, T.; DE OLIVEIRA, M. J. *Dinâmica estocástica e irreversibilidade*. 1. ed. Edusp, 2001.
- [27] NORRIS, J. R. *Markov chains*. Cambridge University Press, 1997.
- [28] HÄGGSTRÖM, O. *Finite Markov chains and algorithmic applications*. Cambridge University Press, 2002.
- [29] STROOCK, D. W. *An introduction to Markov processes (graduate texts in mathematics)*. Springer Verlag, 2005.
- [30] SALINAS, S. R. A. *Introdução à física estatística*. Edusp, 1997.
- [31] GUBERNATIS, J. E. *The monte carlo method in the physical sciences: Celebrating the 50th anniversary of the metropolis algorithm*. American Institute of Physics, 2003.
- [32] KRAUTH, W. *Statistical mechanics: Algorithms and computations*. Oxford University Press, 2006.

Referências Bibliográficas

- [33] G. TIANAA, L. S.; BROGLIA, R. Use of the Metropolis algorithm to simulate the dynamics of protein chains. *Physica A*, Amsterdam, 2007.
- [34] P. COSSIO, J. M.-Z.; RESTREPO, J. Critical behavior of ferromagnetic Ising thin films. *Physica B*, Amsterdam, 2006.
- [35] LIMAA, F.; STAUFFER, D. Ising model simulation in directed lattices and networks. *Physica A*, Amsterdam, 2006.
- [36] I.A. HADJIAGAPIOU, A. M.; MARTINOS, S. Short-time scaling via Monte Carlo single spin-flip algorithms for the Baxter-Wu model. *Physica A*, Amsterdam, 2005.
- [37] N. METROPOLIS, A. ROSEMBLUTH, M. T.; TELLER, E. Introduction of the Metropolis algorithm for molecular-dynamics simulations. *J. Chem. Phys.*, v. 21, p. 1087, 1953.
- [38] KADANOFF, L. P. *Statistical physics: Statics, dynamics and renormalization*. World Scientific Publishing Company, 2000.
- [39] A. MALAKIS, N. F.; KALOZOUMIS, P. First-order transition features of the triangular Ising model with nearest- and next-nearest-neighbor antiferromagnetic interactions. *Physica A*, Amsterdam, 2007.
- [40] D. IVANEYKOA, J. ILNYTSKYIB, B. B.; HOLOVATCH, Y. Local and cluster critical dynamics of the 3d random-site Ising model. *Physica A*, Amsterdam, 2006.
- [41] NEWMAN, M. E. J.; BARKEMA, G. T. *Monte Carlo methods in statistical physics*. Clarendon Press Oxford, 1999.

Referências Bibliográficas

- [42] FISHER, K. H.; HERTZ, J. A. *Spin glasses (cambridge studies in magnetism)*. Cambridge University Press, 1991.
- [43] NISHIMORI, H. *Statistical physics of spin glasses and information processing*. Oxford University Press, 2001.
- [44] DOTSENKO, V. *Introduction to the replica theory of disordered statistical systems*. Cambridge University Press, 2000.
- [45] JÚNIOR, A. A.; NOBRE, F. D. Damage spreading in the fully frustrated square-lattice Ising model. *Physica A*, Amsterdam, v. 234, p. 58–66, 1997.
- [46] M. MEZARD, G. P.; VIRASORO, M. *Spin glass theory and beyond*. World Scientific Publishing Company, 1987.
- [47] BOVIER, A.; PICCO, P. *Mathematical aspects of spin glasses and neural networks*. Birkhäuser Boston, 1997.
- [48] AKAI K. MURTAZAEV, I. K. K.; BABAEV, A. B. Critical behavior of spin systems with quenched disorder. *J. Magn. Magn. Mater.*, v. 300, p. e538–e541, 2006.
- [49] DOTSENKO, V. *An introduction to the theory of spin glasses and neural networks*. World Scientific, 1997. v. 54 of *World Scientific Lectures Notes in Physics*.
- [50] KURT BINDER, W. K. *Glassy materials and disordered solids: An introduction to their statistical mechanics*. World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., 2005.
- [51] W. LEBRECHT, J.F. VALDÉS, E. V. Frustration in mixed two-dimensional $\pm j$ Ising lattices. *Physica A*, Amsterdam, v. 323, p. 466–486, 2003.
- [52] TOULOUSE, G. Theory of the frustration effect in spin glasses: I. *Commun. Phys.*, p. 115, 1977.

Referências Bibliográficas

- [53] DOS SANTOS, R. J. V.; LYRA, M. L. Temperature-dependent "frustration": A thermodynamic rather than a topological effect. *Physica A*, Amsterdam, 1992.
- [54] AMIT, D. J. *Modeling brain function - the world of attractor neural networks*. Cambridge University Press, 1989.
- [55] G. TOULOUSE, S. D.; CHANGEUX, J. Spin glass model of learning by selection. *Biophysics*, v. 83, p. 1695–1698, March 1986.
- [56] S. KIRKPATRICK, C. D. G. J.; VECCHI, M. P. Optimization by simulated annealing. *Science*, Washington, v. 220, p. 671, 1983.
- [57] D.S. ROKHSAR, D. S.; ANDERSON, P. Self-organization in prebiological systems: Simulations of a model for the origin of genetic information. *J. Mol. Evol.*, 1986.
- [58] ISING, E. Beitrag zur theorie des ferromagnetismus. *Zeit. Phys.*, v. 31, p. 253, 1925.
- [59] ONSAGER, L. A two-dimensional model with an order-disorder transition. *Phys. Rev.*, v. 65, p. 117, 1944.
- [60] KRAMERS, H. A.; WANNIER, G. H. Statistics of a two-dimensional ferromagnet. part II. *Phys. Rev.*, v. 60, p. 263–276, 1941.