

Dissertação de Mestrado

COMPORTAMENTO CAÓTICO NA FASE
VIDRO DE SPINS EM REDES
FRACTAIS

Sebastião Tadeu de Oliveira Almeida

Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas

Rio de Janeiro, 2009



Dissertação de Mestrado submetida ao Centro Brasileiro
de Pesquisas Físicas, sob orientação
do Professor **Doutor Evaldo Mendonça Fleury Curado**,
para a obtenção do título de
Mestre em Física por **Sebastião Tadeu de Oliveira Almeida**.

Agradecimentos

A Deus;

Ao meu orientador Evaldo Curado, pela paciência, clareza e sabedoria com que conduziu esta dissertação.

Ao grupo de Mecânica Estatística do CBPF, em especial ao professor Fernando Nobre.

Aos meus pais, Sebastião e Juracy, agradeço pelo apoio e incentivo dado ao longo desta caminhada.

Aos meus irmãos Gabriel e Bruna e ao meu cunhado Bruno, que sempre me apoiaram e incentivaram a prosseguir com os estudos.

A minha noiva Aleksandra, uma companheira que sempre esteve ao meu lado me incentivando nesta jornada pelo mundo da física.

À família de Nelson e Maria da Luz, que me acolheu como um filho durante o meus estudos no CBPF.

Aos meus amigos Diego e André, com os quais convivi durante todo o mestrado (discutindo física, computação, etc.).

Ao CBPF por toda a estrutura oferecida para o conclusão deste trabalho e a CAPES pela apoio financeiro.

Resumo

O comportamento caótico do modelo de vidro de spins de Ising de curto alcance foi estudado em redes fractais, com dimensões variando de 1 a 3. Analisamos o expoente de escala da energia y - introduzido por McMillan, Bray e Moore e também utilizado por Fisher e Huse em seu modelo de gota - e o expoente de caos ζ - introduzido por Bray e Moore -, em diversas redes hierárquicas. Estudamos estas redes fractais cujas dimensões variam de 1 a 3, incluindo redes com dimensão entre 2 e 3 próximas da dimensão crítica inferior $d_{LCD} \simeq 2.58$. Para dimensões inteiras 2 e 3, estas redes podem ser vistas como uma aproximação de deslocamento de ligações ("bond-moving") de Migdal-Kadanoff para as respectivas redes de Bravais quadrada e cúbica. O expoente de escala da energia y é negativo em todas as redes estudadas com dimensão abaixo de $\simeq 2.58$, mostrando que não existe fase vidro de spins nestas redes, e é positivo para redes com dimensão maior do que este valor, mostrando que a fase vidro de spins é estável em redes com dimensão maior que d_{LCD} , como esperado. O expoente de caos para a família de redes hierárquicas diamante decresce monotonamente quando a dimensão aumenta de 1 para 3. Todas as possíveis redes hierárquicas que podem ser obtidas de uma rede de Bravais (a rede cúbica, por exemplo) pelo esquema de deslocamento de ligações de Kadanoff possuem o mesmo expoente de caos, apesar de apresentarem claras diferenças entre elas. Outras redes fractais, que não podem ser obtidas pelo esquema de deslocamento de ligações, apresentam expoentes de caos que não seguem o comportamento monótono mostrado pela família de redes hierárquicas diamante. O expoente ζ é calculado para temperatura nula e finita, e dois tipos de perturbações foram analisadas: perturbações nas constantes de acoplamento (para temperatura zero) e perturbações na temperatura (para temperaturas finitas). O expoente ζ não depende do tipo de perturbação que é realizada.

Abstract

The chaotic behavior of the short-range Ising spin glass model is studied on fractal lattices with dimensions varying from 1 to 3. We analyze the scale-energy exponent y - introduced by McMillan and Bray and Moore and also used by Fisher and Huse in their droplet model - and the chaos exponent ζ - introduced by Bray and Moore -, on several hierarchical lattices. We study these fractal lattices whose dimensions range from 1 to 3, including lattices with noninteger dimensionality between 2 and 3 close to the lower critical dimension $d_{LCD} \simeq 2.58$. For integer dimensions 2 and 3, these lattices can be viewed as a Migdal-Kadanoff moving-bond approximation for the corresponding square and cubic Bravais lattices. The y scale-energy exponent is negative in all lattices studied with dimension below $\simeq 2.58$, showing that there is no spin-glass phase in these lattices, and it is positive for lattices with dimension greater than this value, showing that the spin-glass phase is stable in lattices with dimensions greater than d_{LCD} , as expected. The chaos exponent for the family of diamond hierarchical lattices monotonically decreases when the dimension increases from 1 to 3. All the possible fractal hierarchical lattices that can be obtained from a Bravais lattice (the cubic lattice for example) by the Kadanoff bond-moving scheme have the same chaos exponent, in spite of presenting clear differences among them. Other fractal lattices, which can not be obtained by the bond-moving scheme, have chaos exponent that do not follow the monotonic behavior presented before. The ζ exponent is calculated at zero and finite temperatures, and two kinds of perturbations were analyzed: perturbations on the coupling constants (at zero temperature) and perturbations on the temperature (at finite temperature). The ζ exponent does not depend on the type of perturbation.

Sumário

1	Introdução	1
2	Grupo de Renormalização	8
2.1	Introdução	8
2.2	Grupo de Renormalização de Kadanoff-Wilson	10
3	Redes Hierárquicas	13
3.1	Introdução	13
3.2	A geração de redes hierárquicas	14
3.3	Exemplos de redes hierárquicas	16
4	Vidro de Spins	19
4.1	Introdução	19
4.2	O modelo de Edwards-Anderson (EA)	24
4.3	O modelo de gotas	26
4.4	Renormalização de vidro de spins em redes hierárquicas	30
5	Vidro de Spins - Expoente de caos	35
5.1	Introdução	35
5.2	Vidro de spins em $d=1$	38
5.3	Método e Resultados	42
5.3.1	Temperatura zero ($T = 0$)	42

5.3.1.1	Redes hierárquicas com $d_f = 2$	45
5.3.1.2	Rede hierárquica PWH $d_f = 2$ e $b = 3$	50
5.3.1.3	Ponte de Wheatstone	53
5.3.1.4	Rede hierárquica diamante $d_f \cong 2.58$	55
5.3.1.5	Rede hierárquica tipo trança $d_f \cong 2.58$	57
5.3.1.6	Rede hierárquica diamante $d_f = 3$	60
5.3.1.7	Rede hierárquica tipo trança $d_f = 3$	62
5.3.2	Temperatura diferente de zero ($T \neq 0$)	64
5.3.2.1	Rede hierárquica diamante $d_f \cong 2.58$	65
5.3.2.2	Rede hierárquica diamante $d_f = 3$	67
5.3.2.3	Rede hierárquica tipo trança $d_f = 3$	68

6 Conclusões

Lista de Figuras

1.1	Calor específico do $CuMn$ com 1.2% de Mn versus temperatura. A seta indica a temperatura de congelamento, T_f . Extraído de Wenger e Keesom [3].	2
2.1	Construção de Kadanoff, (a) uma rede onde cada sítio tem um spin, (b) quatro spins formam um bloco, (c) uma nova rede é formada.	11
3.1	(a)-(c) Construção de uma rede hierárquica particular.	14
3.2	Exemplos de redes hierárquicas. Em (a), (b) e (c) são mostrados os três primeiros passos, n , de um processo iterativo.	17
3.3	Unidades geradoras de redes hierárquicas. Em (a) $d_f = \ln 4 / \ln 2 = 2$, (b) $d_f = \ln 8 / \ln 2 = 3$ e (c) $b = 3$ e $d_f = \ln 9 / \ln 3 = 2$	18
3.4	Células de redes hierárquicas conhecidas como ponte de Wheatstone. Em (a) temos $b = 2$ e $d_f = \ln 5 / \ln 2 \simeq 2.32$, em (b) $b = 2$ e $d_f = \ln 12 / \ln 2 \simeq 3.58$ e em (c) $b = 3$ e $d_f = \ln 42 / \ln 3 \simeq 3.40$	18
4.1	Sistemas com quatro e três spins que apresentam frustração. Nestes dois casos as intensidades das interações são iguais diferindo apenas no sinal. Verifica-se que existe mais de uma configuração no estado fundamental, ou seja, ele é degenerado.	20

- 4.2 A susceptibilidade como uma função da temperatura para amostras de $CuMn$ com 0.9% Mn . Frequências medidas: \square , 1.33kHz; \circ , 234Hz; \times , 104Hz; \triangle , 2.6Hz. Extraído de Mulder *et al.* [48]. 21
- 4.3 Suscetibilidade de $CuMn$ vs temperatura para 1.08% e 2.02% Mn . Em (a) e (c) Campo constante (FC) e (b) e (d) campo nulo (ZFC) . Extraído de Nagata *et al.* [49]. 22
- 4.4 Esquema de renormalização para uma rede de diamante, com $b = 2$ e $d_f = 2$. Em (a) a célula da rede hierárquica com 4 ligações; em (b) é mostrado o traço em S_2 , o mesmo deve se feito com S_4 ; em (c) a ligação efetiva resultante do traço parcial sobre S_2 e S_4 32
- 5.1 Célula básica da rede hierárquica tipo diamante com $d_f = 3$ e $b = 2$. S_i com $i = 1, \dots, 6$ representam os spins da rede, enquanto que J_{1l} e J_{2l} com $l = 1, \dots, 4$ representam os acoplamentos entre os spins. 43
- 5.2 (a) Célula básica da rede hierárquica tipo diamante com $d_f = 2$ e $b = 2$; (b) célula básica da rede hierárquica tipo trança com $b = 2$ e $d_f = 2$ 45
- 5.3 Gráfico de $d^2(n) \times n$, sendo n o número de iterações realizadas à temperatura zero em uma rede hierárquica diamante de dimensão fractal $d_f = 2$ e $b = 2$; $d^2(n)$ satura em 1 quando $n^* \cong 26$ 47
- 5.4 Gráfico de $d^2(n) \times n$, sendo n o número de iterações realizadas a temperatura zero em uma rede hierárquica tipo trança de dimensão fractal $d_f = 2$ e $b = 2$; $d^2(n)$ satura em 1 quando $n^* \cong 26$ 48
- 5.5 Gráficos para a rede hierárquica diamante com $d_f = 2$ e $b = 2$. (a) a variância diminui a cada iteração indo de um para zero; (b) gráfico semi-log do desvio padrão que a cada iteração diminui de 2^y . A inclinação da reta é $-y \ln 2$, portanto $y \sim -0.269$ 48

- 5.6 Gráficos para a rede de hierárquica tipo trança com $d_f = 2$ e $b = 2$. (a) a variância tende para zero depois de n iterações; (b) no gráfico semi-log o desvio padrão a cada iteração decresce de 2^y , sendo $y \sim -0.269$ 49
- 5.7 Célula de uma rede hierárquica com $d_f = 2$, $b = 3$ e $\mathcal{Q} = 4$, onde 1, 2, 3 e 4 representam os spins internos da rede. 50
- 5.8 Gráfico de $d^2(n) \times n$ da rede hierárquica com $d_f = 2$ e $b = 3$ da Fig. 5.7. $d^2(n)$ satura no valor 1 quando $n^* \cong 15$ 52
- 5.9 (a) A variância das duas distribuições tende a zero quando n aumenta; (b) gráfico semi-log do desvio padrão das distribuições com uma diminuição de 3^y a cada iteração. 52
- 5.10 Célula da rede hierárquica conhecida como ponte de Wheatstone, com $d_f \cong 2.32$ e $b = 2$. Nesta rede $\mathcal{Q} = 2$, onde 1 e 2 representam os spins internos. 53
- 5.11 Gráfico de $d^2(n) \times n$, sendo n o número de iterações realizadas à temperatura zero em uma ponte de Wheatstone com dimensão fractal $d_f = \ln 5 / \ln 2 \simeq 2.32$ e $b = 2$. $d^2(n)$ satura no valor 1 quando $n^* \cong 22$ 54
- 5.12 (a) A variância J^2 tende a zero depois de n iterações; (b) gráfico semilog do desvio padrão decaindo com as iterações. 55
- 5.13 Rede hierárquica diamante com $d_f \cong 2.58$ e $b = 2$. S_i com $i = 1, 2, 3, 4$ e 5 representam os spins e J_{1l} e J_{2l} com $l = 1, 2$ e 3 são as constantes de acoplamento. 56
- 5.14 Gráfico de $d^2(n) \times n$, sendo n o número de iterações realizadas a temperatura nula em uma rede hierárquica diamante de dimensão fractal $d_f \cong 2.58$ e $b = 2$. $d^2(n)$ satura no valor 1 quando $n^* \cong 27$ 56
- 5.15 Gráfico semi-log da variância de $\{J_i^{(n)}\}$ e $\{J'_i^{(n)}\}$, apresentando um crescimento exponencial. 57
- 5.16 Célula básica da rede hierárquica tipo trança com $d_f \cong 2.58$ e $b = 2$. As variáveis S_1, S_2 e S_3 representam os spins da célula e J_{1l} e J_{2l} ($l = 1, 2, 3$) são os acoplamentos. 58

5.17 Gráfico de $d^2(n) \times n$, sendo n o número de iterações realizadas à temperatura nula em uma rede hierárquica tipo trança com $d_f \cong 2.58$ e $b = 2$. $d^2(n)$ satura no valor 1 quando $n^* \cong 25$ 58

5.18 A variância J^2 de $\{J_i^{(n)}\}$ e $\{J'_i^{(n)}\}$ crescendo a cada iteração de forma exponencial. 59

5.19 Rede hierárquica DT1 com $d_f \cong 2.58$, $b = 2$, $d_s \cong 1.58$ e $T_f = 0.34$ 59

5.20 Quadrado da distância normalizado, $d^2(n)$, entre $\{J_i\}$ e $\{J'_i\}$ como uma função do número de iterações n à temperatura nula em uma rede hierárquica diamante com $d_f = 3$ e $b = 2$; $d^2(n)$ satura no valor 1 quando $n^* \cong 27$ 60

5.21 Em (a) temos a variância *versus* o número de iterações; (b) gráfico semi-log do desvio padrão J crescendo com um fator 2^y , para a rede hierárquica cuja a célula básica é mostrada na Fig. 5.1. 61

5.22 Gráfico de $d^2(n) \times n$, sendo n o número de iterações realizadas a temperatura zero em uma rede hierárquica tipo trança de dimensão fractal $d_f = 3$ e $b = 2$; $d^2(n)$ satura no valor 1 quando $n^* \cong 27$ 62

5.23 (a) Variância de $\{J_i^{(n)}\}$ e $\{J'_i^{(n)}\}$ crescendo a cada iteração, (b) desvio padrão J crescendo a cada iteração com 2^y , sendo $y \sim 0.255$ (rede hierárquica definida pela célula básica da Fig. 3.3(b)). 63

5.24 Redes hierárquicas com $d_f = 3$; (a) temos a rede hierárquica DT2 com $b = 2$, $d_s = 2$ e $T_f = 1.25$, em (b) a rede hierárquica DT3 com $b = 2$, $d_s = 2$ e $T_f = 1.29$ 63

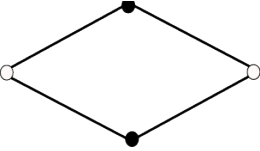
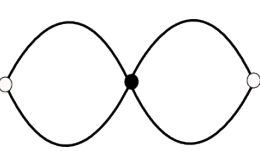
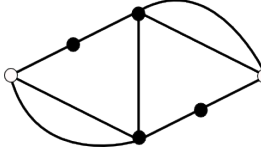
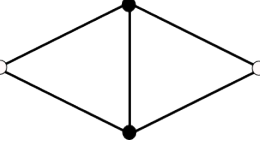
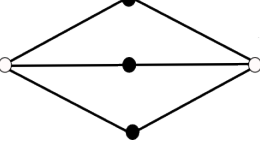
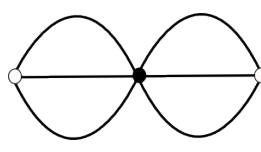
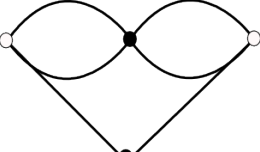
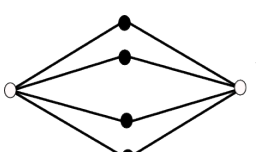
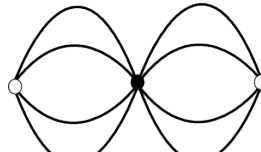
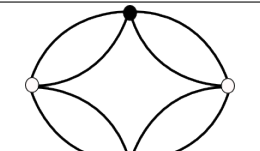
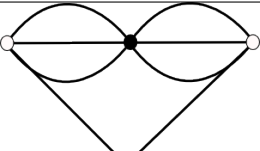
5.25 Quadrado da distância normalizado, como uma função do número de iterações, para $T = 0$ e $T = 0.2$ 66

5.26 Variância *versus* o número de iterações para a rede hierárquica diamante com $d_f = 2.58$ para um a temperatura $T = 0.2$ 66

5.27 Gráfico de $d^2(n) \times n$ para quatro temperaturas diferentes numa rede hierárquica diamante tridimensional com $b = 2$ 67

- 5.28 (a) Variâncias de $\{K_i^{(n)}\}$ e $\{K_i'^{(n)}\}$ como uma função do número de iterações para temperatura $T = 0.5$; (b) as mesmas variância como uma função do número de iterações para uma temperatura $T = 1.2 > T_f$ 68
- 5.29 Quadrado da distância normalizado $d^2(n)$ como uma função do número de iterações n , para cinco temperaturas abaixo de T_f 69
- 5.30 Variâncias de $\{K_i^{(n)}\}$ e $\{K_i'^{(n)}\}$ como uma função do número de iterações, para temperatura $T = 0.7$ 69

Células Básicas de Redes Hierárquicas

Diamante $d_f = 2$	Trança $d_f = 2$	PWH $d_f = 2$
		
Ponte de Wheatstone $d_f = 2.32$	Diamante $d_f = 2.58$	DTrança $d_f = 2.58$
		
DT1 $d_f = 2.58$	Diamante $d_f = 3$	Trança $d_f = 3$
		
DT2 $d_f = 3$	DT3 $d_f = 3$	
		

Capítulo 1

Introdução

A denominação “vidro de spins” surgiu para designar uma classe de ligas metálicas como $CuMn$ ou $AuFe$, que são formados por exemplo a partir de metais nobres (Au , Ag , Cu , Pt) fracamente diluídos com íons de metais de transição magnéticos, como o Fe e Mn . O $FeCr$, $Eu_xSr_{1-x}S$, etc., também são exemplos de materiais que apresentam a fase vidro de spins. Deve-se notar que o $Eu_xSr_{1-x}S$, com x entre 0.1 e 0.5, é um isolante e também apresenta propriedades da fase vidro de spins.

Uma das razões para o nome vidro de spins é devido a que os momentos magnéticos (associados aos spins) apresentam localmente uma orientação fixa mas sem qualquer ordenamento periódico, o que conceitualmente lembra estruturas amorfas¹, como o vidro convencional.

Vidro de spins é um fascinante tópico da física da matéria condensada, o qual se desenvolveu essencialmente após 1970 quando experimentos mais precisos foram realizados. A presença de um pico agudo na susceptibilidade ac dependente da frequência, em campos magnéticos pequenos, foi primeiro observado em ligas de $AuFe$ por Cannella e Mydosh [1]. Acredita-se que este pico seja uma característica universal destes materiais, indicando uma transição de fase. Nesta transição o calor específico não apresenta nenhuma

¹Estruturas amorfas, também chamadas de estruturas vítreas são formadas por arranjos atômicos aleatórios e sem simetria ou ordenação de longo alcance.

singularidade visível, em vez disso, ele tem um máximo arredondado. Este máximo está localizado ligeiramente acima da temperatura de “congelamento”, T_f , definida através do pico na susceptibilidade [2]. Para $T < T_f$, o calor específico varia aproximadamente de forma linear com a temperatura (ver a Fig. 1.1).

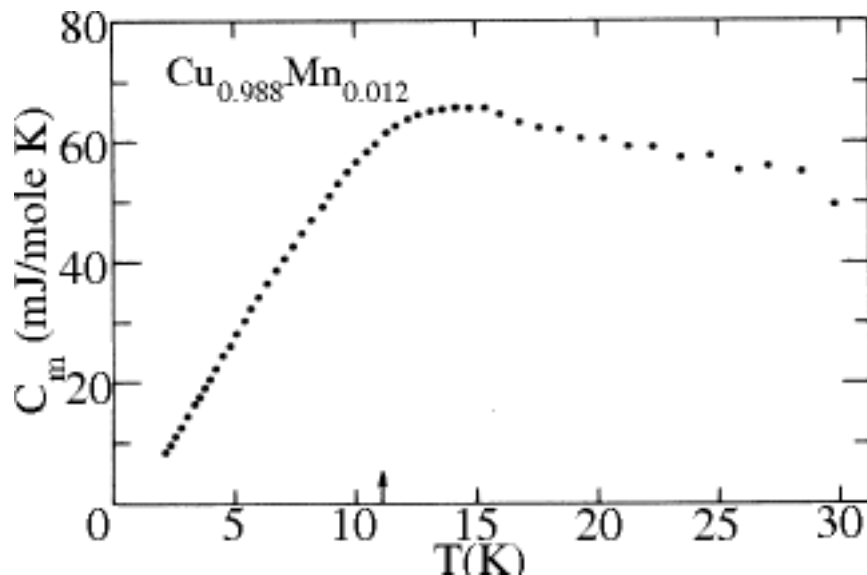


Figura 1.1: Calor específico do $CuMn$ com 1.2% de Mn versus temperatura. A seta indica a temperatura de congelamento, T_f . Extraído de Wenger e Keesom [3].

Outras características da fase vidro de spins são a magnetização remanente, a histerese, o lento relaxamento, envelhecimento e fenômenos relacionados [2].

Basicamente a fase vidro de spins consiste em uma coleção de spins que a baixas temperaturas apresentam um “congelamento” local desordenado espacialmente. Isto acontece devido às interações competitivas - positivas e negativas - presentes na amostra, impossibilitando aos spins conseguirem uma configuração que satisfaça a todas as interações. Chama-se a isto de frustração. Verificou-se, portanto, que era necessário usar novos conceitos para descrever a fase vidro de spins e este desafio tem motivado muitos físicos neste campo até hoje.

Uma formulação teórica fundamental foi realizada por Edwards e Anderson em 1975

[4], que destacaram a importância da combinação de frustração e desordem temperada² como sendo ingredientes fundamentais da fase vidro de spins. Introduziram assim um modelo com constantes de acoplamento aleatórias e um novo parâmetro de ordem conhecido como parâmetro de ordem Edwards-Anderson (EA),

$$q_{EA} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N [\langle S_i \rangle_T^2]_{av}, \quad (1.1)$$

onde os spins S_i assumem os valores ± 1 (spins de Ising), $\langle \dots \rangle_T$ representa uma média térmica e $[\dots]_{av}$ uma média sobre as interações aleatórias. O parâmetro de ordem, q_{EA} , desempenha um papel central na descrição da fase vidro de spins, sendo diferente de zero abaixo da temperatura crítica e zero para temperaturas acima. A teoria EA como é conhecida, representou um grande avanço no entendimento desta nova fase.

Uma extensão do modelo EA, onde as interações de troca são de curto alcance (interações entre primeiros vizinhos), foi proposta logo depois por Sherrington e Kirkpatrick (SK) [5]. No modelo SK as interações são de alcance infinito, ou seja, cada spin interage com todos os outros spins do sistema, e são obtidas aleatoriamente e independentemente a partir de uma distribuição de probabilidades. Este modelo de campo médio foi resolvido na chamada aproximação de simetria de réplicas. Entretanto, Almeida e Thouless [6] em 1978 mostraram que a solução do modelo SK com um único parâmetro de ordem (simetria de réplicas) é instável abaixo da linha de Almeida-Thouless (AT), no plano temperatura-campo (T-H). Abaixo da linha AT, o modelo SK tem uma entropia, \mathcal{S} , que se torna negativa para baixas temperaturas. Para temperatura zero, $\mathcal{S}(0) = -1/(2\pi) \approx -0.16$ [7]. Consequentemente a solução SK é válida apenas acima da linha AT, onde a simetria de réplicas é estável.

Depois do esforço de vários físicos, Parisi [8, 9] em 1980 encontrou a solução correta para a região abaixo da linha AT que era instável no modelo SK. O procedimento utilizado é conhecido como quebra da simetria de réplicas (RSB). A solução de Parisi, como é

²Temperada (“quenched”), é o tratamento dado a uma amostra em que esta é aquecida a altas temperaturas, e subitamente resfriada.

chamada, tem sido demonstrada com um certo rigor matemático, sendo uma solução analítica, porém nada trivial. Uma notável característica da solução de Parisi é que, abaixo da linha AT, o parâmetro de ordem não é caracterizado por um número, mas por uma função, $q(x)$ ($0 \leq x \leq 1$) que varia continuamente. Neste cenário, uma característica da fase vidro de spins de campo médio é a existência de um grande número (infinito quando o número de spins $N \rightarrow \infty$) de estados de equilíbrio [10] (vales de energia livre separados por barreiras de energia que divergem no limite termodinâmico).

Posteriormente, no início dos anos oitenta surgiu um novo cenário, baseado na hipótese de escala para excitações locais, que buscava uma descrição mais realista da fase vidro de spins. Este novo cenário é baseado na suposição de que abaixo da temperatura de transição de fase, existem apenas poucos estados fundamentais na fase vidro de spins em qualquer dimensão. Este cenário, onde as interações são apenas entre spins primeiros vizinhos, ou seja, de curto alcance, é totalmente diferente do cenário da teoria de campo médio.

Quando se considera excitações do estado fundamental, várias propriedades de escala são assumidas para excitações de aglomerados compactos de spins de escala de comprimento L em torno de um spin particular, onde o número de spins é da ordem de L^d , sendo d a dimensão. Estes aglomerados são chamados de gotas. Este cenário se desenvolveu na década de 80 graças a vários autores como Bray e Moore [11], McMillan [12] e Fisher e Huse [13, 14, 15], sendo conhecido como modelo de gotas (droplet model). Neste novo formalismo usa-se naturalmente técnicas do grupo de renormalização.

Neste cenário, a energia livre das excitações, com escala L , superiores à energia livre da fase vidro de spins escala como

$$F_L \sim L^y,$$

onde y é conhecido como expoente da gota. O expoente y tem papel central neste quadro, revelando como a energia da gota escala com o comprimento. A fase vidro de spins existe apenas para $y > 0$, ou seja, o sistema escala para fortes acoplamentos, sendo necessário

uma grande quantidade de energia para inverter a gota neste sistema. Quando $y < 0$ a fase vidro de spins deixa de existir, uma vez que o sistema escala para acoplamentos fracos, permitindo excitações de grande escala com energia arbitrariamente baixa, impedindo a existência da fase vidro de spins a temperatura finita. O modelo de gotas é usado para descrição de vidro de spins reais, porém, ainda não existe um consenso na comunidade científica.

Uma das previsões teóricas de vidro de spins é a sua sensibilidade a pequenas perturbações, tanto nos acoplamentos quanto na temperatura. A fase vidro de spins pode apresentar um comportamento caótico no seguinte sentido: com uma pequena perturbação nos acoplamentos iniciais ou uma pequena variação na temperatura do sistema, acima de uma determinada escala de comprimento $L \gtrsim L^*$, o sistema torna-se totalmente decorrelacionado do sistema original, sem a perturbação.

O comportamento caótico vem sendo estudado amplamente com a teoria de campo médio [16, 17] (interações de alcance infinito) e a teoria de gotas [15, 18, 19]. A teoria de gotas, que utiliza técnicas do grupo de renormalização, é utilizada no estudo do comportamento caótico da fase vidro de spins em sistemas de baixa dimensionalidade.

No caso da temperatura, por exemplo, o caos pode ser entendido do seguinte modo: o acoplamento efetivo entre dois spins separados de uma distância L , tem o sinal trocado à medida que se muda a temperatura T . Surgem assim vários zeros distribuídos de forma aleatória sobre o eixo T . A distância típica entre dois zeros consecutivos depende da separação L entre os spins. Quando L tende a infinito, essa distância típica entre os zeros tende a zero, ou seja, uma pequena mudança na temperatura provoca várias mudanças de sinal no acoplamento efetivo. Dizemos assim que o acoplamento efetivo é uma função caótica de T . Quando a temperatura é alterada de uma quantidade δT , o sistema torna-se decorrelacionado a partir da escala de comprimento,

$$L^* \sim (\delta T)^{-\frac{1}{\zeta}},$$

onde L^* é maior que comprimento de correlação ξ do sistema e ζ é definido como o expoente de Lyapunov ou expoente de caos do sistema. O expoente ζ foi introduzido por Bray e Moore [18] em 1987 para uma descrição do comportamento caótico da fase vidro de spins em redes de Bravais. Neste mesmo ano este expoente foi utilizado por Banavar e Bray [19] no estudos de redes fractais. A fase vidro de spins apresenta um comportamento caótico quando o expoente de caos é positivo ($\zeta > 0$). Bray e Moore [18] mostraram que o expoente de caos ζ encontra-se relacionado com o expoente da gota y e a dimensão fractal da gota d_s através da relação:

$$\zeta = \frac{d_s}{2} - y.$$

Simulações numéricas de vidro de spins em redes de Bravais apresentam limitações principalmente no que diz respeito ao tamanho da rede. Na década de 80 algumas das simulações se limitavam a $L = 4$ em $d = 3$, que é uma escala de comprimento pequena, não permitindo tirar conclusões confiáveis de tais dados. Recentemente Hartmann [20] com um sofisticado algoritmo obteve sistemas de $L^2 = 256^2$ em duas dimensões, o que já é uma melhora significativa. Uma alternativa para alcançar numericamente escalas de comprimento maiores é através do grupo de renormalização, porém o processo de renormalização em redes de Bravais geralmente leva a um grupo de renormalização atuando em um espaço de dimensão infinita. Para contornar tais dificuldades utiliza-se redes aproximadas que preservem as simetrias importantes da rede original e permitam estudar o grupo de renormalização em um espaço de dimensão reduzida. Um bom exemplo são as redes hierárquicas, nas quais, em certas situações, se obtém resultados exatos com o grupo de renormalização.

O objetivo desta dissertação é investigar o expoente de caos da fase vidro de spins em diversas redes hierárquicas com dimensão fractal $d_f = 2$, $d_f \cong 2.32$, $d_f \cong 2.58$ e $d_f = 3$, tanto à temperatura nula quanto à temperaturas diferentes de zero para redes cuja temperatura crítica é finita ($T_f > 0$), determinando para cada rede o seu expoente de gota y e o expoente de caos ζ .

No Capítulo 2, realizamos uma breve revisão do grupo de renormalização. O Capítulo 3 é destinado às redes fractais, em especial a uma subclasse desta, as redes hierárquicas, mostrando como é gerada uma rede hierárquica e alguns exemplos de redes. No Capítulo 4, revisamos o conceito de vidro de spins com interações de curto alcance e o modelo proposto por Edwards e Anderson. Além disto, é feita uma revisão sucinta da teoria de gotas de Fisher e Huse e finalizamos aplicando o Grupo de Renormalização em um sistema de vidro de spins em uma rede hierárquica. No Capítulo 5, estudamos o comportamento caótico da fase vidro de spins em diversas redes fractais. Determinamos os expoentes de caos (ζ) e gota (y) da fase vidro de spins com interações de curto alcance em várias dimensões. Analisamos o comportamento caótico causado por: (i) perturbações nas constantes de acoplamento constantes à temperatura nula e (ii) perturbações devido à mudança na temperatura para $T < T_f$, em diferentes redes hierárquicas. Os resultados são apresentados em diversos gráficos.

Capítulo 2

Grupo de Renormalização

2.1 Introdução

O grupo de renormalização [21] é um poderoso método de física teórica usado para a investigação de vários problemas onde o número de graus de liberdade envolvidos é muito grande. Por exemplo, um cristal, um líquido ou um gás em quantidades macroscópicas envolvem mais de 10^{23} moléculas, e cada coordenada de cada molécula representa um grau de liberdade. Em contraste, a maioria dos métodos teóricos só funcionam bem quando se tem apenas poucos graus de liberdade independentes. Como exemplo, podemos olhar para equação de Schrödinger de uma função de onda $\psi(x, y, z)$ de um elétron. Para um potencial simples pode não ser difícil calcular ψ se pudermos separar as variáveis da equação de Schrödinger $\psi = \psi_r(r)\psi_\theta(\theta)\psi_\phi(\phi)$, porém se temos 10^{23} elétrons, essa tarefa não é nada fácil.

A questão é, como resolver um problema que tenha um número enorme de graus de liberdade? Uma solução seria a redução do tamanho do sistema, porém, isto nos leva a outra dúvida, até que ponto podemos reduzir o tamanho do sistema, preservando as suas propriedades físicas de interesse? O tamanho mínimo que podemos alcançar sem que haja alterações nas propriedades iniciais do sistema é chamado de comprimento de correlação. O comprimento de correlação ξ depende do estado em que o sistema se encontra. Para

um gás, ξ depende, por exemplo, da pressão e da temperatura. Quando ξ é pequeno em relação ao espaçamento médio entre as partículas, existem vários métodos que podem ser usados para calcular as propriedades do sistema, como a expansão viral, expansões por perturbação, etc., já que neste caso o número de graus de liberdade independentes é pequeno.

Em muitos casos, o comprimento de correlação é muito maior que o espaçamento atômico. Um exemplo é quando o sistema está próximo do ponto crítico. Transições ferromagnéticas, ordem-desordem em ligas, etc., todas exibem um ponto crítico para determinados valores das variáveis termodinâmicas. No ponto crítico de transições de fases contínuas, o comprimento de correlação ξ é infinito, e próximo ao ponto crítico o seu valor é muito grande.

O grupo de renormalização simplifica a tarefa de se trabalhar com muitos graus de liberdade contidos no volume com diâmetro da ordem do comprimento de correlação. A ideia básica da aproximação do grupo de renormalização é renormalizar os parâmetros do hamiltoniano que descreve o problema em termos de parâmetros renormalizados, de forma que se mantenham inalteradas as propriedades físicas de interesse do sistema.

O processo de renormalização é realizado em passos, a cada passo o número de graus de liberdade do sistema é reduzido, porém, isto não quer dizer que no final da renormalização o sistema tenha somente um grau de liberdade. Em um modelo de spins, onde inicialmente as variáveis estão separadas por L_o , após o primeiro passo de renormalização este espaçamento passa a ser de, por exemplo, $2L_o$, depois de dois passos o espaçamento é de $4L_o$, isto continua até o momento em que o espaçamento é da ordem de ξ . No início da renormalização o sistema possui um hamiltoniano \mathcal{H}_o , no próximo passo teremos uma redução nas variáveis e isso nos leva a um novo hamiltoniano \mathcal{H}_1 , e a cada novo passo teremos um novo hamiltoniano, até obtermos o \mathcal{H}_n para o qual $2^n L_o \sim \xi$.

O grupo de renormalização consiste em uma transformação τ que leva \mathcal{H}_o para \mathcal{H}_1 , \mathcal{H}_1 para \mathcal{H}_2 , etc. Então, temos uma transformação τ que pode ser aplicada sucessivamente :

$$\tau(\mathcal{H}_0) = \mathcal{H}_1, \quad \tau(\mathcal{H}_1) = \mathcal{H}_2 \quad \tau(\mathcal{H}_2) = \mathcal{H}_3, \quad \text{etc.} \quad (2.1)$$

Na criticalidade, temos um ponto crítico da transformação, onde

$$\tau(\mathcal{H}^*) = \mathcal{H}^*. \quad (2.2)$$

Isso se justifica porque na criticalidade o comprimento de correlação infinito garante a invariância do comportamento físico do sistema diante de mudanças nas escalas de comprimento. Para obtermos as constantes de acoplamento críticas do hamiltoniano \mathcal{H}^* devemos resolver a equação (2.2). Note que essa equação não faz referência ao hamiltoniano \mathcal{H}_0 .

2.2 Grupo de Renormalização de Kadanoff-Wilson

Nas proximidades da temperatura crítica T_c do sistema, o comprimento de correlação é muito maior que o espaçamento da rede e um cálculo direto do comportamento crítico requer que se leve em consideração todos os spins contidos em um volume da ordem do comprimento de correlação elevado à potência d (dimensão), tarefa nada fácil.

A construção de Kadanoff [22] permite que um problema com um comprimento de correlação muito grande seja transformado em outro de comprimento de correlação menor. Vamos analisar a construção de Kadanoff para uma rede plana. Considere um pequeno bloco com apenas quatro spins; considerando que estamos perto de T_c , o comprimento de correlação é grande, Kadanoff supôs que os quatro spins estão fortemente correlacionados, de tal forma que dois estados seriam altamente prováveis: todos apontando para cima ou todos apontando para baixo. É como se os quatro spins agissem como apenas um spin efetivo. Se agora $\xi = 1000$ em unidades do espaçamento da rede, Fig. 2.1, podemos formar vários blocos de quatro spins cada um. Assim cada bloco teria efetivamente apenas dois graus de liberdade, ou seja, pode ser representado por apenas uma variável de spin. Trocando a rede original pela rede efetiva, que agora terá $\xi = 500$ em unidades

do espaçamento da rede efetiva. Repetindo este processo, podemos reduzir ξ , para 250, 125, etc., até obtermos $\xi \sim 1$, o que significa poucos graus de liberdade. Então o problema pode ser resolvido pelos métodos usuais de perturbação, por exemplo.

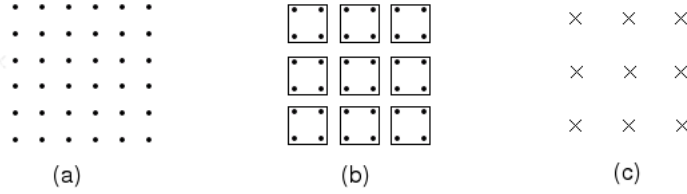


Figura 2.1: Construção de Kadanoff, (a) uma rede onde cada sítio tem um spin, (b) quatro spins formam um bloco, (c) uma nova rede é formada.

Kadanoff supôs que as interações são de curto alcance, assim um spin só interage com seus primeiros vizinhos. O hamiltoniano, H , da rede inicial é dado por

$$H = \sum_{n,i} K S_n^{(0)} S_{n+i}^{(0)}, \quad (2.3)$$

onde $K = -J/k_B T$ é a ligação de acoplamento inicial da rede, $S_n^{(0)}$ e $S_{n+i}^{(0)}$ podem assumir os valores ± 1 , n localiza os sítios sobre a rede e i denota os sítios vizinhos do sítio n . Após o primeiro passo de renormalização na Fig. 2.1, teremos um novo hamiltoniano em função das novas variáveis, $\{K_1\}$,

$$H^{(1)} = \sum_{n,i} K_1 S_n^{(1)} S_{n+i}^{(1)},$$

onde K_1 é a ligação de acoplamento entre os spins da nova rede e onde consideramos que $S_n^{(1)} = \pm 1$. Sendo que o número de ligações agora é menor, n também é menor. A diferença entre H e $H^{(1)}$ está na mudança de K para K_1 . Outra suposição de Kadanoff é a existência de uma função analítica, $f(K)$, o que implica, em nossa notação anterior, que $K_1 = K_1(K)$, tal que:

$$\xi[f(K)] = \frac{1}{2}\xi(K), \quad (2.4)$$

onde devemos ter,

$$K_c = f(K_c).$$

A Eq. (2.4) leva à solução $\xi = 0$, enquanto que no ponto crítico $\xi = \infty$. Para K próximo de K_c , podemos escrever:

$$f(K) = f(K_c) + \lambda(K - K_c),$$

e

$$f(K) - f(K_c) = \lambda(K - K_c), \quad (2.5)$$

onde $\lambda = \frac{df}{dK}$ para $K = K_c$. Com a suposição de que $\xi(K)$ comporta-se como $|K - K_c|^{-\nu}$ nas proximidades de K_c temos

$$\frac{\xi[f(K)]}{\xi(K)} = \left| \frac{f(K) - f(K_c)}{K - K_c} \right|^{-\nu}. \quad (2.6)$$

Com a ajuda das Eqs. (2.4) e (2.5) esta equação pode ser reescrita como

$$\frac{1}{2} = [\lambda]^{-\nu}. \quad (2.7)$$

Se for possível calcular $\lambda = \frac{df}{dK}|_{K=K_c}$, podemos então calcular ν da equação (2.7)

$$\nu = \ln 2 / \ln \lambda. \quad (2.8)$$

Um ponto importante da análise de Kadanoff é o fato de uma função analítica $f(K)$ gerar um comportamento não analítico para $\xi(K)$ no ponto crítico, onde $f(K_c) = K_c$.

Posteriormente, Wilson [23] propôs uma maneira de calcular as funções $f(K)$, tornando o Grupo de Renormalização uma ferramenta muito importante para o estudo dos fenômenos críticos.

Capítulo 3

Redes Hierárquicas

3.1 Introdução

De forma geral, fractal é uma forma geométrica n -dimensional com uma estrutura complexa que tem como principais características a invariância por escala, a auto-similaridade e em muitos casos, uma dimensão fractal que não é um número inteiro. Uma rede fractal $\{B\}$ é um sistema de pontos $B_0 \subset \{B\}$ conectados por ligações $B_l \subset \{B\}$ que satisfazem os seguintes critérios:

(i) $\{B\}$ não é invariante sobre uma transformação de translação, o que a difere de redes que têm dimensão inteira Euclideana;

(ii) $\{B\}$ é invariante sobre uma transformação de escala D , tal que

$$D\{B\} = \{B'\} = \lambda\{B\}.$$

Isto significa que cada elemento de $\{B\}$ é reescalado pelo mesmo fator λ .

Nesta nova classe de rede existe uma subclasse conhecida como rede hierárquica. Tais redes são de interesse para mecânica estatística dos fenômenos críticos, uma vez que modelos com spins clássicos, como os modelos de Ising e Potts, possuem solução exata em algumas redes hierárquicas específicas [24, 25, 26, 27]. Temos poucos modelos com

solução exata em redes de Bravais [28], como o a solução de Onsager [29] para o modelo de Ising em duas dimensões e a solução de Baxter [30] do modelo de oito vértices. As redes hierárquicas não são redes de Bravais, porém, em alguns casos elas são uma boa aproximação para uma rede de Bravais, podendo ser usadas para estudos aproximados.

Vários problemas complexos como a frustração [31], vidro de spins [32], ligações e campos aleatórios [33, 34], vibração de rede [35], dinâmica de escala [36], sistemas magnéticos aperiódicos [37], diagramas de fase complexos [38], etc., tem sido estudados sobre redes hierárquicas.

3.2 A geração de redes hierárquicas

O estudo de redes hierárquicas teve início no final da década de 70 [24, 39] e uma sistematização de um formalismo para a construção de redes hierárquicas foi feita por Griffiths e Kaufman em 1982 [25]. Podemos construir uma rede hierárquica de duas formas diferentes, as quais são chamadas de “agregação” e “miniaturização”.

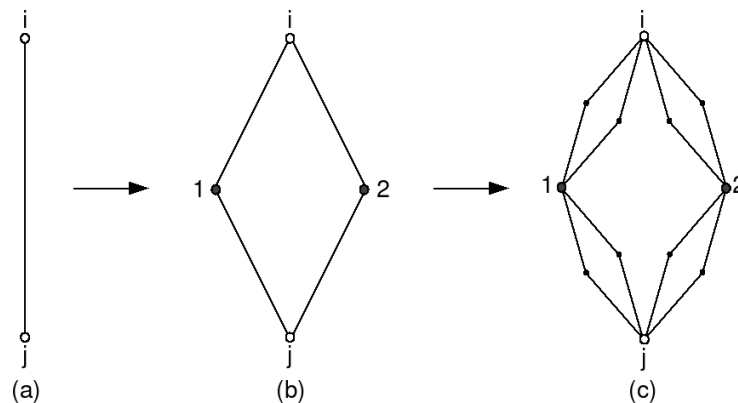


Figura 3.1: (a)-(c) Construção de uma rede hierárquica particular.

Em essência, estas duas interpretações refletem a estrutura auto-similar das redes hierárquicas, isto é, invariante por mudança de escala, permitindo calcular analiticamente suas características topológicas. A seguir vamos construir uma rede hierárquica do tipo

“diamante” [24], fazendo o uso dos dois processos. Primeiro vamos abordar a *agregação*: quatro ligação de ordem zero ou *primitiva*, Fig. 3.1(a), são unidas para formar uma nova “ligação” de ordem um ou unitária, Fig. 3.1(b); em seguida, outras quatro ligações de ordem um são unidas para formarem uma ligação de ordem dois, como mostrado na Fig. 3.1(c). Este processo pode ser repetido um número arbitrário de vezes para formar uma rede na ordem n .

Outra alternativa para a construção da mesma rede é pelo processo de miniaturização. Na Fig. 3.1(a) temos uma ligação de ordem $N(\geq 2)$, o que vemos é apenas a superfície dos sítios, com dois vértices, porém nenhuma estrutura interna é revelada. Já na Fig. 3.1(b) podemos ver que a ligação original é na verdade formada por quatro ligações de ordem $N - 1$. Para obter a Fig. 3.1(c), partimos da Fig. 3.1(b) e expandimos cada uma de suas ligação, de forma similar à realizada na passagem da Fig. 3.1(a) para a Fig. 3.1(b), agora as ligações são da ordem de $N - 2$. Novamente, este processo pode ser repetido por um número arbitrário de vezes.

Podemos definir alguns parâmetros para uma rede hierárquica:

(i) B é o número de agregação, sendo o número de subunidades unidas a cada passo para construir uma nova unidade. $B = 4$ na Fig. 3.1, ou seja, são necessárias quatro ligações de ordem zero para formar uma ligação de ordem um. Da mesma forma são necessárias quatro ligações de ordem um para formar uma ligação de ordem dois, e assim repete-se o processo até um número n de iterações;

(ii) b_n é o número de ligações sobre o menor caminho que conectam os dois spins das extremidades na ordem n . Na Fig. 3.1(b) temos $b = 2$;

(iii) g_n é o número de ligações sobre uma rede de ordem n ;

(iv) q_n é o número mínimo de ligações a serem cortadas para isolar um spin da extremidade. Na Fig. 3.1(c), $q_2 = 4$.

As redes hierárquicas são exemplos de redes fractais [40], assim a dimensão de uma rede hierárquica pode ser um número fracionário. A dimensão fractal de uma rede, d_f , é dada pela expressão:

$$d_f = \frac{\ln g_n}{\ln b_n}. \quad (3.1)$$

Esta definição para dimensão fractal para uma rede hierárquica permite que d_f seja um número fracionário ou inteiro, dependendo da rede. Quando d_f é um número inteiro a rede hierárquica pode ser considerada como uma aproximação de uma rede de Bravais.

Vamos definir a conectividade [40, 41], Q , como:

$$Q = \frac{\ln q_n}{\ln b_n}. \quad (3.2)$$

Os expoentes d_f e Q são definidos em uma rede hierárquica e são, respectivamente, os expoentes que governam como o número de ligações e número de corte mínimo em uma rede crescem como função de n . Em redes regulares, $d_f = 1 + Q$, mas em geral temos $d_f \geq 1 + Q$ para redes hierárquicas [42].

O Grupo de Renormalização de um sistema de spins clássicos é exato em uma rede hierárquica.

3.3 Exemplos de redes hierárquicas

Com o procedimento de agregação ou miniaturização podemos gerar várias redes hierárquicas. Assim, construímos uma rede diamante, Fig. 3.1(b), onde $b = 2$, $g = 4$ e com o auxílio da Eq. (3.1) encontramos a dimensão fractal da rede $d_f = 2$.

Podemos representar o modelo de Ising na rede diamante associando a variável de spin $S_i = \pm 1$ ao i -ésimo sítio da rede; na Fig. 3.1(a) podemos escrever o seguinte hamiltoniano

$$H^{(0)} = K_0 S_i S_j, \quad (3.3)$$

onde $H^{(0)} = -\mathcal{H}/k_B T$ é adimensional e K_0 é a constante de interação adimensional. Também podemos introduzir um campo magnético, h , se necessário. Na Fig. 3.1(b) o

hamiltoniano leva em conta a contribuição de cada ligação primitiva que forma a rede e é dado por

$$H^{(1)} = K_0(S_i S_2 + S_2 S_j + S_j S_1 + S_1 S_i). \quad (3.4)$$

Assim como é possível colocar o modelo de Ising em uma rede tipo diamante, também é possível colocar o modelo de Potts [43], modelo XY, modelo de vidro de spins, etc., em uma rede diamante ou uma outra rede hierárquica.

Podemos construir uma variedade enorme de redes, alguns exemplos de redes e suas células elementares estão nas Figs. 3.2, 3.3 e 3.4. Na Fig. 3.2(b) temos uma rede onde $b_1 = 2$, $g_1 = 6$ e uma dimensão fractal $d_f = \ln 6 / \ln 2 \simeq 2.58$. Na Fig. 3.2(c) temos uma rede com $b_1 = 2$, $g_1 = 8$ e $d_f = 3$, sendo que ambas as redes pertencem à família da rede diamante.

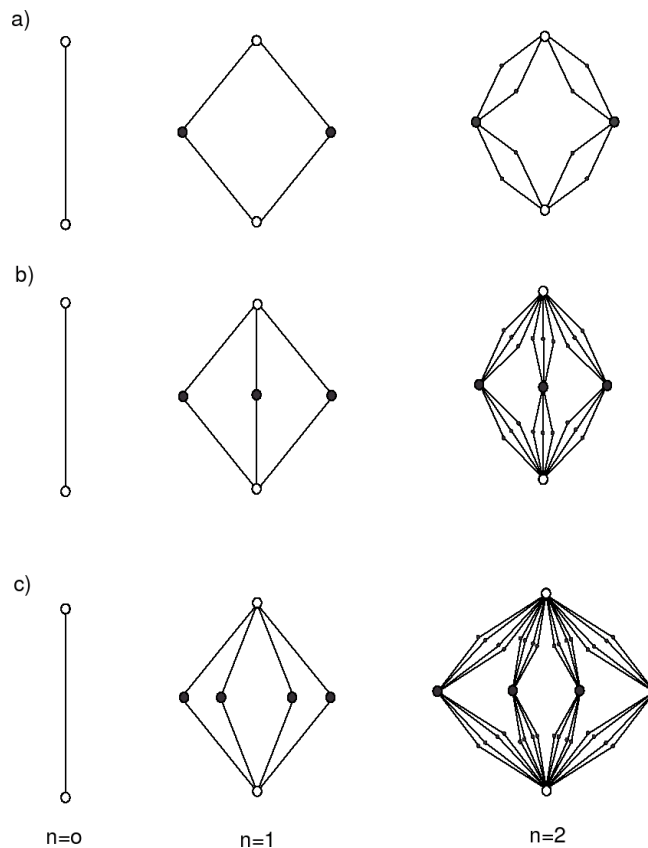


Figura 3.2: Exemplos de redes hierárquicas. Em (a), (b) e (c) são mostrados os três primeiros passos, n , de um processo iterativo.

Nas Figs. 3.3 e 3.4 temos mais alguns exemplos de redes. Na Fig. 3.3(a) e (b), temos redes hierárquicas do tipo trança; na primeira temos $b = 2$, $g = 4$ e $d_f = 2$ e na segunda temos $b = 2$, $g = 8$ e $d_f = 3$. Para mais exemplos de redes hierárquicas ver [25], [26] e [27].

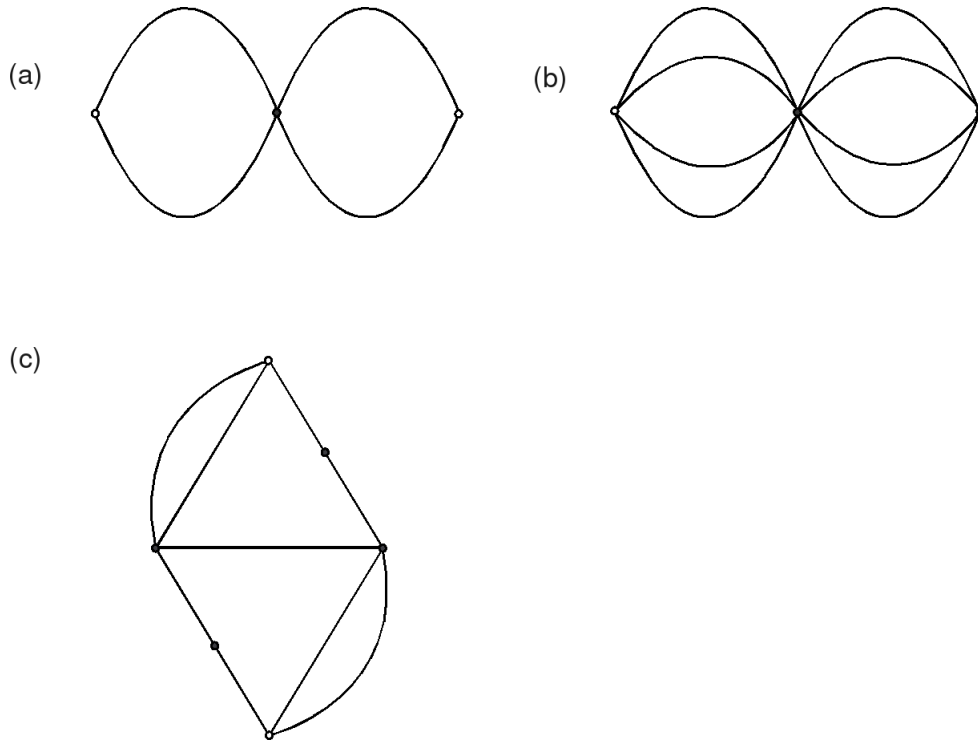


Figura 3.3: Unidades geradoras de redes hierárquicas. Em (a) $d_f = \ln 4 / \ln 2 = 2$, (b) $d_f = \ln 8 / \ln 2 = 3$ e (c) $b = 3$ e $d_f = \ln 9 / \ln 3 = 2$.

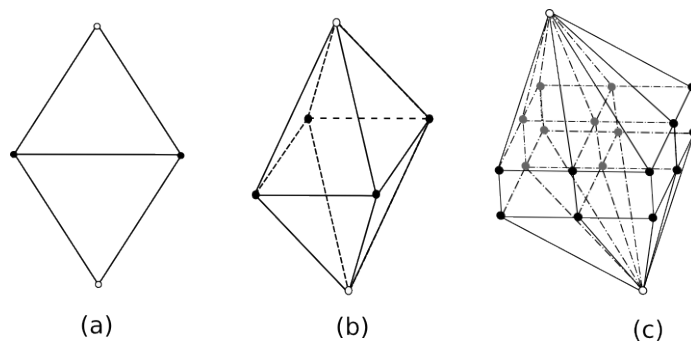


Figura 3.4: Células de redes hierárquicas conhecidas como ponte de Wheatstone. Em (a) temos $b = 2$ e $d_f = \ln 5 / \ln 2 \simeq 2.32$, em (b) $b = 2$ e $d_f = \ln 12 / \ln 2 \simeq 3.58$ e em (c) $b = 3$ e $d_f = \ln 42 / \ln 3 \simeq 3.40$.

Capítulo 4

Vidro de Spins

4.1 Introdução

Os primeiros trabalhos sobre “vidro de spins” (nome dado por B. R. Coles para uma classe de ligas diluídas devido à sua semelhança com os vidros) surgiram na década de 70, como uma ramificação da física dos sistemas magnéticos desordenados. Nos anos seguintes houve uma intensa atividade por parte dos físicos teóricos e experimentais que levaram à descoberta de novos fenômenos relacionados a vidros de spin, porém, até o presente momento, muitas questões referentes aos vidro de spins estão ainda em aberto. Atualmente um grande número de técnicas analíticas têm sido desenvolvidas com o objetivo de estudar a fase vidro de spins e além disso, essas técnicas têm disponibilizado novas ferramentas matemáticas e ajudado na compreensão de problemas relacionados com o processo de informação, incluindo redes neurais, restauração de imagens e otimização de problemas [44], etc..

Vidro de spins consiste em um conjunto de momentos magnéticos (spins) que, abaixo de uma temperatura T_f , apresenta uma ordem magnética local porém aleatória sobre uma rede, o que é bem diferente das fases magnéticas bem conhecidas, como ferromagnética, antiferromagnética, etc. Os vidros de spins são formados a partir de metais nobres (*Au, Ag, Cu, Pt*) fracamente diluídos com íons de metais de transição magnéticos, como

Fe e *Mn*. Os átomos magnéticos ocupam posições aleatórias na rede e devido aos elétrons de condução dos íons não-magnéticos surgem interações de troca indiretas entre os íons magnéticos, conhecidas como RKKY (Ruderman e Kittel [45], Kasuya [46] e Yosida [47]). Estas interações têm um caráter oscilatório para grandes distâncias R , e podem ser escritas como

$$J(R) = J_0 \frac{\cos(2k_F R + \varphi_0)}{(k_F R)^3}, \quad (4.1)$$

onde J_0 e φ_0 são constantes, e k_F é o vetor de onda de Fermi do metal. Como a distância entre os spins são aleatórias, algumas interações de um spin qualquer com outro spin poderão ser positivas, favorecendo assim um alinhamento paralelo entre os spins ou poderão ser negativas, favorecendo assim um alinhamento antiparalelo entre os spins. Isto nos leva a um congelamento estrutural dos momentos magnéticos de forma aleatória sobre a rede para $T < T_f$ além de gerar uma frustração¹ no sistema (ver Fig. 4.1). Devido à existência de frustração, o estado fundamental (configuração de menor energia possível) da fase vidro de spins é altamente degenerado, visto que não se pode obedecer a todas as interações simultaneamente, apresentando assim vários arranjos diferentes, todos aproximadamente com a mesma energia.

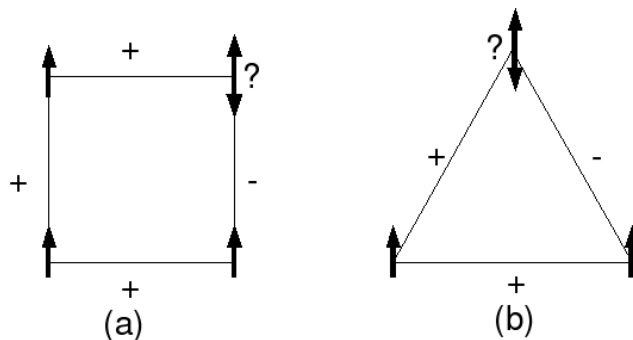


Figura 4.1: Sistemas com quatro e três spins que apresentam frustração. Nestes dois casos as intensidades das interações são iguais diferindo apenas no sinal. Verifica-se que existe mais de uma configuração no estado fundamental, ou seja, ele é degenerado.

Fenômenos característicos observados em vidro de spins, tais como um pico agudo na susceptibilidade dependente da frequência em campos magnéticos pequenos, foi primeiro

¹Frustração é a incapacidade de se obter uma configuração que satisfaça todas as interações do sistema.

observado no trabalho experimental de Cannella e Mydosh [1] em 1972, sendo claramente uma característica universal: o pico ocorre em uma liga metálica diluída $CuMn$ com 0,9% de Mn (Fig. 4.2), assim como no isolante concentrado $Eu_xSr_{1-x}S$. Isto era um forte indício de que poderia existir uma temperatura crítica para tais sistemas, T_f . Assim, quando o sistema encontra-se acima desta temperatura, os spins tornam-se praticamente independentes uns dos outros, ou seja, sua orientação é fracamente influenciada por seus vizinhos; a configuração do sistema é completamente desordenada. Abaixo de T_f é observado o “congelamento” de forma aleatória dos momentos magnéticos do sistema.

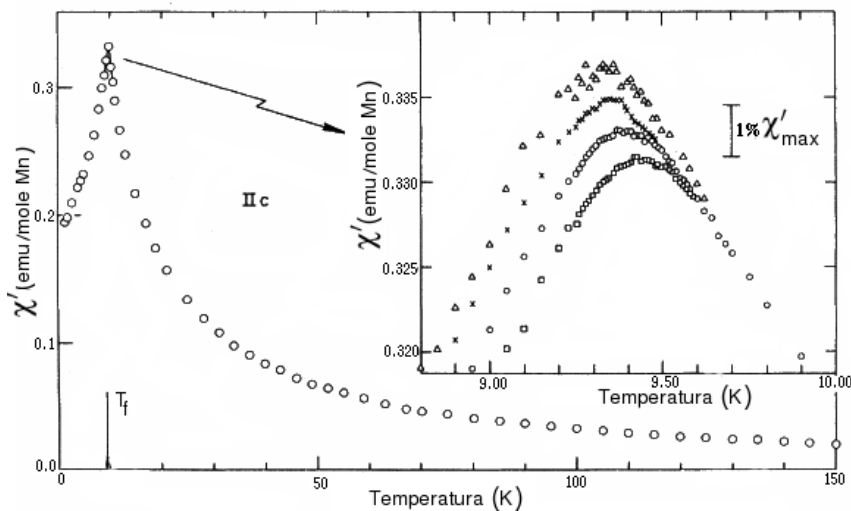


Figura 4.2: A susceptibilidade como uma função da temperatura para amostras de $CuMn$ com 0.9% Mn . Frequências medidas: \square , $1.33kHz$; \circ , $234Hz$; \times , $104Hz$; \triangle , $2.6Hz$. Extraído de Mulder *et al.* [48].

Uma propriedade de vidro de spins é a diferença de comportamento da susceptibilidade para baixas temperaturas na presença de um campo (“field cooled” ou FC) ou na ausência de campo (“zero field cooled” ou ZFC). Resultados em FC são obtidos expondo uma amostra do material a um pequeno campo h obtendo uma magnetização M para temperaturas acima de T_f . A amostra é então resfriada na presença do campo. Alternativamente, a amostra pode ser resfriada na ausência de campo (ZFC), e em seguida aplica-se o campo para uma temperatura abaixo de T_f . Verifica-se que estes dois métodos

dão resultados bem diferentes, que podem ser vistos na Fig. 4.3 para o caso do $CuMn$ [49]. A susceptibilidade FC, χ_{FC} , é maior e aproximadamente constante abaixo de T_f . A medida de χ_{FC} é, com boa aproximação, reversível; isto é, podemos aumentar e diminuir a temperatura e medir a mesma susceptibilidade, independente de sua história. Na susceptibilidade ZFC, χ_{ZFC} , quando o campo é aplicado abaixo de T_f , a susceptibilidade aumenta lentamente o seu valor.

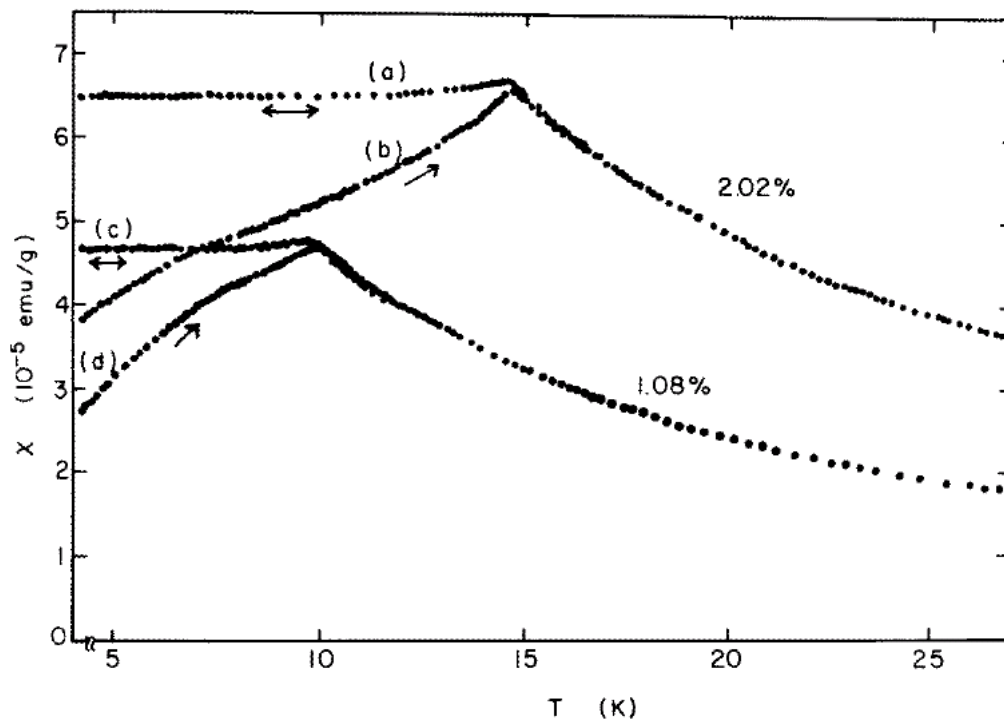


Figura 4.3: Suscetibilidade de $CuMn$ vs temperatura para 1.08% e 2.02% Mn . Em (a) e (c) Campo constante (FC) e (b) e (d) campo nulo (ZFC). Extraído de Nagata *et al.* [49].

Em meados da década de 70 surgiram os primeiros modelos com o objetivo de compreender a fase vidro de spins, e dois modelos merecem destaque especial: o modelo de Edwards-Anderson (EA) [4], que é um sistema spins em uma rede com interações positivas e negativas aleatórias entre primeiros vizinhos, e que consiste em uma versão aleatória para o modelo de Ising clássico; o modelo de Sherrington-Kirkpatrick (SK) [5], proposto como um modelo de campo médio do modelo EA, com interações de alcance infinito, ou seja, todos os spins interagem uns com os outros de forma igual.

O modelo SK, apesar de um modelo de campo médio, foi proposto para se ter uma compreensão da natureza das transições de um vidro de spins, assim como o modelo de Curie-Weiss nos dá uma compreensão parcial das transições de fase ferromagnéticas. O modelo SK foi resolvido usando a hipótese da simetria de réplicas. Entretanto, esta solução é instável em baixas temperaturas [5]; em particular, a entropia encontrada é negativa para baixas temperaturas. Almeida e Thouless [6] estudaram a estabilidade da solução do modelo no plano $T - H$ e calcularam a fronteira entre as regiões onde a solução é estável e a região onde a solução é instável. A linha que separa estas duas regiões é conhecida como linha AT, ou seja, acima da linha AT a solução de SK com simetria de réplicas é válida e abaixo desta linha a simetria de réplicas é quebrada. Ainda não existe um consenso no meio científico se a linha AT está presente em modelos mais realistas de vidro de spins.

A solução do modelo SK abaixo da linha AT foi encontrada por Parisi através do método de “quebra de simetria de réplicas” (replica-symmetry breaking (RSB)), que envolve conceitos matemáticos nada convencionais, além de revelar que o limite termodinâmico deste modelo é descrito por uma estrutura altamente complexa. Neste cenário, existem muitos estados de equilíbrio, e um único parâmetro de ordem não é suficiente para descrever a fase vidro de spins. Na solução de Parisi, abaixo da linha AT, o parâmetro de ordem não é caracterizado por um número, e sim por uma função, $q(x)$ ($0 \leq x \leq 1$), que varia continuamente. Neste cenário uma característica da fase vidro de spins de campo médio é a existência de um grande número (infinito quando o número de spins $N \rightarrow \infty$) de vales de energia livre separados por barreiras de energia que divergem no limite termodinâmico. Cada um destes vales corresponde a um estado termodinâmico. Em cada um destes vales, existe uma grande diversidade de subvales que são separados por barreiras finitas de energia. Estes subvales produzem soluções metaestáveis, distorcendo a métrica do espaço (ultrametricidade).

4.2 O modelo de Edwards-Anderson (EA)

Edwards e Anderson criaram um modelo simplificado para os vidros de spins. No modelo de EA os momentos magnéticos S_i (assumidos serem do tipo Ising, $S_i = \pm 1$) são colocados em uma rede regular de Bravais, e seu Hamiltoniano, na ausência de um campo externo, é dado pela expressão

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} S_i S_j, \quad (4.2)$$

onde a soma $\sum_{\langle i,j \rangle}$ está limitada aos pares de spins distintos que são primeiros vizinhos na rede e suas interações J_{ij} , entre os pares $\langle i,j \rangle$, são variáveis aleatórias, assumindo valores positivos e negativos, e determinadas por uma distribuição de probabilidades $P(J_{ij})$. Geralmente adota-se uma distribuição Gaussiana, ou uma distribuição bimodal para $P(J_{ij})$. Suas formas são

$$P(J_{ij}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi J^2}} \exp \left[-\frac{(J_{ij} - J_0)^2}{2J^2} \right], \quad (4.3)$$

$$P(J_{ij}) = p\delta(J_{ij} - J) + (1-p)\delta(J_{ij} + J), \quad (4.4)$$

respectivamente. A Eq. (4.3) é uma distribuição Gaussiana com média J_0 e com variância J^2 , enquanto na Eq. (4.4) J_{ij} ou é J (> 0) com probabilidade p ou $-J$ com uma probabilidade $(1-p)$.

Em uma fase vidro de spins em equilíbrio, cada spin S_i terá um valor esperado $\langle S_i \rangle$ diferente de zero, podendo ser positivo ou negativo; assim um novo parâmetro de ordem termodinâmico q_{EA} (geralmente chamado de parâmetro de ordem de Edwards-Anderson [4]), é introduzido para descrever o congelamento dos momentos magnéticos de forma aleatória,

$$q_{EA} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N [\langle S_i \rangle_T^2]_{av}, \quad (4.5)$$

onde $\langle \dots \rangle_T$ representa uma média térmica e $[\dots]_{av}$ uma média sobre a desordem das interações aleatórias. Em uma fase vidro de spins o valor da magnetização local $\langle S_i \rangle_T$ flutuará tanto no seu valor quanto no sinal de sítio para sítio, de tal forma que o parâmetro de ordem magnetização,

$$m = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N [\langle S_i \rangle_T]_{av}, \quad (4.6)$$

é igual a zero quando o volume da rede tende para o infinito. Porém nesta fase o novo parâmetro de ordem q_{EA} é diferente de zero ($q_{EA} \neq 0$) e acima de uma temperatura crítica T_f , $q_{EA} = 0$; em uma fase paramagnética temos $m = q_{EA} = 0$ ($\langle S_i \rangle_T = 0$) e em uma fase ferromagnética temos uma magnetização $m \neq 0$ assim como $q_{EA} \neq 0$, ou seja, $\langle S_i \rangle_T \neq 0$.

O cálculo de quantidades físicas usando o Hamiltoniano (4.2) é realizado através da energia livre, que para um dado conjunto de J_{ij} (temperados), obtidos de uma distribuição de probabilidades $P(J_{ij})$,

$$F = -\frac{1}{\beta} \ln \text{Tre}^{-\beta\mathcal{H}}, \quad (4.7)$$

onde $\beta = 1/k_B T$ (k_B é a constante de Boltzmann), e o traço é realizado sobre as variáveis de spin S_i , lembrado que $\text{Tre}^{-\beta\mathcal{H}}$ é a função de partição \mathcal{Z} do sistema. Nota-se na Eq. (4.7) que a energia livre é uma função das interações J_{ij} , sendo agora necessário obter a média sobre a distribuição de J_{ij} , chamada aqui de média sobre a desordem, que é dada por

$$[F]_{av} = -\beta^{-1} [\ln \mathcal{Z}]_{av} = -\beta^{-1} \int \prod_{ij} dJ_{ij} P(J_{ij}) \ln \mathcal{Z}. \quad (4.8)$$

Através da diferenciação desta energia livre $[F]_{av}$ obtemos quantidades físicas como:

- Magnetização: $m = -\frac{\partial [F]_{av}}{\partial h}$,

- Energia Interna: $U = [F]_{av} - T \frac{\partial [F]_{av}}{\partial T}$.

Na prática, o cálculo da média sobre a desordem de $[\ln \mathcal{Z}]_{av}$ em sistemas de vidro de spins é muito complicado. Um caminho alternativo para facilitar tal tarefa é conhecido como *método das réplicas* [2, 7], onde parte das complicações são contornadas usando-se a relação

$$[\ln \mathcal{Z}]_{av} = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{([\mathcal{Z}^n]_{av} - 1)}{n}. \quad (4.9)$$

O número n representa o número de réplicas do sistema original, de tal forma que se obtém a média sobre a desordem do produto de suas funções de partição \mathcal{Z}^n , e realiza-se o limite $n \rightarrow 0$. Usa-se esta técnica pois é mais fácil calcular $[\mathcal{Z}^n]_{av}$ do que $[\ln \mathcal{Z}]_{av}$.

4.3 O modelo de gotas

A compreensão do comportamento de vidros de spins de curto alcance, com interações entre primeiros vizinhos, apresenta grande dificuldade. Apesar do desenvolvimento da teoria de campo médio, a sua validade para vidro de spins reais é um ponto de controvérsia no meio científico.

Um quadro alternativo ao de campo médio muito interessante para a fase vidro de spins foi desenvolvido ao longo dos anos por vários autores (Bray e Moore [11]; McMillan [12]; Fisher e Huse [13, 14, 15]; Newman e Stein [50, 51, 52]) e é chamado de “modelo de gotas” (“droplet model”). No quadro de gotas, o cenário físico descrito está em contraste com a teoria de campo médio. Assim temos dois cenários importantes, o cenário de gotas e o cenário de campo médio, e uma questão em aberto é, qual dos dois cenários descreve melhor uma fase vidro de spins em três dimensões para baixas temperaturas?

Gotas são definidas como excitações coletivas de alguns estados puros abaixo da temperatura de transição de fase. Fisher e Huse [15] definiram gota do seguinte modo:

- Define-se uma gota $D_L(j)$ com escala de comprimento L a qual contém o sítio j ,

como um aglomerado de spins com a menor energia de excitação que contenha mais que L^d e menos que $(2L)^d$ spins. A energia de $D_L(j)$ é,

$$F_L(j) = \min_{C_N \supset j} (E_{C_N}), \quad (4.10)$$

onde $L^d \leq N < (2L)^d$, sendo que o mínimo é sobre todos os aglomerados conectados C_N de N spins, sendo que N está no intervalo entre L^d e $(2L)^d$ onde está contido o sítio j , e E_c é a energia necessária para inverter um aglomerado C .

Para uma temperatura positiva, consideramos a energia livre F ao invés da energia. Em um sistema ferromagnético, um aglomerado genérico (um conjunto de spins com sinal positivo imersos em um mar de spins com sinal negativo, por exemplo) de escala L tem uma energia de interface que escala com L^{d-1} , entretanto, no quadro de gotas para vidro de spins, espera-se que a excitação da gota tenha uma energia muito menor, obedecendo a lei de escala:

$$F_L(j) \sim L^y, \quad (4.11)$$

onde y é chamado de expoente da gota (“droplet exponent”; em algumas referências é usado θ para designar tal expoente). Este expoente desempenha um papel importante no modelo de gotas, revelando como a energia escala com o comprimento.

O sistema encontra-se ordenado (vidro de spins) em baixas temperaturas somente quando $y > 0$, ou seja, quando o sistema escala para fortes acoplamentos. Neste caso existe uma temperatura crítica para o sistema diferente de zero ($T_f \neq 0$). Para $T < T_f$ o custo energético para inverter os spins é muito alto, logo a sistema permanece com sua estrutura fixa no tempo e apresentando frustração, o que caracteriza uma fase vidro de spins. Por outro lado, se o expoente é negativo, ou seja, $y < 0$, verificamos que o sistema escala para acoplamentos fracos. Nesta situação o custo energético necessário para inverter os spins é pequeno ($F_L(j) \sim 1/L^{|y|}$, tendendo a zero quando $L \rightarrow \infty$), assim **não** existe uma fase vidro de spins para temperaturas diferentes de zero. Quando

ocorre uma mudança de fase em $T = 0$ é comum dizer que sua temperatura crítica é $T_f = 0$, que é o que acontece na dimensão crítica inferior² (“lower critical dimension” (LCD)).

Tabela 4.1: Valores numéricos encontrados para o expoente y em redes de Bravais.

Autor (ano)	Distribuição	Dimensão d	$\approx y$
Hartmann (2008)	Bimodal	2	-0.29
Boettcher e Hartmann (2005)	Gaussiana	2	-0.282
Bray e Moore (1984)	Gaussiana	2	-0.3
Katzgraber e Krzakala (2007)	Gaussiana	3	0.2
Boettcher (2005)	Bimodal	3	0.24
Carter, Bray e Moore(2002)	Gaussiana	3	0.27
Aspelmeier, Bray e Moore (2002)	Gaussiana	3	0.25519 ± 0.00005
Hartmann (1999)	Bimodal	3	0.19
Bray e Moore (1984)	Gaussiana	3	0.2

Para se saber se existe uma fase de vidro de spins em um sistema particular é necessário determinar se o expoente y é positivo para temperatura zero. Na tabela 4.1 temos valores numéricos do expoente y em $d = 2$ e $d = 3$ obtidos por diferentes autores [18, 20, 53, 54, 55, 56, 57, 58]; verifica-se que $y > 0$ para $d = 3$ e $y < 0$ para $d = 2$. Assim a dimensão crítica inferior [59] d_{LCD} satisfaz a relação $2 < d_{LCD} < 3$. Para vidro de spins, em uma rede hierárquica diamante, d_{LCD} é ligeiramente inferior a 2.58[60] .

Para $d < d_{LCD}$ o expoente y determina a divergência do comprimento de correlação ξ quando $T \rightarrow 0$, sendo que

$$y = -1/\nu, \quad (4.12)$$

onde ν é o expoente do comprimento de correlação.

²A dimensão crítica inferior (LCD) do sistema é a dimensão abaixo da qual o sistema não apresenta uma transição de fase para uma temperatura diferente de zero.

Para $d > d_{LCD}$, y determina as propriedades de escala para a fase ordenada, como a forma das funções de correlação [13, 61, 62] com uma distribuição contínua de ligações na ausência de campo magnético,

$$[\langle S_i S_j \rangle^2]_{av} - [\langle S_i \rangle^2]_{av} [\langle S_j \rangle^2]_{av} \sim \frac{T}{\Upsilon R^y}, \quad (4.13)$$

para temperatura próxima de zero. Υ é o módulo de rigidez, R é a distância entre o sítio i e o sítio j sendo que a média térmica $\langle \dots \rangle$ é realizada em um único estado puro. Uma questão em aberto diz respeito ao número de estados puros em um vidro de spins [63]. No cenário de gotas de Fisher e Huse é assumido que existem apenas dois estados puros, diferente do modelo SK onde existe um grande número.

É esperado que o expoente y seja menor que $d - 1$ em um vidro de spins, e Fisher e Huse [15] determinaram um limite superior para y como sendo

$$y \leq \frac{d-1}{2}. \quad (4.14)$$

Portanto, a energia livre de interface de uma gota de escala L cresce mais lentamente do que L elevado à área da interface. Devido à aleatoriedade, excitações de grandes gotas podem ter uma forma complicada e igualmente uma topologia não trivial. De modo geral, uma gota tem uma superfície fractal, onde a área é dada por

$$A_L \sim L^{d_s}, \quad (4.15)$$

sendo d_s a dimensão fractal da superfície da gota. Em geral temos que

$$d_s > d - 1. \quad (4.16)$$

Através de um ansatz de escala, a distribuição $P_L(F_L)$ da energia livre de uma gota

para uma escala L assume a forma [15]

$$P_L(F_L) \approx \frac{1}{\Upsilon L^y} \tilde{P}_L\left(\frac{F_L}{\Upsilon L^y}\right). \quad (4.17)$$

A função de escala $\tilde{P}_L(x)$ é contínua e não se anula para $x = 0$, sendo normalizada de tal forma que

$$\int \tilde{P}(x) dx = 1.$$

Para grandes valores de L , $\tilde{P}_L \rightarrow \tilde{P}_\infty$, tornando-se uma função independente de L .

4.4 Renormalização de vidro de spins em redes hierárquicas

O grupo de renormalização (GR) é também uma importante ferramenta no estudo de vidro de spins. A ideia básica é a remoção de graus de liberdade do sistema por meio de uma traço parcial, obtendo assim novos acoplamentos efetivos entre os spins restantes. Em sistemas aleatórios estas interações entre os graus de liberdade são governadas por acoplamentos que são variáveis aleatórias obedecendo a uma distribuição de probabilidades. Algumas distribuições utilizadas são:

- A distribuição Gaussiana,

$$P(J_{ij}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(-J_{ij}^2/2).$$

- A distribuição uniforme,

$$P(J_{ij}) = \begin{cases} \frac{1}{2\sqrt{3}} & \text{se } |J_{ij}| \leq \sqrt{3}, \\ 0 & \text{para outro valor.} \end{cases}$$

- A distribuição exponencial,

$$P(J_{ij}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \exp(-\sqrt{2}|J_{ij}|).$$

Sendo J_{ij} os acoplamentos entre os sítios da rede, em todos os casos acima temos média zero e variância um.

Para cada passo de renormalização teremos uma nova distribuição de probabilidades, diferente da distribuição original. Um dos objetivos do GR em sistemas de vidro de spins, onde podemos considerar a distribuição inicialmente como sendo simétrica e supondo que a mesma permanecerá simétrica ao longo do procedimento de GR, é seguir a distribuição através dos vários passos da renormalização, podendo assim verificar se sua variância está aumentando ou diminuindo.

Quando o sistema se encontra na fase paramagnética, onde o comprimento de correlação é pequeno, a variância da distribuição tende a diminuir a cada iteração. Se a variância estiver aumentando a cada iteração, interpreta-se isto como sendo uma fase de ordem de vidro de spins, onde os acoplamentos podem assumir um grande número de valores, positivos e negativos.

Conseqüentemente existem dois pontos fixos da distribuição especificados por uma variância J^2 e uma média J_0 :

1. $J^2 = J_0 = 0$
2. $J^2 \rightarrow \infty, J_0/J^2 \rightarrow 0.$

Realizar o processo de renormalização em redes de Bravais com dimensão maior que um, geralmente leva a um grupo de renormalização atuando em um espaço de dimensão infinita. Uma forma de se contornar tais dificuldades consiste em utilizar redes aproximadas que preservem simetrias importantes da rede original e que permitam estudar o grupo de renormalização em um espaço de dimensão reduzida. Um exemplo de tais redes são as redes fractais, como por exemplo as redes hierárquicas.

Vamos considerar uma rede hierárquica de dimensão fractal $d_f = 2$ e $b = 2$, como mostrado na Fig. 4.4(a), tal que temos dois caminhos unidimensionais paralelos, cada um contendo duas ligações em série. Para uma dimensão geral d_f , o número de caminhos paralelos será dado pela relação b^{d_f-1} . Neste caso, após o traço parcial dos spins marcados com um círculo ●, ficamos apenas com dois spins e uma única ligação efetiva como mostrado na Fig. 4.4(c).

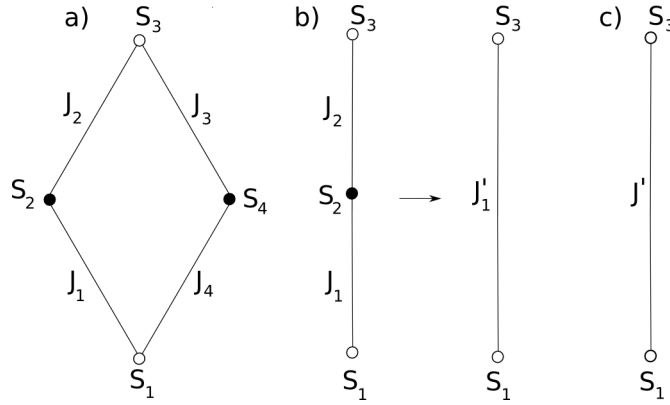


Figura 4.4: Esquema de renormalização para uma rede de diamante, com $b = 2$ e $d_f = 2$. Em (a) a célula da rede hierárquica com 4 ligações; em (b) é mostrado o traço em S_2 , o mesmo deve se feito com S_4 ; em (c) a ligação efetiva resultante do traço parcial sobre S_2 e S_4 .

Olhando para uma das ligações em série da Fig. 4.4(b), vemos que se trata de um problema unidimensional com apenas três spins, onde o traço é realizado no spin central. O Hamiltoniano para este caminho da rede é dado por:

$$\mathcal{H}_1 = -J_1 S_1 S_2 - J_2 S_2 S_3. \quad (4.18)$$

A função de partição será,

$$\mathcal{Z}_1 = \sum_{\{S_i\}} e^{-\beta \mathcal{H}_1} = \sum_{S_1} \sum_{S_2} \sum_{S_3} e^{(K_1 S_1 S_2 + K_2 S_2 S_3)}, \quad (4.19)$$

onde $\beta = 1/k_B T$ e $K_i \equiv \frac{J_i}{k_B T}$ ($i = 1, 2$). Sabemos que

$$e^{K_i S_i S_{i+1}} = \cosh(K_i) + S_i S_{i+1} \sinh(K_i), \quad (4.20)$$

e então substituindo a Eq. (4.20) na Eq. (4.19), temos

$$\mathcal{Z}_1 = \sum_{S_1} \sum_{S_2} \sum_{S_3} [\cosh(K_1) + S_1 S_2 \sinh(K_1)] [\cosh(K_2) + S_2 S_3 \sinh(K_2)],$$

$$\begin{aligned} \mathcal{Z}_1 = & \sum_{S_1} \sum_{S_2} \sum_{S_3} [\cosh(K_1) \cosh(K_2) + S_2 S_3 \cosh(K_1) \sinh(K_2) + S_1 S_2 \sinh(K_1) \cosh(K_2) \\ & + S_1 S_2^2 S_3 \sinh(K_1) \sinh(K_2)]. \end{aligned} \quad (4.21)$$

Realizando o processo de dizimação da rede, eliminamos S_2 fazendo $S_2 = \pm 1$ e obtemos

$$\mathcal{Z}_1 = \sum_{S_1} \sum_{S_3} 2 [\cosh(K_1) \cosh(K_2) + S_1 S_3 \sinh(K_1) \sinh(K_2)], \quad (4.22)$$

ou

$$\mathcal{Z}_1 = 2 \cosh(K_1) \cosh(K_2) \sum_{S_1 S_3} (1 + S_1 S_3 t_1 t_2), \quad (4.23)$$

onde $t_i = \tanh(K_i)$ ($i = 1, 2$). A função de partição obtida na Eq. (4.23) é equivalente à função de partição de uma rede que contém apenas dois spins, S_1 e S_3 , ou seja,

$$\mathcal{Z}'_1 = A \sum_{S_1, S_3} e^{-\beta \mathcal{H}'} = A \sum_{S_1, S_3} e^{K'_1 S_1 S_3}, \quad (4.24)$$

onde $K'_1 = \frac{J'_1}{k_B T}$. Como $\mathcal{Z}_1 = \mathcal{Z}'_1$, onde A é uma constante independente de S_1 e S_3 , obtemos a seguinte relação,

$$\tanh(K'_1) = t_1 t_2 = \tanh(K_1) \tanh(K_2), \quad (4.25)$$

Então temos,

$$K'_1 = \operatorname{arctanh}[\tanh(K_1)\tanh(K_2)]. \quad (4.26)$$

Assim obtemos a relação de recorrência para K'_1 , a nova ligação efetiva. De modo idêntico isto é feito para o outro caminho, e encontramos K'_2 , de forma que agora temos duas ligações em paralelo, assim a nova ligação efetiva da rede será:

$$K' = K'_1 + K'_2. \quad (4.27)$$

Este resultado vale para uma temperatura diferente de zero. Quando a temperatura é igual a zero, a relação de recorrência deve mudar. Isto é feito realizando a seguinte mudança,

$$\operatorname{arctanh}[\tanh(K_1)\tanh(K_2)] \xrightarrow{T \rightarrow 0} \operatorname{sgn}(J_1 J_2) \min(|J_1|, |J_2|), \quad (4.28)$$

então,

$$J'_1 = \operatorname{sgn}(J_1 J_2) \min(|J_1|, |J_2|), \quad (4.29)$$

sendo $\operatorname{sgn}(x) = 1$ (-1) para $x > 0$ ($x < 0$). A Eq. (4.29) mostra que a contribuição de cada caminho é determinada pela ligação mais fraca ao longo do caminho. Este resultado é válido para qualquer b .

Capítulo 5

Vidro de Spins - Expoente de caos

5.1 Introdução

As teorias de escala e campo médio sugerem que a fase vidro de spins tenha um comportamento caótico, existindo assim uma sensibilidade do estado de equilíbrio com relação às pequenas perturbações. O termo “caos” significa que o estado de equilíbrio da fase vidro de spins, onde os momentos magnéticos estão congelados estruturalmente de forma aleatória, é totalmente reorganizado devido a uma pequena mudança de um parâmetro externo, tal como a temperatura (T) ou o campo magnético (h). Uma pequena perturbação nas constantes de acoplamento também pode gerar um comportamento caótico da fase vidro de spins.

Vamos analisar este comportamento caótico no modelo de gotas, onde supõe-se que existam apenas dois estados de equilíbrio. Quando as constantes de acoplamento do sistema são perturbadas, as funções de correlação reorganizam-se completamente para escalas de comprimento maiores que L^* . Se considerarmos J e $J + \delta J$ como sendo o acoplamento sem perturbação e o perturbado, respectivamente, o estado fundamental é instável para escalas de comprimento maiores que

$$L^* \sim \left(\frac{J}{\delta J} \right)^{1/(d_s/2-y)}, \quad (5.1)$$

onde d_s é a dimensão fractal da interface da gota, L^{d_s} é a área (fractal) da superfície que contorna uma gota (excitação de menor energia) de tamanho L e y é o expoente da gota, expoente que mostra como a energia escala com o comprimento L . A Eq. (5.1) pode ser expressa da seguinte forma

$$L^* \sim \left(\frac{J}{\delta J} \right)^{1/\zeta}, \quad (5.2)$$

onde ζ é definido como sendo o expoente de Lyapunov ou expoente de caos. Este expoente de caos foi introduzido por Bray e Moore [18] em 1987 para a descrição do comportamento caótico da fase vidro de spins em redes de Bravais. Posteriormente, Banavar e Bray [19] utilizaram este expoente para o estudo do comportamento caótico da fase vidro de spins em rede fractais. O expoente de caos está relacionado com a dimensão fractal da rede (d_s) e com o expoente da gota (y) através da relação

$$\zeta \equiv \frac{d_s}{2} - y. \quad (5.3)$$

Se considerarmos agora uma pequena mudança na temperatura, para T menor que a temperatura crítica ($T < T_f$), o comportamento caótico pode ser entendido do seguinte modo: o acoplamento efetivo entre dois spins, separados de uma distância L , tem o sinal trocado à medida que se muda a temperatura T . Surgem assim vários zeros distribuídos de forma aleatória sobre o eixo T . A distância típica entre dois zeros consecutivos depende da separação L entre os spins. Quando L tende a infinito, essa distância típica entre os zeros tende a zero, ou seja, uma pequena mudança na temperatura provoca várias mudanças de sinal no acoplamento efetivo. Dizemos assim que o acoplamento efetivo é uma função caótica de T . Considerando o sistema a uma temperatura $T < T_f$, temos

$$F(T) \sim L^y,$$

onde $F(T)$ é a energia livre da gota. Quando a temperatura é alterada de uma quantidade

δT , ou seja, $T' = T + \delta T$, temos

$$F(T + \delta T) \sim L^y - \delta T L^{\frac{d_s}{2}},$$

quando $L^y \sim \delta T L^{\frac{d_s}{2}}$ o sistema torna-se descorrelacionado a partir da escala de comprimento [19],

$$L^* \propto \left(\frac{1}{\delta T} \right)^{\frac{1}{\zeta}}. \quad (5.4)$$

A derivação deste resultado segue da generalização do argumento de Imry e Ma [64].

Neste cenário, considerando um vidro de spins de Ising com uma distribuição Gaussiana para os acoplamentos com desvio padrão J e à temperatura zero, na ausência de perturbações o custo de energia de uma excitação (gota) de dimensão L , é da ordem de JL^y . Adicionando uma pequena perturbação, ε , aleatória para cada acoplamento, obtida por exemplo a partir de uma distribuição Gaussiana, a contribuição da perturbação nos acoplamentos para a energia da gota é uma soma de L^{d_s} variáveis aleatórias independentes com sinais arbitrários (interface da gota), contribuindo assim com um termo de ordem $\pm \varepsilon JL^{\frac{d_s}{2}}$. Se $d_s/2 > y$, este termo (para L grande o suficiente) será maior que a energia original JL^y , implicando que o estado fundamental original é instável com relação a pequenas perturbações nos acoplamentos.

Desta maneira, quando o expoente de caos $\zeta \equiv d_s/2 - y$ é positivo, o estado fundamental é instável para excitações em escalas maiores que

$$L \gtrsim L^* \approx \left(\frac{1}{\varepsilon} \right)^{\frac{1}{\zeta}}. \quad (5.5)$$

Usando a Eq. (4.14) e a Eq. (4.16), válidas para redes de Bravais,

$$y \leq \frac{d-1}{2},$$

$$d_s > d-1,$$

verificamos que o expoente de caos sempre será positivo para vidro de spins nestas redes, uma vez que $y \leq d_s/2$. Para um ferromagneto de Ising temos que:

$$d_s = d - 1 = y, \quad (5.6)$$

logo,

$$\zeta = -\frac{(d-1)}{2}. \quad (5.7)$$

Verifica-se neste caso que o expoente de caos ζ é negativo, indicando assim que o estado fundamental ferromagnético é estável para pequenas perturbações nas ligações para $d > 1$.

5.2 Vidro de spins em $d=1$

Vamos considerar o caso unidimensional com o Hamiltoniano

$$\mathcal{H} = - \sum_{i=1}^{N-1} J_i S_i^{(1)} S_{i+1}^{(1)}, \quad (5.8)$$

onde os spins são tipo Ising ($S_i^{(n)} = \pm 1$). Vamos inicialmente considerar que temos apenas três spins ($N = 3$). O Hamiltoniano, Eq. (5.8), pode ser escrito como:

$$\mathcal{H} = -J_1 S_1^{(1)} S_2^{(1)} - J_2 S_2^{(1)} S_3^{(1)}. \quad (5.9)$$

A função de partição será

$$\mathcal{Z} = \sum_{\{S_i\}} e^{-\beta \mathcal{H}} = \sum_{S_1} \sum_{S_2} \sum_{S_3} e^{(K_1 S_1^{(1)} S_2^{(1)} + K_2 S_2^{(1)} S_3^{(1)})}, \quad (5.10)$$

onde $K_i = \beta J_i$ ($i = 1, 2$) e $\beta = 1/K_B T$. Note que esta função de partição é a mesma

tratada na seção 4.4. Após a soma em $S_2 = \pm 1$ ela pode ser escrita como

$$\mathcal{Z} = 2 \cosh(K_1) \cosh(K_2) \sum_{S_1} \sum_{S_3} \left(1 + S_1^{(1)} S_3^{(1)} t_1 t_2 \right), \quad (5.11)$$

onde $t_i = \tanh(K_i)$ ($i = 1, 2$). Se considerarmos agora uma rede com apenas quatro spins, teremos

$$\mathcal{H} = -J_1 S_1^{(1)} S_2^{(1)} - J_2 S_2^{(1)} S_3^{(1)} - J_3 S_3^{(1)} S_4^{(1)}. \quad (5.12)$$

e

$$\mathcal{Z} = \sum_{S_1} \sum_{S_3} \sum_{S_3} \sum_{S_4} e^{(K_1 S_1^{(1)} S_2^{(1)} + K_2 S_2^{(1)} S_3^{(1)} + K_3 S_3^{(1)} S_4^{(1)})}, \quad (5.13)$$

onde $K_i = \beta J_i$ ($i = 1, 2, 3$). Realizando a soma em $S_3 = \pm 1$ e depois em $S_2 = \pm 1$, obtemos

$$\mathcal{Z} = 2^2 \cosh(K_1) \cosh(K_2) \cosh(K_3) \sum_{S_1} \sum_{S_4} \left(1 + S_1^{(1)} S_4^{(1)} t_1 t_2 t_3 \right), \quad (5.14)$$

onde $t_i = \tanh(K_i)$ ($i = 1, 2, 3$). Se temos uma rede com cinco spins, a função de partição será

$$\mathcal{Z} = 2^3 \cosh(K_1) \cosh(K_2) \cosh(K_3) \cosh(K_4) \sum_{S_1} \sum_{S_5} \left(1 + S_1^{(1)} S_5^{(1)} t_1 t_2 t_3 t_4 \right),$$

ou

$$\mathcal{Z} = 2^3 \prod_{i=1}^4 \cosh(K_i) \sum_{S_1} \sum_{S_5} \left(1 + S_1^{(1)} S_5^{(1)} \prod_{i=1}^4 t_i \right). \quad (5.15)$$

Estendendo este resultado para uma rede com N spins, temos

$$\mathcal{Z} = 2^{N-2} \prod_{i=1}^{N-1} \cosh(K_i) \sum_{S_1} \sum_{S_N} \left(1 + S_1^{(1)} S_N^{(1)} \prod_{i=1}^{N-1} t_i \right). \quad (5.16)$$

O Hamiltoniano para um sistema com apenas dois spins ($S_1^{(1)}$ e $S_N^{(1)}$) é

$$\mathcal{H}' = -J' S_1^{(1)} S_N^{(1)},$$

onde J' representa a nova ligação de acoplamento entre os spins $S_1^{(1)}$ e $S_N^{(1)}$. A função de partição deste sistema é

$$\mathcal{Z}' = \sum_{\{S\}} e^{-\beta\mathcal{H}'} = \sum_{S_1} \sum_{S_N} e^{-K' S_1^{(1)} S_N^{(1)}} = \cosh(K') \sum_{S_1} \sum_{S_N} [1 + S_1^{(1)} S_N^{(1)} \tanh(K')]. \quad (5.17)$$

Comparando as equações (5.16) e (5.17) verificamos que

$$\tanh(K') = \prod_{i=1}^{N-1} \tanh(K_i), \quad (5.18)$$

onde $K' = \beta J'$. Quando $T \rightarrow 0$, ou seja, $\beta \rightarrow \infty$, a função $\tanh(K)$ se torna uma função sinal, e então

$$\text{sgn}(J') = \prod_{i=1}^{N-1} \text{sgn}(J_i). \quad (5.19)$$

No estado fundamental, considerando a variável de spin no extremo $i = 1$ como sendo $S_1^{(1)}$, a variável de spin no extremo $i = L$ será dada por

$$S_L^{(1)} = \prod_{i=1}^{L-1} \text{sgn}(J_i), \quad L = 2, \dots, N. \quad (5.20)$$

Vamos adicionar a cada acoplamento da rede uma constante $J_0 > 0$, em vez de uma variável aleatória. Para este novo estado fundamental teremos

$$S_L^{(2)} = \prod_{i=1}^{L-1} \text{sgn}(J_i + J_0). \quad (5.21)$$

A correlação entre as variáveis de spins $S_L^{(1)}$ e $S_L^{(2)}$ nos estados fundamentais acima é, considerando que os J_i são independentes,

$$\left[S_L^{(1)} S_L^{(2)} \right]_{av} = \left[\int_{-\infty}^{\infty} P(J) \text{sgn}(J) \text{sgn}(J + J_0) dJ \right]^{L-1}, \quad (5.22)$$

onde estamos assumindo que a função de distribuição $P(J)$ é contínua e simétrica. A

integral pode ser dividida em três partes,

$$\left[S_L^{(1)} S_L^{(2)} \right]_{av} = \left[\int_{-\infty}^{-J_0} P(J) dJ - \int_{-J_0}^0 P(J) dJ + \int_0^{\infty} P(J) dJ \right]^{L-1}, \quad (5.23)$$

$$\left[S_L^{(1)} S_L^{(2)} \right]_{av} = \left[\int_{-\infty}^{-J_0} P(J) dJ + \int_{-J_0}^0 P(J) dJ + \int_0^{\infty} P(J) dJ - 2 \int_{-J_0}^0 P(J) dJ \right]^{L-1},$$

$$\left[S_L^{(1)} S_L^{(2)} \right]_{av} = \left[1 - 2 \int_{-J_0}^0 P(J) dJ \right]^{L-1}. \quad (5.24)$$

Expandindo $P(J)$ em uma série de Taylor,

$$P(J) \simeq P(0) + \dots, \quad (5.25)$$

obtemos,

$$\left[S_L^{(1)} S_L^{(2)} \right]_{av} = [1 - 2P(0)J_0]^{L-1}, \quad (5.26)$$

quando $J_0 \ll 1$. No limite de escala, quando $L \rightarrow \infty$, $J_0 \rightarrow 0$, com $J_0 L$ fixo, e usando que

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \left(1 - \frac{a}{N} \right)^N \cong e^{-a}, \quad (5.27)$$

obtemos

$$\left[S_L^{(1)} S_L^{(2)} \right]_{av} \rightarrow e^{-2LJ_0 P(0)}. \quad (5.28)$$

Os dois estados fundamentais se descorrelacionam quando $\left[S_L^{(1)} S_L^{(2)} \right]_{av} \rightarrow 0$; isto acontece para uma distância

$$L^* \sim \frac{1}{2J_0 P(0)}. \quad (5.29)$$

Comparando a Eq. (5.29) com a Eq. (5.5), verificamos que para este caso, com $d = 1$, o expoente de caos é $\zeta = 1$, $d_s = 0$ e usando a Eq. (5.3) obtemos $y = -1$. Não existe nenhuma transição de fase em uma dimensão para $T > 0$, visto que $y < 0$. Verifica-se que em uma dimensão existe um comportamento caótico, com sensibilidade a pequenas

perturbações, uma vez que $\zeta > 0$.

5.3 Método e Resultados

Usaremos o Hamiltoniano de Edwards-Anderson da seção 4.2 com spins clássicos, sendo que os spins $S_i = \pm 1$ serão distribuídos sobre redes hierárquicas,

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} S_i S_j, \quad (5.30)$$

onde a soma $\sum_{\langle ij \rangle}$ está restrita a pares distintos de spins primeiros vizinhos. As interações J_{ij} são obtidas aleatoriamente a partir de uma distribuição de probabilidades Gaussiana $P(J_{ij})$, tendo a forma

$$P(J_{ij}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(-J_{ij}^2/2), \quad (5.31)$$

cuja média é zero ($J_0 = 0$) e variância igual a um ($J^2 = 1$).

O Grupo de Renormalização de Midgal-Kadanoff (MKRG) pode ser utilizado em redes de Bravais para o estudo de caos em vidro de spins, tendo a vantagem que escalas de comprimento maiores são mais acessíveis. Como resultado do MKRG pode-se gerar diversos tipos de redes hierárquicas. Foram estudadas redes hierárquicas com dimensões $d_f = 2, 2.32, 2.58$ e 3 , abrangendo assim redes que têm dimensão acima, abaixo e próxima da dimensão crítica inferior. Primeiro estudaremos algumas redes hierárquicas em temperatura zero ($T = 0$) e em seguida redes com $d_f > d_{LCD}$ em temperatura diferente de zero ($T > 0$).

5.3.1 Temperatura zero ($T = 0$)

Com o objetivo de verificar a existência de uma comportamento caótico na fase vidro de spins para temperatura zero ($T = 0$), dois bancos de acoplamentos (“bond pool”) J_{ij} são gerados, sendo que cada um deles contém um milhão de acoplamentos (10^6).

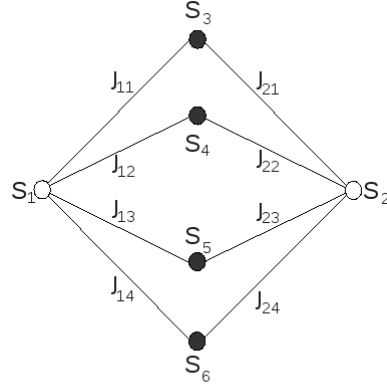


Figura 5.1: Célula básica da rede hierárquica tipo diamante com $d_f = 3$ e $b = 2$. S_i com $i = 1, \dots, 6$ representam os spins da rede, enquanto que J_{1l} e J_{2l} com $l = 1, \dots, 4$ representam os acoplamentos entre os spins.

Vamos exemplificar o processo em uma rede hierárquica tipo diamante com dimensão fractal $d_f = 3$ (ver Fig. 5.1). Para uma temperatura $T > 0$, obtém-se a seguinte relação de recorrência:

$$K' = \sum_{l=1}^4 \operatorname{arctanh}(\tanh K_{1l} \tanh K_{2l}), \quad (5.32)$$

onde reduzimos oito acoplamentos em apenas um (ver Fig. 3.2 com $n = 0$), $K_{1l} = \frac{J_{1l}}{k_B T}$, e J_{1l} , J_{2l} representam os dois acoplamentos sobre o caminho l . A rede considerada tem um fator de escala de comprimento $b = 2$. O número de caminhos paralelos l em uma rede hierárquica tipo diamante é dado por $b^{d_f - 1}$. Sendo $d = 3$ e $b = 2$ no caso acima, o número de caminhos paralelos na rede é quatro. A partir da equação de recorrência para temperatura diferente de zero, Eq. (5.32), obtemos a relação de recorrência para temperatura zero com a seguinte modificação

$$\operatorname{arctanh}(\tanh K_1 \tanh K_2) \rightarrow \operatorname{sgn}(J_1 J_2) \min(|J_1|, |J_2|), \quad (5.33)$$

assim obtemos para $T = 0$,

$$J' = \sum_{l=1}^4 \operatorname{sgn}(J_{1l} J_{2l}) \min(|J_{1l}|, |J_{2l}|). \quad (5.34)$$

Para a utilização da Eq. (5.34) é construído um banco inicial de acoplamentos $\{J_i^{(0)}\}$, com $J_i^{(0)}$ acoplamentos adimensionais, sendo que o índice i representará agora uma localização do acoplamento no banco de números considerado. Oito acoplamentos de $\{J_i^{(0)}\}$ são selecionados aleatoriamente e combinados através da Eq. (5.34), formando o primeiro acoplamento de um novo banco de acoplamentos $\{J_i^{(1)}\}$. Este processo é repetido novamente até que o novo banco de acoplamentos tenha o mesmo número de acoplamentos que o banco inicial, ou seja, 10^6 acoplamentos. Este processo equivale a uma renormalização. De forma similar à anterior, um novo banco de acoplamentos $\{J_i^{(2)}\}$ é gerado a partir de $\{J_i^{(1)}\}$, o que equivale a uma nova renormalização. Este processo é repetido n vezes até a geração do banco de acoplamentos $\{J_i^{(n)}\}$.

Paralelamente à criação do banco $\{J_i^{(0)}\}$ geramos um novo banco de acoplamentos $\{J'_i\}$, sendo que

$$J'_i = J_i + \varepsilon x_i, \quad (5.35)$$

com $\varepsilon = 10^{-6}$ sendo uma perturbação, x_i e J_i são variáveis independentes obtidas de uma distribuição Gaussiana com média zero e variância igual a um. Um detalhe importante é que quando são selecionadas aleatoriamente oito acoplamentos do banco $\{J_i^{(n)}\}$ para a formação de um novo acoplamento do banco $\{J_i^{(n+1)}\}$, necessariamente oito acoplamentos correspondentes ao banco $\{J'_i^{(n)}\}$ serão selecionadas para a formação de um novo acoplamento e na mesma posição na rede para o banco $\{J_i^{(n+1)}\}$. A seguir, acompanhamos a evolução da quantidade [19]

$$d^2(n) = \frac{\sum_i \left(J_i^{(n)} - J'_i^{(n)} \right)^2}{\sum_i \left[\left(J_i^{(n)} \right)^2 + \left(J'_i^{(n)} \right)^2 \right]}, \quad (5.36)$$

que mede a distância entre as configurações de $\{J's\}$. Se considerarmos os bancos de acoplamentos como pontos no espaço n -dimensional, o numerador da Eq. (5.36) é o quadrado da distância Euclideana entre os bancos de acoplamentos depois de n iterações. O

denominador normaliza $d^2(n)$ a um quando os dois bancos de acoplamentos estão completamente descorrelacionados. Vamos agora aplicar este procedimento em redes hierárquicas de várias dimensões.

5.3.1.1 Redes hierárquicas com $d_f = 2$

Inicialmente vamos estudar redes hierárquicas tipo diamante e trança à temperatura zero para dimensão fractal $d_f = 2$.

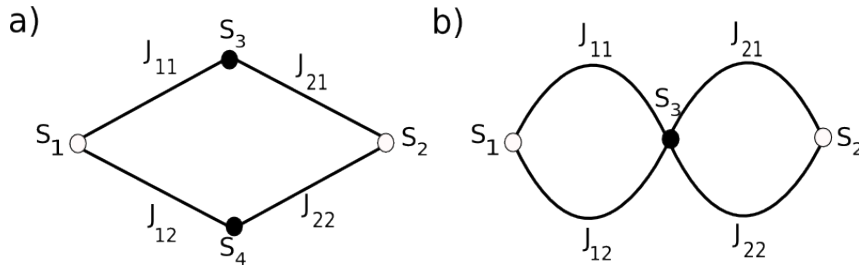


Figura 5.2: (a) Célula básica da rede hierárquica tipo diamante com $d_f = 2$ e $b = 2$; (b) célula básica da rede hierárquica tipo trança com $b = 2$ e $d_f = 2$.

Analisamos aqui uma rede hierárquica tipo diamante, ver Fig. 5.2(a), e uma rede hierárquica tipo trança, ver Fig. 5.2(b), tendo as seguintes relações de recorrência, respectivamente,

$$K'_d = \sum_{l=1}^2 \operatorname{arctanh} [\tanh(K_{1l})\tanh(K_{2l})], \quad (5.37)$$

$$K'_t = \operatorname{arctanh} [\tanh(A)\tanh(B)], \quad (5.38)$$

onde $A = \sum_{l=1}^2 K_{1l}$ e $B = \sum_{l=1}^2 K_{2l}$. Para temperatura zero, as equações acima podem ser escritas como

$$J'_d = \sum_{l=1}^2 \operatorname{sgn}(J_{1l}J_{2l}) \min(|J_{1l}|, |J_{2l}|), \quad (5.39)$$

$$J'_t = \operatorname{sgn}(\mathcal{A}\mathcal{B}) \min(|\mathcal{A}|, |\mathcal{B}|), \quad (5.40)$$

onde $\mathcal{A} = \sum_{l=1}^2 J_{1l}$ e $\mathcal{B} = \sum_{l=1}^2 J_{2l}$. Então criamos $\{J_i\}$ e $\{J'_i\}$ e realizamos n iterações. A partir das Figs. 5.3 e 5.4¹, verifica-se que $d^2(n)$ cresce inicialmente de forma exponencial.

¹As barras de erro de todos os gráficos $d^2(n) \times n$ são menores que o tamanho dos símbolos.

Note que, para $L \gg 1$ a Eq. (5.36) pode ser reescrita da seguinte forma

$$d^2(n) \cong \frac{\sum_i [J_i L^y - J_i L^y \pm \varepsilon J_i L^{\frac{d_s}{2}}]^2}{\sum_i [(J_i L^y)^2 + (J_i L^y \pm \varepsilon J_i L^{\frac{d_s}{2}})^2]}, \quad (5.41)$$

onde assumimos que $J_i \sim J_i L^y$ e $J_i^{(n)} \sim J_i L^y \pm \varepsilon J_i L^{\frac{d_s}{2}}$. Logo,

$$\begin{aligned} d^2(n) &\cong \frac{\sum_i \varepsilon^2 J_i^2 L^{d_s}}{\sum_i 2J_i^2 L^{2y} [1 + \frac{\varepsilon^2}{2} L^{d_s-2y} \pm \varepsilon L^{\frac{d_s}{2}-y}]}, \\ d^2(n) &\cong \frac{\varepsilon^2 L^{d_s-2y}}{2[1 + \frac{\varepsilon^2}{2} L^{d_s-2y} \pm \varepsilon L^{\frac{d_s}{2}-y}]}, \\ d^2(n) &\cong \frac{\varepsilon^2 L^{2(\frac{d_s}{2}-y)}}{2[1 + \frac{\varepsilon^2}{2} L^{2(\frac{d_s}{2}-y)} \pm \varepsilon L^{\frac{d_s}{2}-y}]}. \end{aligned}$$

Como $\zeta \equiv d_s/2 - y$, temos

$$d^2(n) \cong \frac{1}{[1 + \frac{\varepsilon^2}{2} L^{2\zeta} \pm \varepsilon L^\zeta]} \frac{\varepsilon^2}{2} L^{2\zeta}. \quad (5.42)$$

Considerando no início a região que $\varepsilon L^\zeta \ll 1$, obtemos

$$d^2(n) \sim \frac{\varepsilon^2}{2} b^{2n\zeta}, \quad (5.43)$$

onde $L = b^n$. A partir do gráfico de $d^2(n) \times n$ (Fig. 5.3) obtemos $\zeta \cong 0.769$ para a rede hierárquica tipo diamante. Para redes hierárquicas com $d_f = 2$ e $b = 2$, obtemos d_s reconhecendo que qualquer mínima energia da interface da célula básica cortará exatamente dois acoplamentos (2^{d_f-1} para um d_f geral) e identificamos este número como 2^{d_s} . Generalizando para outras células básicas, temos

$$q = b^{d_s}.$$

Na rede hierárquica diamante da Fig. 5.2(a) este número é 2, logo temos $d_s = 1$ para esta rede. Com a Eq. (5.3) obtemos o expoente $y \sim -0.269$. Na Fig. 5.4 obtemos o expoente de caos para a rede hierárquica tipo trança $\zeta \cong 0.769$, que é o mesmo valor encontrado para a rede anterior. Da mesma forma, $d_s = 1$ e o expoente $y \sim -0.269$. Como $y < 0$ para as duas redes, o sistema escala para acoplamentos fracos, não existindo fase vidro de spins estável para $T \neq 0$.

Depois de um grande número de iterações n^* , $d^2(n)$ satura no valor um para ambas as redes, indicando que os dois bancos de acoplamentos $\{J_i\}$ e $\{J'_i\}$ estão completamente decorrelacionados. Portanto, o estado fundamental é instável com relação a pequenas perturbações para escalas de comprimento maiores que L^* . Considerando agora a região onde $\varepsilon L^\zeta \cong 1$, temos $L = L^* \sim (1/\varepsilon)^{1/\zeta}$. Observe que a substituição desta relação na Eq. (5.42) leva a $d^2(n) \cong 1$.

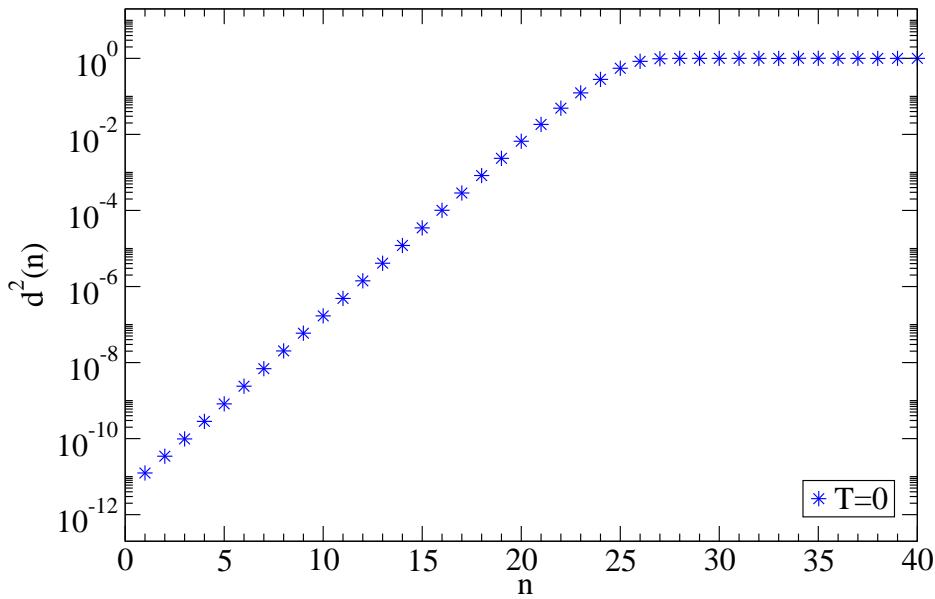


Figura 5.3: Gráfico de $d^2(n) \times n$, sendo n o número de iterações realizadas à temperatura zero em uma rede hierárquica diamante de dimensão fractal $d_f = 2$ e $b = 2$; $d^2(n)$ satura em 1 quando $n^* \cong 26$.

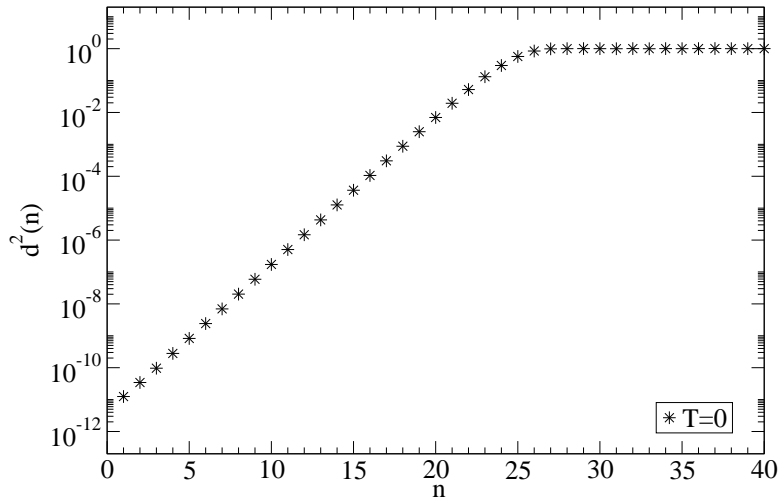


Figura 5.4: Gráfico de $d^2(n) \times n$, sendo n o número de iterações realizadas a temperatura zero em uma rede hierárquica tipo trança de dimensão fractal $d_f = 2$ e $b = 2$; $d^2(n)$ satura em 1 quando $n^* \cong 26$.

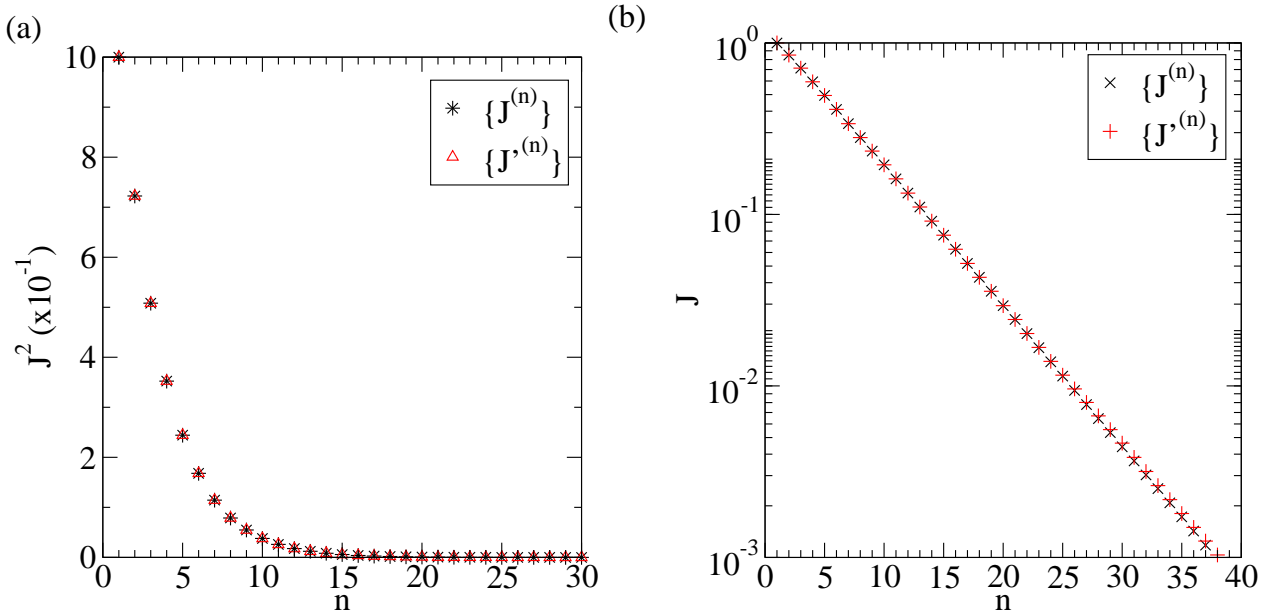


Figura 5.5: Gráficos para a rede hierárquica diamante com $d_f = 2$ e $b = 2$. (a) a variância diminui a cada iteração indo de um para zero; (b) gráfico semi-log do desvio padrão que a cada iteração diminui de 2^y . A inclinação da reta é $-y \ln 2$, portanto $y \sim -0.269$.

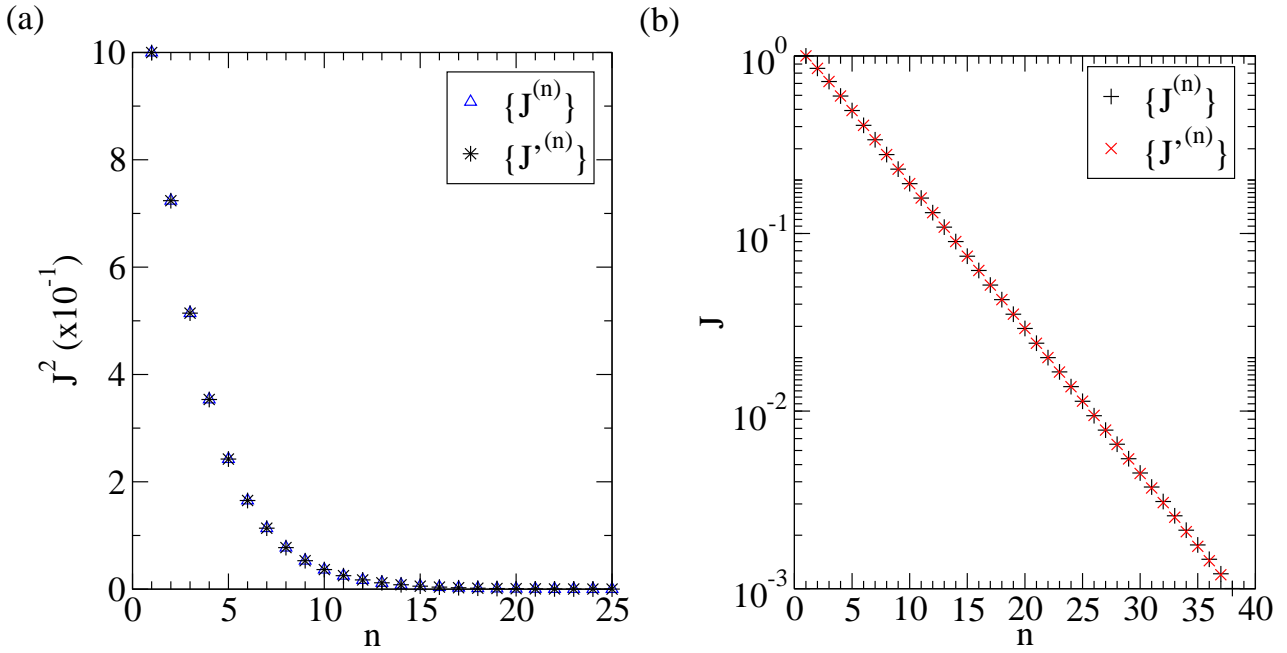


Figura 5.6: Gráficos para a rede de hierárquica tipo trança com $d_f = 2$ e $b = 2$. (a) a variância tende para zero depois de n iterações; (b) no gráfico semi-log o desvio padrão a cada iteração decresce de 2^y , sendo $y \sim -0.269$.

Na Fig. 5.5(a) podemos observar que a variância tende a zero a cada iteração em uma rede hierárquica diamante. Na Fig. 5.5(b) o desvio padrão decresce a cada iteração por um fator de 2^y e a partir da inclinação da reta, obtemos $y \sim -0.269$. De forma semelhante a variância tende a zero para uma rede hierárquica tipo trança, ver Fig. 5.6(a), e na Fig. 5.6(b) obtemos a inclinação da reta e determinamos o expoente $y \sim -0.269$. O expoente y é o mesmo para uma rede hierárquica diamante e trança para dimensão fractal dois. Como $d_f = 2 < d_{LCD}$, o comprimento de correlação escala com $\xi \sim T^{-\nu}$, onde o expoente y é identificado como sendo $y = -1/\nu$, portanto, $\nu \simeq 3.72$.

É importante notar que ambas as redes estudadas em $d_f = 2$ apresentam um expoente de caos positivo ($\zeta > 0$) e idêntico em $T = 0$. Os bancos de acoplamentos $\{J_i\}$ e $\{J'_i\}$ se descorrelacionam depois de n^* iterações, e em ambas as redes $d_s = 1$, implicando, que elas apresentam o mesmo expoente y .

5.3.1.2 Rede hierárquica PWH $d_f = 2$ e $b = 3$

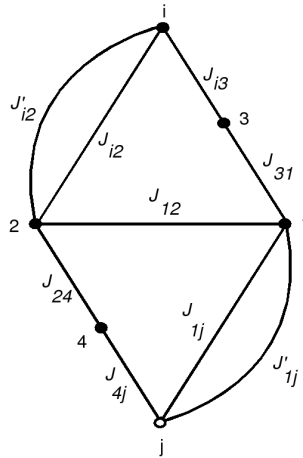


Figura 5.7: Célula de uma rede hierárquica com $d_f = 2$, $b = 3$ e $\mathcal{Q} = 4$, onde 1, 2, 3 e 4 representam os spins internos da rede.

Na Fig. 5.7 temos uma rede hierárquica também com dimensão fractal dois e $b = 3$. A relação de recorrência para esta rede à temperatura nula é:

$$J' = \frac{1}{2}(G_{\max} - H_{\max}), \tag{5.44}$$

onde

$$G_{\max} = \max(\{G_i\}), \quad H_{\max} = \max(\{H_i\}) \quad (i = 1, 2, \dots, P),$$

representam os maiores valores dos conjuntos $\{G_i\}$ e $\{H_i\}$, tendo P elementos cada, com $P = 2^{\mathcal{Q}}$, onde \mathcal{Q} é o número de spins internos na rede. Nesta célula o número de spins internos é $\mathcal{Q} = 4$, logo $P = 2^{\mathcal{Q}} = 16$. Assim temos

$$\begin{aligned}
H_{\max} &= \max(H_1, H_2, \dots, H_{16}) \\
G_{\max} &= \max(G_1, G_2, \dots, G_{16}) \\
G_1 &= J_{i3} + J_{31} + \tilde{J}_{i2} + J_{12} + \tilde{J}_{1j} + J_{24} + J_{4j}, \\
G_2 &= -J_{i3} - J_{31} + \tilde{J}_{i2} + J_{12} + \tilde{J}_{1j} + J_{24} + J_{4j}, \\
G_3 &= J_{i3} + J_{31} + \tilde{J}_{i2} + J_{12} + \tilde{J}_{1j} - J_{24} - J_{4j}, \\
G_4 &= J_{i3} - J_{31} + \tilde{J}_{i2} - J_{12} - \tilde{J}_{1j} + J_{24} + J_{4j}, \\
G_5 &= J_{i3} + J_{31} - \tilde{J}_{i2} - J_{12} + \tilde{J}_{1j} - J_{24} + J_{4j}, \\
G_6 &= -J_{i3} - J_{31} + \tilde{J}_{i2} + J_{12} + \tilde{J}_{1j} - J_{24} - J_{4j}, \\
G_7 &= -J_{i3} + J_{31} + \tilde{J}_{i2} - J_{12} - \tilde{J}_{1j} + J_{24} + J_{4j}, \\
G_8 &= -J_{i3} - J_{31} - \tilde{J}_{i2} - J_{12} + \tilde{J}_{1j} - J_{24} + J_{4j}, \\
G_9 &= J_{i3} - J_{31} + \tilde{J}_{i2} - J_{12} - \tilde{J}_{1j} - J_{24} - J_{4j}, \\
G_{10} &= J_{i3} + J_{31} - \tilde{J}_{i2} - J_{12} + \tilde{J}_{1j} + J_{24} - J_{4j}, \\
G_{11} &= J_{i3} - J_{31} - \tilde{J}_{i2} + J_{12} - \tilde{J}_{1j} - J_{24} + J_{4j}, \\
G_{12} &= J_{i3} - J_{31} - \tilde{J}_{i2} + J_{12} - \tilde{J}_{1j} + J_{24} - J_{4j}, \\
G_{13} &= -J_{i3} + J_{31} - \tilde{J}_{i2} + J_{12} - \tilde{J}_{1j} - J_{24} + J_{4j}, \\
G_{14} &= -J_{i3} - J_{31} - \tilde{J}_{i2} - J_{12} + \tilde{J}_{1j} + J_{24} - J_{4j}, \\
G_{15} &= -J_{i3} + J_{31} + \tilde{J}_{i2} - J_{12} - \tilde{J}_{1j} - J_{24} - J_{4j}, \\
G_{16} &= -J_{i3} + J_{31} - \tilde{J}_{i2} + J_{12} - \tilde{J}_{1j} + J_{24} - J_{4j}.
\end{aligned}$$

Onde $\tilde{J}_{i2} = J_{i2} + J'_{i2}$ e $\tilde{J}_{1j} = J_{1j} + J'_{1j}$ representam acoplamentos efetivos, ou seja, a soma dos acoplamentos associados com cada um dos dois caminhos paralelos conectando os sítios i e 2 e os sítios 1 e j (ver Fig. 5.7). Os H_i ($i = 1, 2, \dots, 16$) são obtidos a partir dos G_i pela troca de sinal nos acoplamentos \tilde{J}_{1j} e J_{4j} .

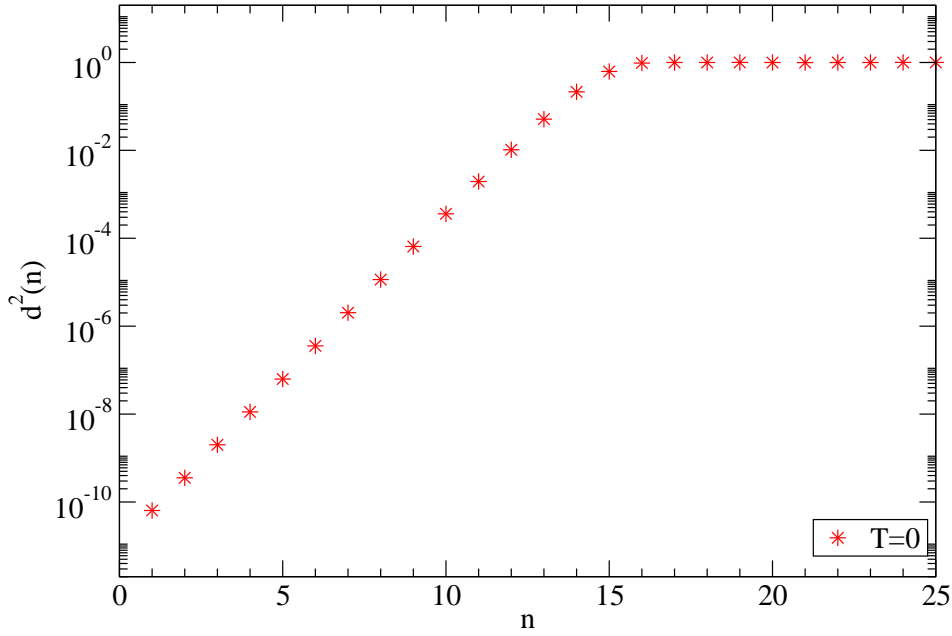


Figura 5.8: Gráfico de $d^2(n) \times n$ da rede hierárquica com $d_f = 2$ e $b = 3$ da Fig. 5.7. $d^2(n)$ satura no valor 1 quando $n^* \cong 15$.

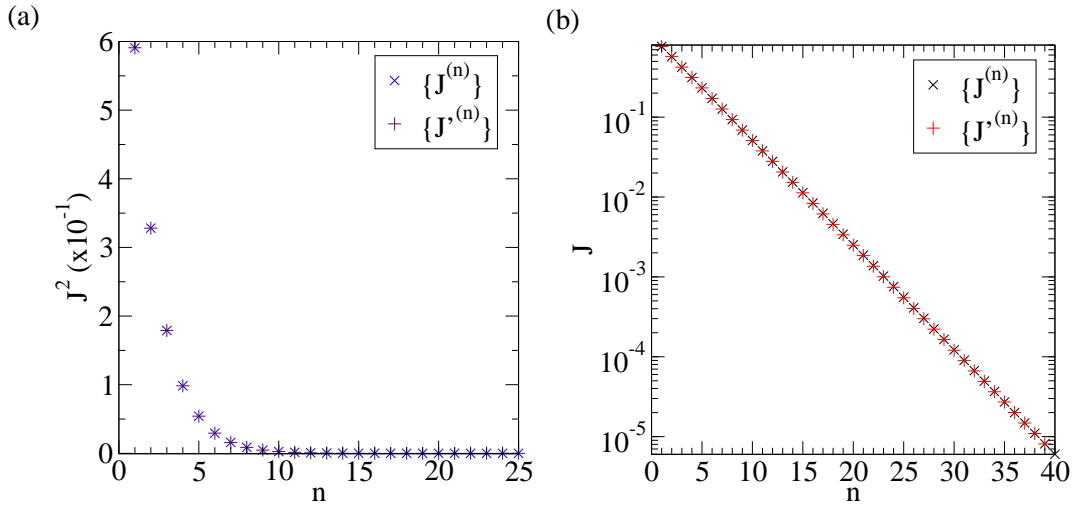


Figura 5.9: (a) A variância das duas distribuições tende a zero quando n aumenta; (b) gráfico semi-log do desvio padrão das distribuições com uma diminuição de 3^y a cada iteração.

Para esta rede hierárquica, o expoente de caos encontrado através da Fig. 5.8 foi $\zeta \cong 0.780$, implicando em um comportamento caótico para pequenas perturbações nos acoplamentos. Novamente, para duas dimensões, a variância tende a zero a cada iteração. Observe que, para esta rede hierárquica $d_s = 1$, sendo necessário cortar três acoplamentos

para isolar um spin da extremidade; assim a relação que é válida para redes de Bravais $d_s \geq d - 1$ é satisfeita como igualdade nesta rede. Com a Eq. (5.3) obtemos $y \sim -0.280$, mesmo valor encontrado a partir da inclinação da reta na Fig. 5.9(b). Para essa rede hierárquica obtemos o expoente $\nu \cong 3.57$. Note que $\zeta \cong 0.780$ é maior que o valor $\zeta \cong 0.769$ obtido nas redes diamante e trança bidimensionais.

5.3.1.3 Ponte de Wheatstone

Na Fig. 5.10 temos a rede conhecida na literatura como ponte de Wheatstone. Sua dimensão fractal é $d_f = \ln 5 / \ln 2 \cong 2.32$.

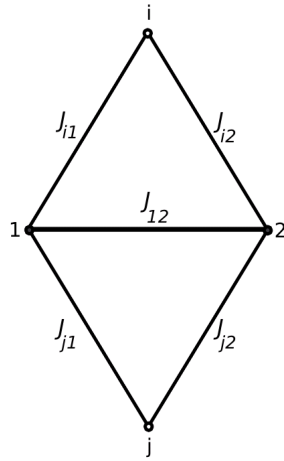


Figura 5.10: Célula da rede hierárquica conhecida como ponte de Wheatstone, com $d_f \cong 2.32$ e $b = 2$. Nesta rede $\mathcal{Q} = 2$, onde 1 e 2 representam os spins internos.

A relação de recorrência [65] para J' à temperatura zero é

$$J' = \frac{1}{2}(D_{\max} - F_{\max}), \quad (5.45)$$

onde

$$D_{\max} = \max(\{D_i\}), \quad F_{\max} = \max(\{F_i\}) \quad (i = 1, 2, \dots, P),$$

representam os maiores valores dos conjuntos $\{D_i\}$ e $\{F_i\}$, tendo P elementos cada, com $P = 2^{\mathcal{Q}}$. Para a ponte de Wheatstone temos

$$\begin{aligned}
 D_{\max} &= \max(D_1, D_2, D_3, D_4) & F_{\max} &= \max(F_1, F_2, F_3, F_4) \\
 D_1 &= J_{i1} + J_{i2} + J_{1j} + J_{2j} + J_{12}, & F &= J_{i1} + J_{i2} - J_{1j} - J_{2j} + J_{12}, \\
 D_2 &= J_{i1} - J_{i2} + J_{1j} - J_{2j} - J_{12}, & F_2 &= J_{i1} - J_{i2} - J_{1j} - J_{2j} - J_{12}, \\
 D_3 &= -J_{i1} + J_{i2} - J_{1j} + J_{2j} - J_{12}, & F_3 &= -J_{i1} + J_{i2} + J_{1j} - J_{2j} - J_{12}, \\
 D_4 &= -J_{i1} - J_{i2} - J_{1j} - J_{2j} + J_{12}, & F_4 &= -J_{i1} - J_{i2} + J_{1j} + J_{2j} + J_{12}.
 \end{aligned}$$

Novamente, construímos dois bancos de acoplamento $\{J_i\}$ e $\{J'_i\}$, realizamos n iterações e o resultado é apresentado no gráfico da Fig. 5.11. O expoente de caos obtido foi $\zeta \cong 0.81$. Observe que $d_s = 1$ para esta rede hierárquica, e verificamos portanto que a relação $d_s \geq d - 1$ não é válida neste caso. Com a Eq. (5.3) obtemos $y \sim -0.31$. Como $d_f < d_{LCD}$, para esta rede temos $\nu \cong 3.23$.

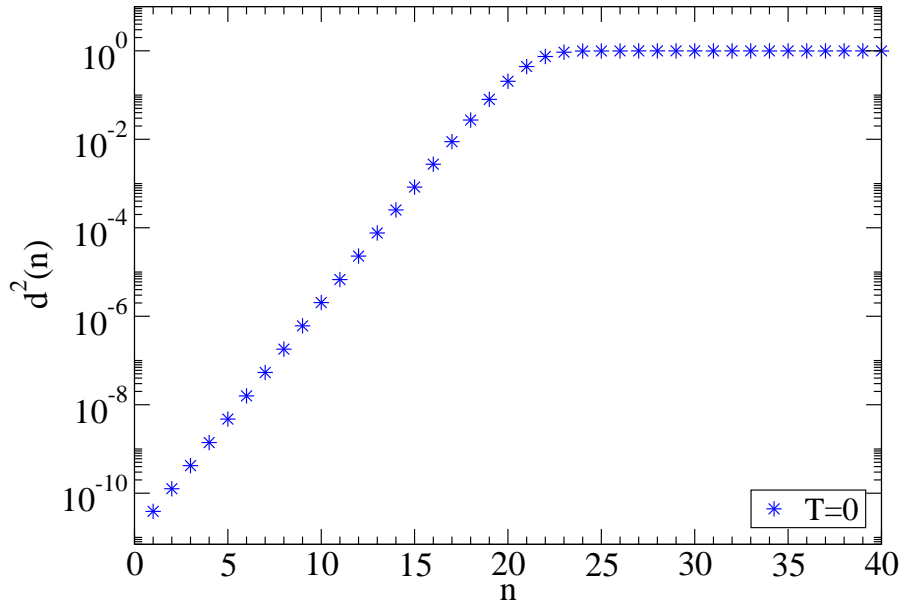


Figura 5.11: Gráfico de $d^2(n) \times n$, sendo n o número de iterações realizadas à temperatura zero em uma ponte de Wheatstone com dimensão fractal $d_f = \ln 5 / \ln 2 \simeq 2.32$ e $b = 2$. $d^2(n)$ satura no valor 1 quando $n^* \cong 22$.

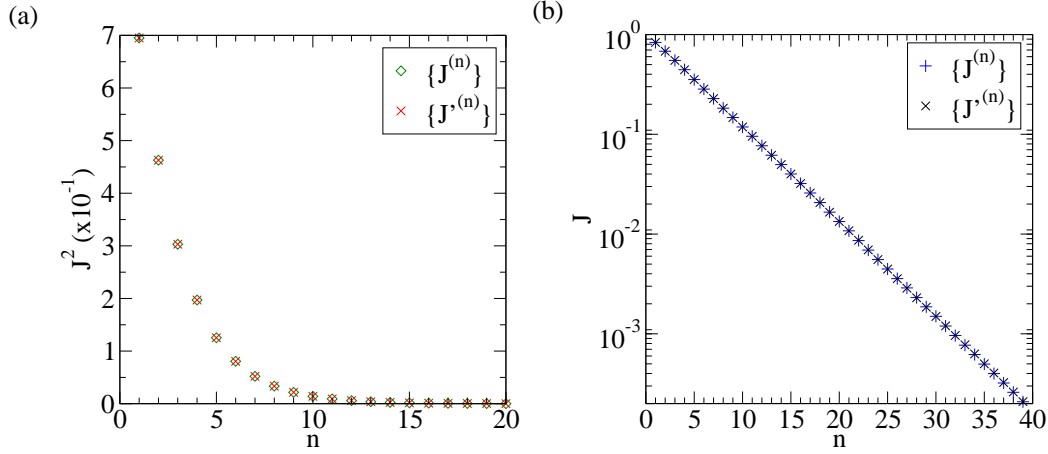


Figura 5.12: (a) A variância J^2 tende a zero depois de n iterações; (b) gráfico semilog do desvio padrão decaindo com as iterações.

Na Ponte de Wheatstone o expoente de caos é positivo ($\zeta > 0$), apresentando assim um comportamento caótico para pequenas perturbações nos acoplamentos à temperatura nula, indicando que os bancos de acoplamento $\{J_i\}$ e $\{J'_i\}$ tornam-se descorrelacionados após n^* iterações ($n^* \cong 22$). Nesta rede $y < 0$, portanto não existe fase vidro de spins para $T > 0$. Note que esta rede, apesar de ter dimensão fractal maior que 2 ($d_f \cong 2.32$), possui um expoente de caos maior que as redes bidimensionais.

5.3.1.4 Rede hierárquica diamante $d_f \cong 2.58$

Vamos agora estudar redes com dimensão próximas à dimensão crítica inferior.

Na rede hierárquica diamante de dimensão fractal $d_f \cong 2.58$ (ver Fig. 5.13), a relação de recorrência é dada por

$$K' = \sum_{l=1}^3 \operatorname{arctanh}[\tanh(K_{1l}) \tanh(K_{2l})]. \quad (5.46)$$

Em temperatura zero esta relação pode ser escrita como:

$$J' = \sum_{l=1}^3 \operatorname{sgn}(J_{1l} J_{2l}) \min(|J_{1l}|, |J_{2l}|). \quad (5.47)$$

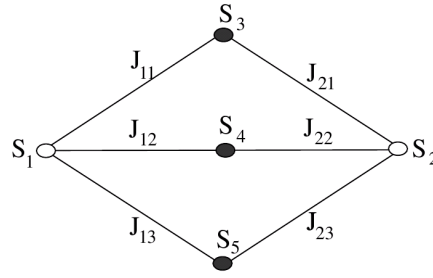


Figura 5.13: Rede hierárquica diamante com $d_f \cong 2.58$ e $b = 2$. S_i com $i = 1, 2, 3, 4$ e 5 representam os spins e J_{1l} e J_{2l} com $l = 1, 2$ e 3 são as constantes de acoplamento.

Repetindo o processo da seção 5.3.1, obtemos o expoente de caos a partir da Fig. 5.14, obtendo $\zeta \cong 0.75$. Para esta rede $d_s \cong 1.58$, portanto, o expoente $y \cong 0.04$. Neste caso $y > 0$, o que indica a existência da fase vidro de spins para $T \neq 0$ para esta rede, tendo uma temperatura crítica, obtida numericamente, $T_f \cong 0.29$. O pequeno valor de y indica que a dimensão da rede está próxima da dimensão crítica inferior ($d_f \approx d_{LCD}$).

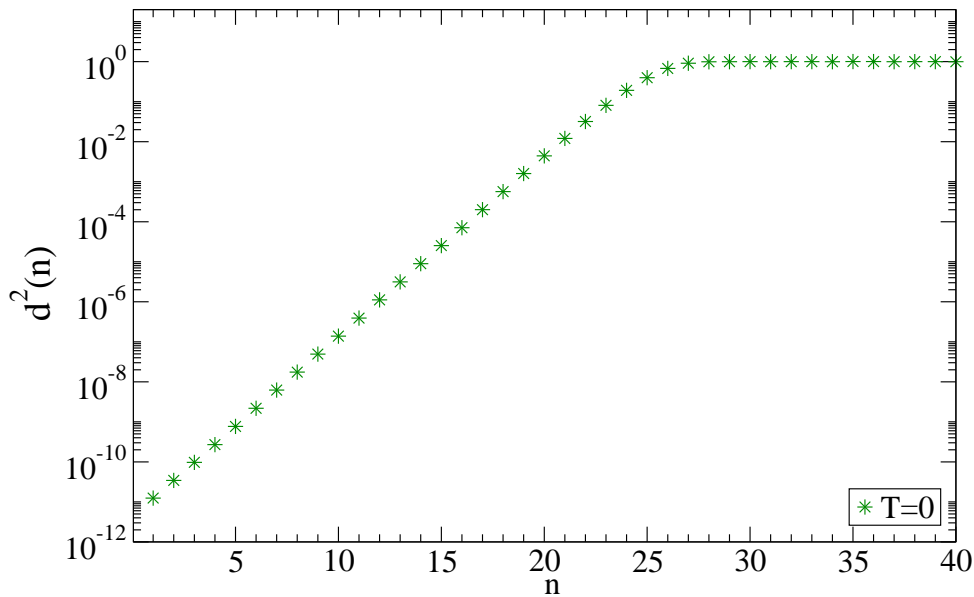


Figura 5.14: Gráfico de $d^2(n) \times n$, sendo n o número de iterações realizadas a temperatura nula em uma rede hierárquica diamante de dimensão fractal $d_f \cong 2.58$ e $b = 2$. $d^2(n)$ satura no valor 1 quando $n^* \cong 27$.

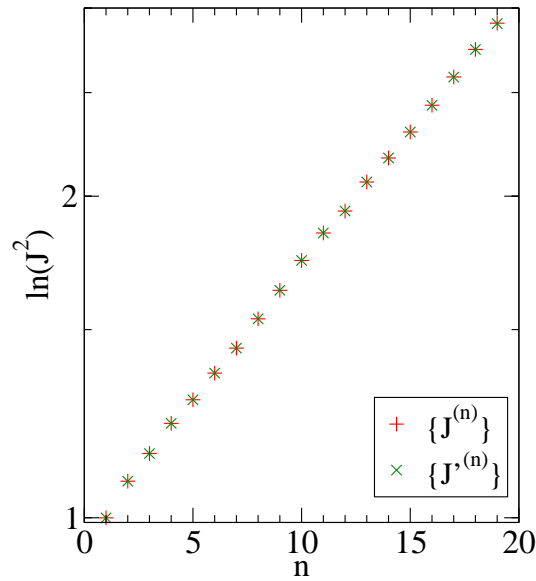


Figura 5.15: Gráfico semi-log da variância de $\{J_i^{(n)}\}$ e $\{J_i'^{(n)}\}$, apresentando um crescimento exponencial.

Na Fig. 5.15 mostramos o gráfico da variância J^2 que cresce de forma exponencial com o número de interações.

5.3.1.5 Rede hierárquica tipo trança $d_f \cong 2.58$

Na rede hierárquica tipo trança com $d_f \cong 2.58$ (ver Fig. 5.16), a relação de recorrência para temperatura finita é dada por

$$K' = \operatorname{arctanh}[\tanh(A)\tanh(B)], \quad (5.48)$$

onde $A = \sum_{l=1}^3 K_{1l}$, $B = \sum_{l=1}^3 K_{2l}$ e $K_{il} = J_{il}/k_B T$ ($i = 1, 2$). À temperatura nula esta equação pode ser escrita como

$$J' = \operatorname{sgn}(\mathcal{A}\mathcal{B}) \min(|\mathcal{A}|, |\mathcal{B}|), \quad (5.49)$$

onde $\mathcal{A} = \sum_{l=1}^3 J_{1l}$ e $\mathcal{B} = \sum_{l=1}^3 J_{2l}$.

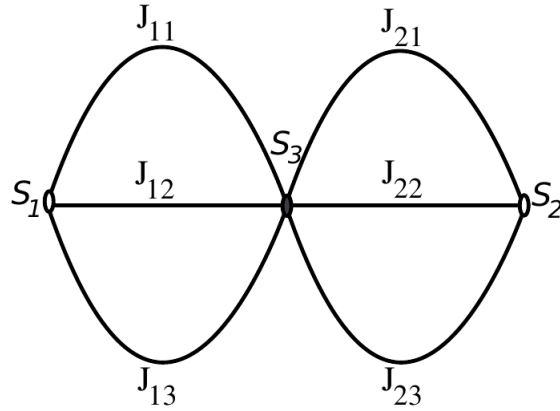


Figura 5.16: Célula básica da rede hierárquica tipo trança com $d_f \cong 2.58$ e $b = 2$. As variáveis S_1 , S_2 e S_3 representam os spins da célula e J_{1l} e J_{2l} ($l = 1, 2, 3$) são os acoplamentos.

Criamos os conjuntos de acoplamentos $\{J_i\}$ e $\{J'_i\}$ e realizamos n iterações, obtendo o gráfico do quadrado da distância como uma função de n , mostrado na Fig. 5.17.

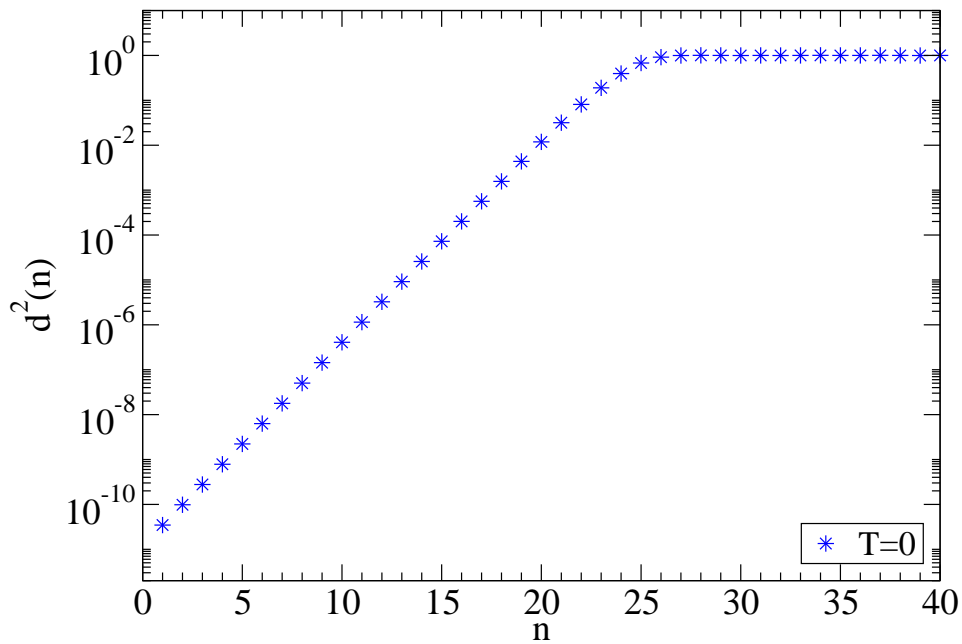


Figura 5.17: Gráfico de $d^2(n) \times n$, sendo n o número de iterações realizadas à temperatura nula em uma rede hierárquica tipo trança com $d_f \cong 2.58$ e $b = 2$. $d^2(n)$ satura no valor 1 quando $n^* \cong 25$.

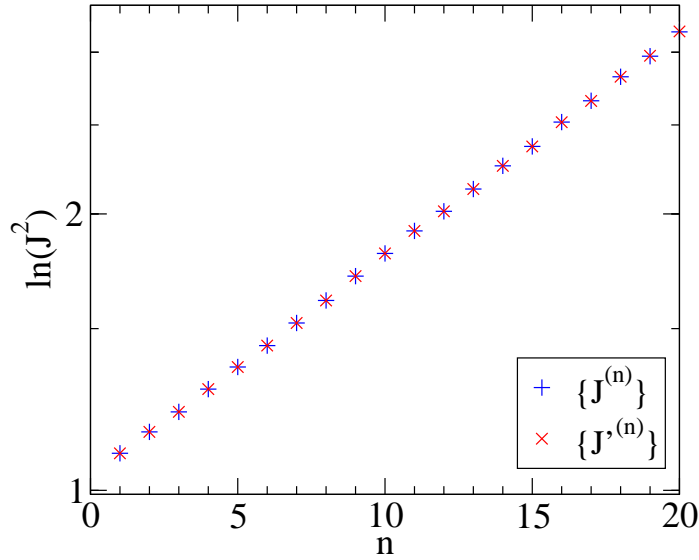


Figura 5.18: A variância J^2 de $\{J_i^{(n)}\}$ e $\{J_i'^{(n)}\}$ crescendo a cada iteração de forma exponencial.

A partir do gráfico da Fig 5.17, obtemos $\zeta \cong 0.75$. Como $\zeta > 0$, o estado fundamental é instável com relação a pequenas perturbações nas ligações para escalas de comprimento maiores que L^* . Para esta rede $d_s = 1.58$ e com a Eq. (5.3) obtemos $y \sim 0,04$. Nesta rede $y > 0$, indica a existência da fase vidro de spins para $T \neq 0$. A sua temperatura crítica é $T_f \cong 0.5$. O valor de y próximo a zero indica que $d_f \approx d_{LCD}$. Na Fig. 5.18 verificamos que a variância cresce de forma exponencial a cada iteração n . Estudamos também a rede hierárquica DT1 com dimensão fractal 2.58 (veja a Fig. 5.19), e encontramos para ela os mesmos valores $\zeta \cong 0.75$ e $y \sim 0.04$.

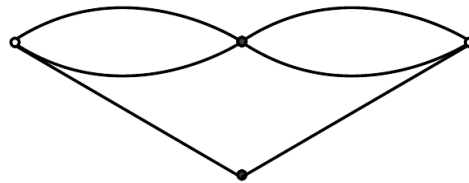


Figura 5.19: Rede hierárquica DT1 com $d_f \cong 2.58$, $b = 2$, $d_s \cong 1.58$ e $T_f = 0.34$.

Note que na rede da Fig. 5.19 foi encontrado um expoente de caos ζ idêntico ao expoente das duas redes já estudadas acima com $d_f \simeq 2.58$. Sendo $\zeta > 0$ a condição necessária para um comportamento caótico, verificamos que em todas estas redes com $d_f \simeq 2.58$ (estudadas nesta dissertação) os bancos de acoplamentos $\{J_i\}$ e $\{J'_i\}$ se descorrelacionam depois de n^* iterações à temperatura nula. Para as três redes com $d \cong 2.58$ temos $d_s \cong 1,58$, verificando-se assim que elas têm o mesmo expoente y . Como $y > 0$ a fase vidro de spins existe nas três redes para $T > 0$. Note que a temperatura crítica das redes é diferente.

5.3.1.6 Rede hierárquica diamante $d_f = 3$

Vamos agora analisar redes hierárquicas tridimensionais.

Para uma rede hierárquica diamante com dimensão fractal 3 e $b = 2$ (ver Fig. 5.1) o resultado é apresentado no gráfico da Fig. 5.20. A relação de recorrência para esta rede é dada pela Eq. (5.34). Verifica-se que $d^2(n)$ cresce inicialmente de forma exponencial, e através do gráfico, obtemos o expoente de caos $\zeta \cong 0.745$.

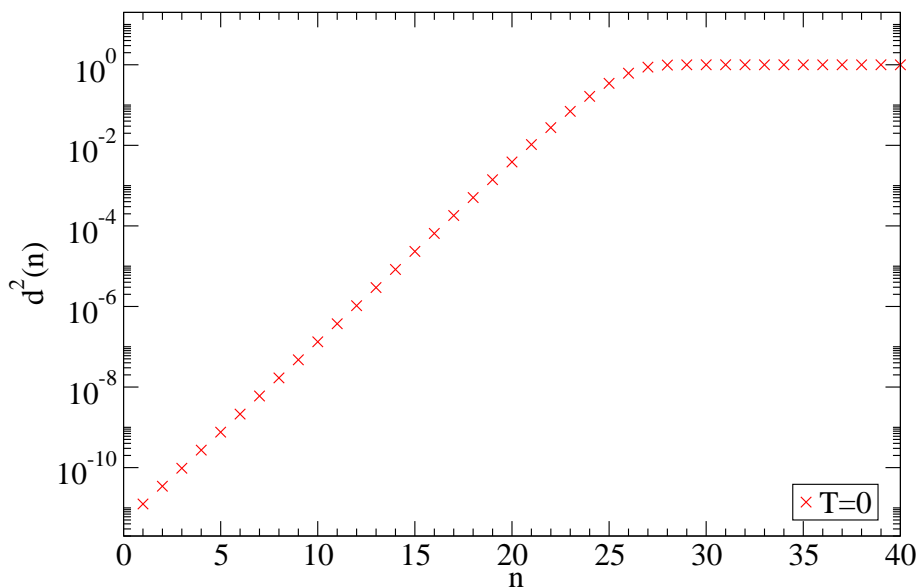


Figura 5.20: Quadrado da distância normalizado, $d^2(n)$, entre $\{J_i\}$ e $\{J'_i\}$ como uma função do número de iterações n à temperatura nula em uma rede hierárquica diamante com $d_f = 3$ e $b = 2$; $d^2(n)$ satura no valor 1 quando $n^* \cong 27$.

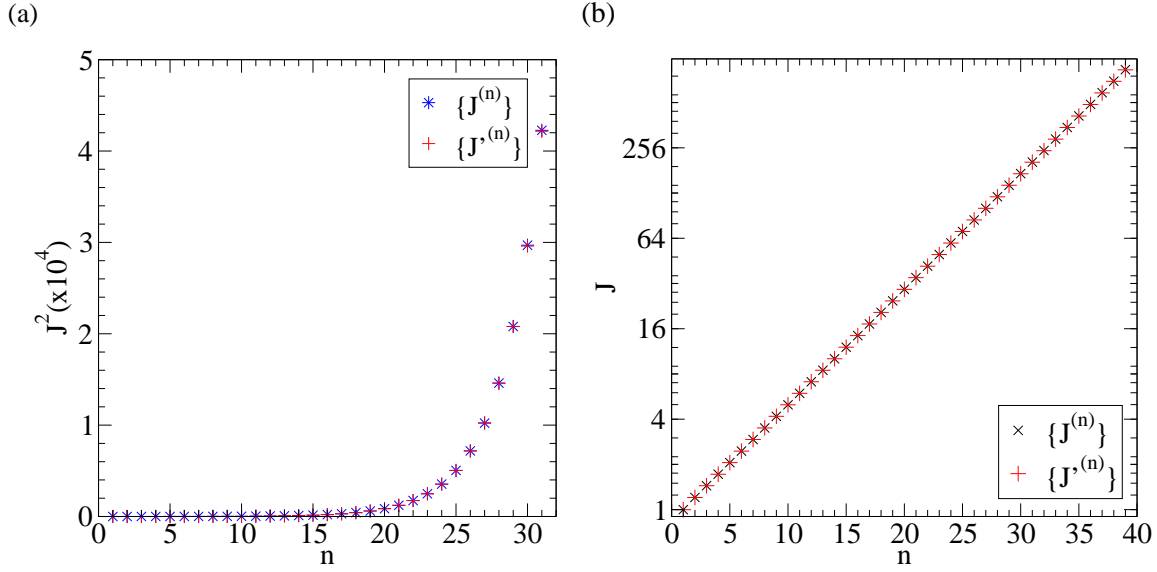


Figura 5.21: Em (a) temos a variância *versus* o número de iterações; (b) gráfico semi-log do desvio padrão J crescendo com um fator 2^y , para a rede hierárquica cuja a célula básica é mostrada na Fig. 5.1.

Para a rede hierárquica cuja a célula básica é mostrada na Fig. 5.1, $d_s = 2$. Com a Eq. (5.3) obtemos o expoente $y \simeq 0.255$; como $y > 0$ a fase vidro de spins é estável. A sua temperatura crítica, encontrada numericamente, é $T_f \simeq 0.88$. Para a rede hierárquica diamante, o expoente de caos é positivo, portanto, a fase vidro de spins a temperatura zero em dimensão $d_f = 3$ apresenta um comportamento caótico, sendo o seu estado fundamental instável em relação às pequenas perturbações nas interações para escalas de comprimento maiores que $L^* = 2^{n^*}$, com $n^* \simeq 27$.

Na Fig. 5.21 apresentamos o gráfico da variância $J^2 \times n$. Quando n aumenta o desvio padrão ($J = \sqrt{J^2}$) aumenta por um fator de 2^y a cada iteração, com $y \simeq 0.255$. A média das distribuições iniciais é zero e permanece assim após n iterações.

5.3.1.7 Rede hierárquica tipo trança $d_f = 3$

Em uma rede hierárquica tipo trança com $d_f = 3$ e $b = 2$ (ver Fig. 3.3(b)), obtemos a seguinte relação de recorrência para T finito

$$K' = \operatorname{arctanh}[\tanh(A)\tanh(B)], \quad (5.50)$$

sendo $A = \sum_{l=1}^4 K_{1l}$ e $B = \sum_{l=1}^4 K_{2l}$. Para temperatura zero a Eq. (5.50) é substituída por

$$J' = \operatorname{sgn}(\mathcal{A}\mathcal{B}) \min(|\mathcal{A}|, |\mathcal{B}|), \quad (5.51)$$

sendo $\mathcal{A} = \sum_{l=1}^4 J_{1l}$ e $\mathcal{B} = \sum_{l=1}^4 J_{2l}$. Criamos os bancos de acoplamentos $\{J_i\}$ e $\{J'_i\}$ e após n iterações, obtemos o gráfico do quadrado da distância como uma função do número de iterações n , mostrado na Fig. 5.22.

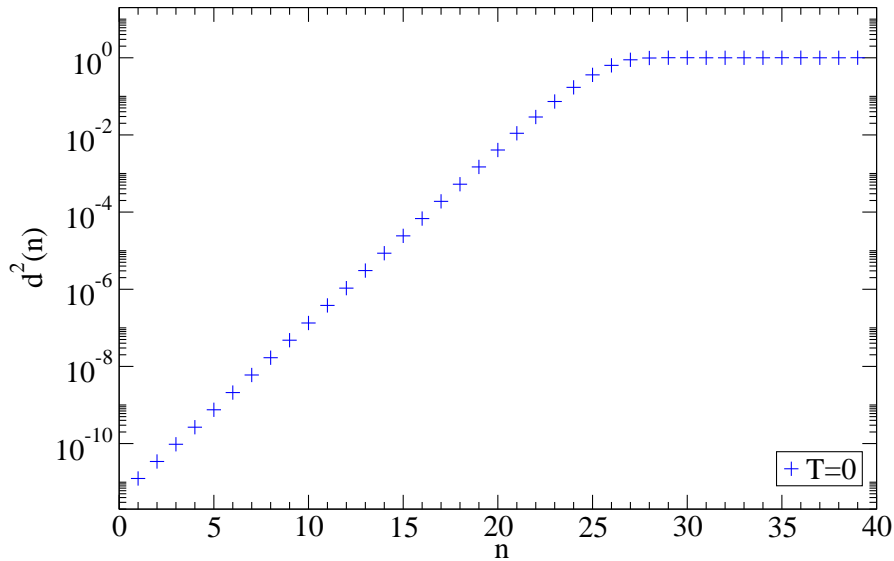


Figura 5.22: Gráfico de $d^2(n) \times n$, sendo n o número de iterações realizadas a temperatura zero em uma rede hierárquica tipo trança de dimensão fractal $d_f = 3$ e $b = 2$; $d^2(n)$ satura no valor 1 quando $n^* \cong 27$.

Obtemos para esta rede o expoente de caos $\zeta \cong 0.745$. Como $\zeta > 0$ o estado fundamental é instável a pequenas perturbações nos acoplamentos para escalas de comprimento maiores que L^* . Para esta rede $d_s = 2$ e usando a Eq. (5.3) obtemos $y \simeq 0.255$, verificando que

para uma rede hierárquica trança com $d_f = 3$ e $b = 2$, a fase vidro de spins é estável à temperatura nula. Obtemos numericamente uma temperatura crítica $T_f \cong 1.76$.

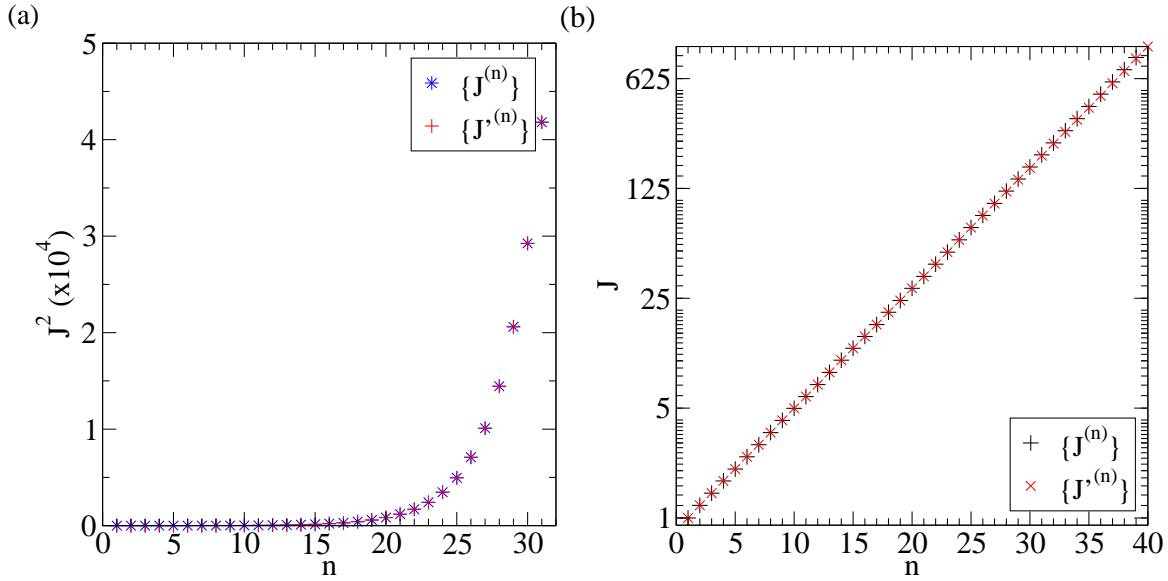


Figura 5.23: (a) Variância de $\{J_i^{(n)}\}$ e $\{J'_i^{(n)}\}$ crescendo a cada iteração, (b) desvio padrão J crescendo a cada iteração com 2^y , sendo $y \sim 0.255$ (rede hierárquica definida pela célula básica da Fig. 3.3(b)).

Na Fig. 5.23(a) apresentamos o gráfico da variância $J^2 \times n$, enquanto que na Fig. 5.23(b) vemos o gráfico semi-log de $J \times n$ de onde obtemos o expoente $y \simeq 0.255$, o que está de acordo com o que foi obtido através da Eq. (5.3). Em três dimensões estudamos mais duas redes hierárquicas, DT2 e DT3, ver na Fig. 5.24, e encontramos os mesmos valores $\zeta \cong 0.745$ e $y \simeq 0.255$ para ambas.

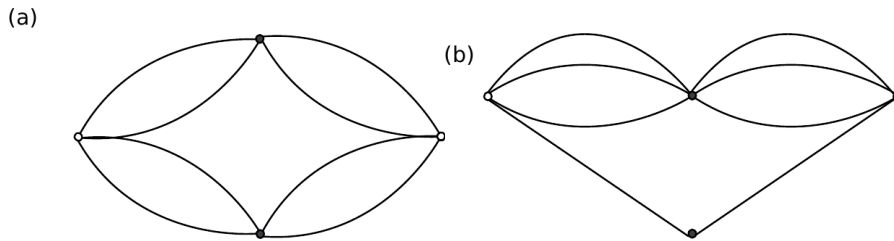


Figura 5.24: Redes hierárquicas com $d_f = 3$; (a) temos a rede hierárquica DT2 com $b = 2$, $d_s = 2$ e $T_f = 1.25$, em (b) a rede hierárquica DT3 com $b = 2$, $d_s = 2$ e $T_f = 1.29$.

Ambas as redes da Fig. 5.24 também apresentam um comportamento caótico, uma vez que depois de número n^* de iterações os bancos de acoplamentos $\{J_i\}$ e $\{J'_i\}$ tornam-se totalmente descorrelacionados. É importante notar que o expoente de caos ζ é igual para todas as quatro redes estudadas em $d_f = 3$. Como nestas redes temos $d_s = 2$, verificamos que todas têm o mesmo expoente y . Como $y > 0$, todas elas apresentam fase vidro de spins para temperatura finita.

5.3.2 Temperatura diferente de zero ($T \neq 0$)

Vamos analisar agora redes com dimensão fractal 2.58 e 3, que apresentam fase vidro de spins à temperatura finita.

Com o objetivo de verificar a existência de um comportamento caótico na fase vidro de spins para temperaturas finitas, um banco de acoplamentos (“bond pool”) J_{ij} é gerado, contendo um milhão de ligações. A partir deste banco de ligações, $\{J_{ij}\}$, construímos dois bancos de ligações efetivas, $\{K_{ij}\}$ e $\{K'_{ij}\}$. O primeiro banco de ligações efetivas será colocado a uma temperatura T e o segundo a uma temperatura $T + \delta T$, onde $\frac{\delta T}{T} = 10^{-6}$, tendo assim uma sutil diferença na temperatura entre os dois bancos de ligações.

Por exemplo, para uma rede tipo diamante com $d_f = 3$, cuja equação de renormalização é dada pela Eq. (5.32), constrói-se um banco inicial de ligações $\{K_i^{(0)}\}$, com $K_i^{(0)} = \frac{J_i^{(0)}}{k_B T}$ acoplamentos adimensionais. Aleatoriamente oito ligações de $\{K_i^{(0)}\}$ são selecionadas e combinadas através da Eq. (5.32), formando a primeira ligação de um novo banco de ligações $\{K_i^{(1)}\}$. Este processo é repetido novamente até que o novo banco de ligações tenha o mesmo número de ligações que o banco inicial, ou seja, 10^6 ligações. Este processo equivale a um passo da renormalização. De forma similar à anterior, um novo banco de ligações $\{K_i^{(2)}\}$ é gerado de $\{K_i^{(1)}\}$, o que equivale a uma nova renormalização, e este processo é repetido n vezes até a geração do banco de ligações $\{K_i^{(n)}\}$.

Um novo banco de ligações $\{K'_i^{(0)}\}$ é gerado, tendo as mesmas ligações $J_i^{(0)}$ de $\{K_i^{(0)}\}$

e uma pequena variação δT na temperatura, e assim,

$$K'_i{}^{(0)} = \frac{J_i^{(0)}}{k_B(T + \delta T)}, \quad (5.52)$$

ou, alternativamente,

$$K'_i{}^{(0)} = \frac{J_i^{(0)}}{k_B T \left(1 + \frac{\delta T}{T}\right)}. \quad (5.53)$$

Como $K_i^{(0)} = \frac{J_i^{(0)}}{k_B T}$, a Eq. (5.53) pode ser reescrita como:

$$K'_i{}^{(0)} = \frac{K_i^{(0)}}{1 + \epsilon}, \quad (5.54)$$

sendo $\epsilon \equiv \frac{\delta T}{T}$. Quando são selecionadas oito ligações do banco $\{K_i^{(n)}\}$ aleatoriamente para a formação de uma nova ligação do banco $\{K_i^{(n+1)}\}$, necessariamente as oito ligações correspondentes ao banco $\{K_i^{(n)}\}$ serão selecionadas para a formação de uma nova ligação na mesma posição na rede para o banco $\{K_i^{(n+1)}\}$.

5.3.2.1 Rede hierárquica diamante $d_f \cong 2.58$

Na rede hierárquica tipo diamante com dimensão fractal $d_f \cong 2.58$ (Fig. 5.13), foi estudado o comportamento caótico apenas para uma temperatura diferente de zero, $T = 0.2$. A dimensão desta rede está muito próxima da dimensão crítica inferior d_{LCD} , tendo assim uma temperatura crítica $T_f \cong 0.29$, ou seja, a fase vidro de spins existe somente para um pequeno intervalo de temperatura acima de zero. Note que $T = 0.2$ é menor que $T_f \cong 0.29$, assim estamos estudando o comportamento caótico em uma temperatura finita dentro da fase vidro de spins.

A relação de recorrência para essa rede é dada pela expressão:

$$K' = \sum_{l=1}^3 \operatorname{arctanh}[\tanh(K_{1l}) \tanh(K_{2l})], \quad (5.55)$$

onde $K_{1l} = J_{1l}/k_B T$ e $K_{2l} = J_{2l}/k_B T$ com $l = 1, 2$ e 3 (ver Fig. 5.13).

Observamos o mesmo comportamento qualitativo das redes já analisadas anteriormente. A distância entre $\{K_i\}$ e $\{K'_i\}$ não sofre grandes alterações inicialmente com relação à distância inicial pois os bancos de acoplamentos estão se aproximando do atrator a temperatura nula, após algumas iterações, $d^2(n)$ novamente diverge exponencialmente com n (ver Fig. 5.25). Na Fig. 5.26 verificamos que a variância cresce de forma exponencial para uma temperatura maior que zero.

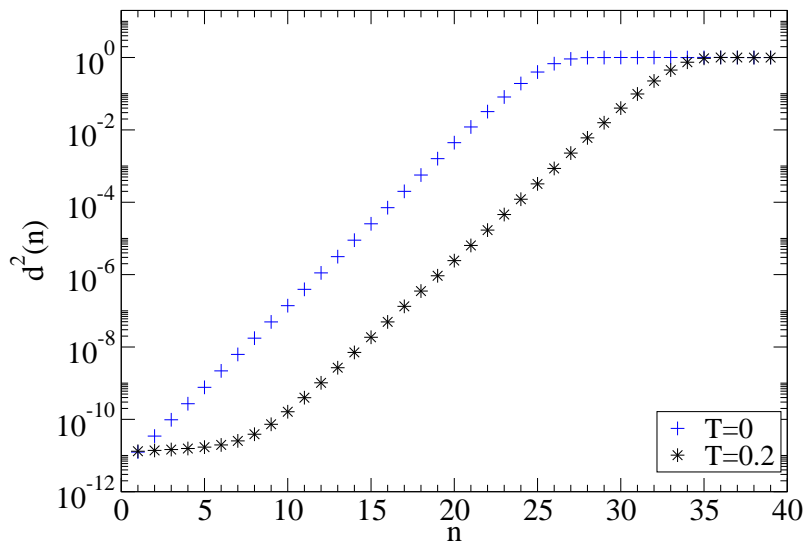


Figura 5.25: Quadrado da distância normalizado, como uma função do número de iterações, para $T = 0$ e $T = 0.2$.

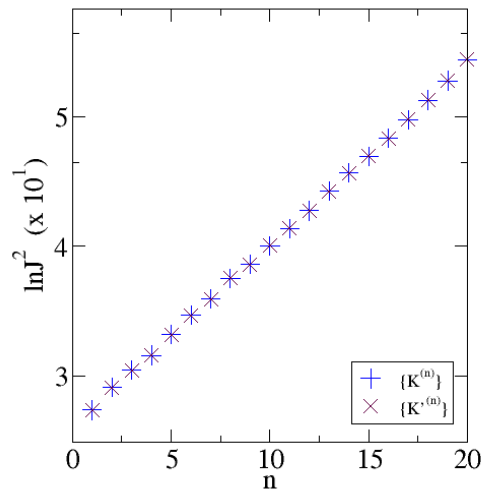


Figura 5.26: Variância versus o número de iterações para a rede hierárquica diamante com $d_f = 2.58$ para um a temperatura $T = 0.2$.

5.3.2.2 Rede hierárquica diamante $d_f = 3$

Para uma rede hierárquica diamante com $d_f = 3$ (Fig. 5.1), foram investigadas três temperaturas finitas abaixo da temperatura crítica que, para esta rede, é de $T_f \cong 0.88$. As temperaturas estudadas são $T = 0.25$, $T = 0.5$ e $T = 0.76$.

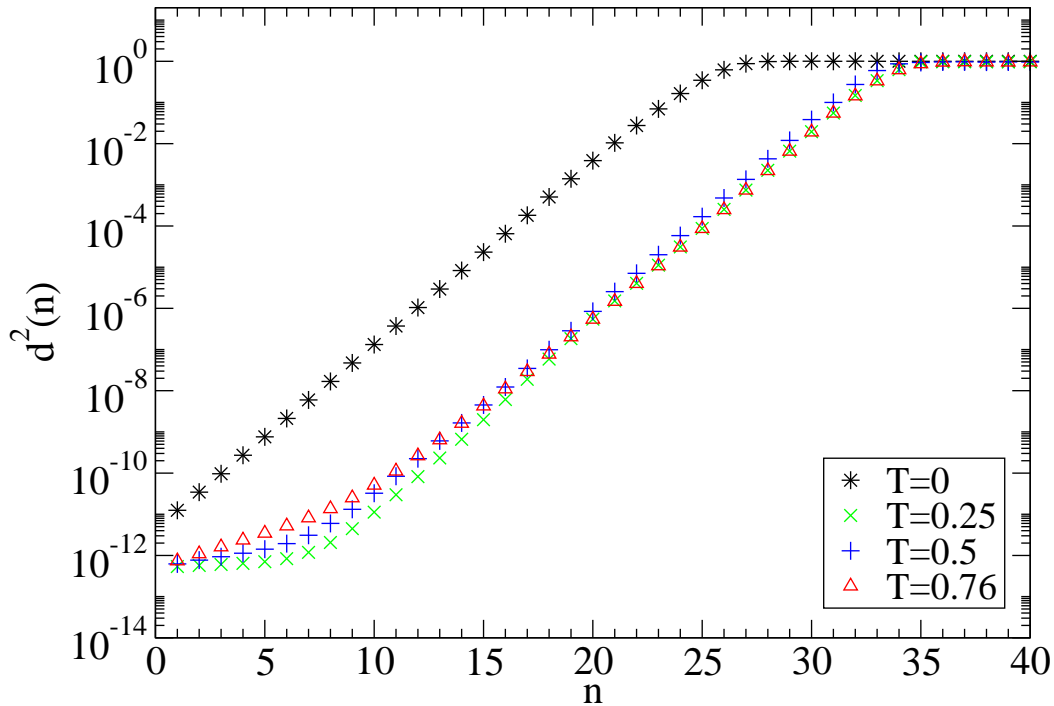


Figura 5.27: Gráfico de $d^2(n) \times n$ para quatro temperaturas diferentes numa rede hierárquica diamante tridimensional com $b = 2$.

Na Fig. 5.27 mostramos o quadrado da distância normalizado $d^2(n)$ como uma função do número de iterações n , para quatro temperaturas diferentes. Inicialmente a distância entre os dois bancos de acoplamentos, para todas as temperaturas maiores que zero, permanece fixa durante as primeiras iterações, a seguir, novamente $d^2(n)$ diverge exponencialmente com n tendo o expoente $\zeta \cong 0.745$, que é o mesmo valor encontrado para temperatura nula nesta rede. Depois de um número n^* de iterações, a distância satura em um, revelando que os dois bancos de acoplamentos estão totalmente descorrelacionados.

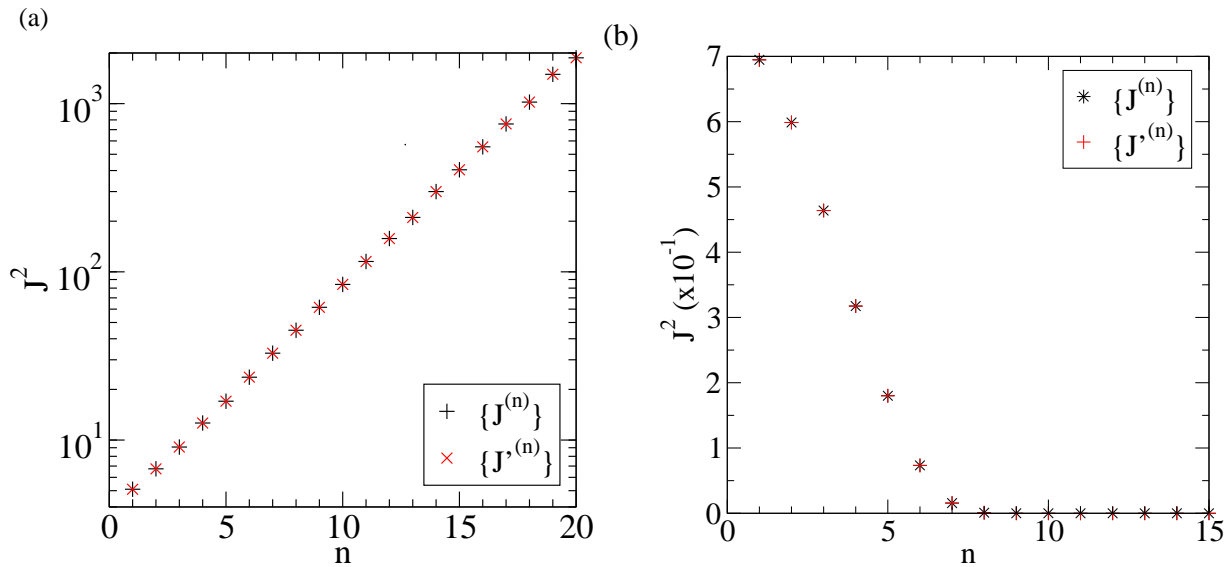


Figura 5.28: (a) Variâncias de $\{K_i^{(n)}\}$ e $\{K_i'^{(n)}\}$ como uma função do número de iterações para temperatura $T = 0.5$; (b) as mesmas variâncias como uma função do número de iterações para uma temperatura $T = 1.2 > T_f$.

Na Fig. 5.28(a) é mostrado como as variâncias de $\{K_i^{(n)}\}$ e $\{K_i'^{(n)}\}$ divergem com o número de iterações para uma temperatura $T = 0.5$, abaixo da temperatura crítica. Em (b) a temperatura $T = 1.2$ é maior que a temperatura crítica do sistema, verificando-se que estas variâncias tendem para zero após algumas iterações, ou seja, não existe a fase vidro de spins para esta temperatura. Em todas as temperaturas estudadas a média (J_0) das distribuições permanece nula.

5.3.2.3 Rede hierárquica tipo trança $d_f = 3$

Na rede hierárquica tipo trança com $d_f = 3$ (Fig. 3.3(b)), foram investigadas quatro temperaturas, $T = 0.5$, $T = 0.7$, $T = 1.3$ e $T = 1.6$, todas abaixo da temperatura crítica $T_f \cong 1.76$. A relação de recorrência usada é a Eq. (5.50),

$$K' = \operatorname{arctanh}[\tanh(A)\tanh(B)],$$

sendo $A = \sum_{l=1}^4 K_{1l}$ e $B = \sum_{l=1}^4 K_{2l}$. Na Fig. 5.29 mostramos o quadrado da distância normalizado como uma função do número de iterações, para cinco temperaturas abaixo da temperatura crítica. Para todas as temperaturas acima de zero, inicialmente a distância entre $\{K_i\}$ e $\{K'_i\}$ não sofre grandes alterações com relação à distância inicial. Após algumas iterações, $d^2(n)$ diverge exponencialmente com n .

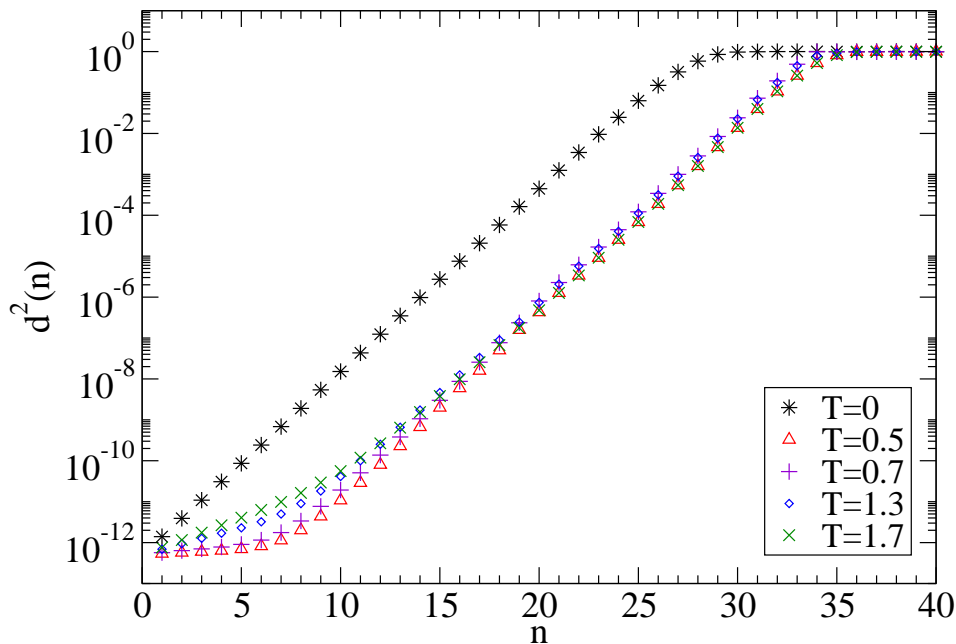


Figura 5.29: Quadrado da distância normalizado $d^2(n)$ como uma função do número de iterações n , para cinco temperaturas abaixo de T_f .

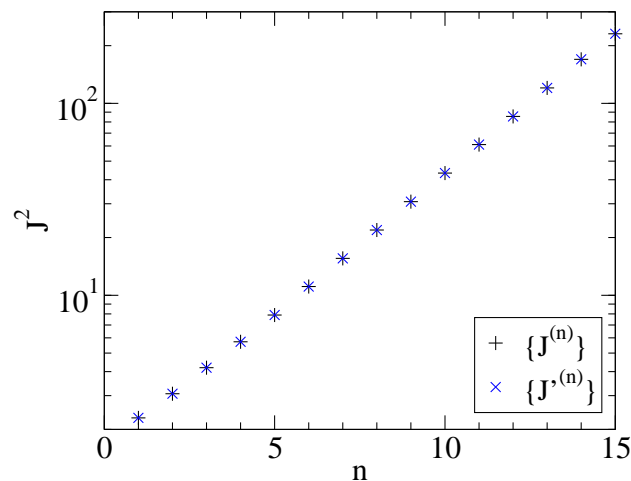


Figura 5.30: Variâncias de $\{K_i^{(n)}\}$ e $\{K'_i{}^{(n)}\}$ como uma função do número de iterações, para temperatura $T = 0.7$.

Observe que tanto à temperatura nula quanto à temperatura diferente de zero, o expoente de caos é positivo, esta é a condição necessária para o comportamento caótico da fase vidro de spins. Após um grande número de iterações, $d^2(n)$ satura em um, situação na qual não existe mais correlação entre os dois bancos de ligações. Na Fig. 5.30 a variância diverge com o número de iterações para a temperaturas de $T = 0.7$, o que é uma característica da fase vidro de spins.

Capítulo 6

Conclusões

Nesta dissertação estudamos os expoentes de caos e de gota em um vidro de spins de Ising, com interações de curto alcance, em diversos tipos de redes hierárquicas. Em todas as redes, o expoente de caos encontrado é positivo ($\zeta > 0$), confirmando que a fase vidro de spins apresenta um comportamento caótico. O expoente de gota, y , mostrou-se negativo para dimensões fractais abaixo de $d_f \simeq 2.58$ e positivo para dimensões fractais superiores ou iguais a $d_f \simeq 2.58$. Todos os resultados desta dissertação foram obtidos através de simulações computacionais, aplicando-se técnicas do grupo de renormalização em redes hierárquicas.

Este comportamento caótico surge devido a pequenas perturbações nos acoplamentos do sistema, fazendo com que 2 spins estejam descorrelacionados a partir de uma determinada escala de comprimento $L \gtrsim L^*$, onde L^* depende da intensidade da perturbação. Portanto, para escalas de comprimento maiores que L^* , uma pequena perturbação torna o estado fundamental do sistema descorrelacionado com o estado do sistema sem a perturbação. O estado fundamental de redes que apresentam a fase vidro de spins à temperatura finita também apresenta o mesmo efeito devido à pequenas variações na temperatura.

Obtemos também o expoente y para todas as redes estudadas. Observamos que para as redes com dimensão fractal abaixo de $d_f \cong 2.58$ o expoente y é negativo ($y < 0$), e portanto, nestas redes não temos fase vidro de spins para temperaturas finitas. Para

dimensões fractais superiores ou iguais a $d_f \cong 2.58$ o expoente y é positivo ($y > 0$), logo a fase vidro de spins existe nestas redes. Isto também mostra que a dimensão crítica inferior, d_{LCD} , situa-se entre $d_f \cong 2.32$ e $d_f \cong 2.58$, ou seja, $2.32 \leq d_{LCD} \leq 2.58$ em redes hierárquicas. Na verdade, ela deve ser muito próxima de 2.58, pois nesta o expoente y é levemente positivo.

As redes hierárquicas tipo diamante e trança, cuja dimensão fractal é 2, apresentam o mesmo expoente de caos, $\zeta \cong 0.769$. O mesmo foi observado em redes tipo diamante, trança e DT1 com dimensão fractal 2.58, ambas com $\zeta \cong 0.75$. Redes tipo diamante, trança, DT2 e DT3 com dimensão fractal 3, tem expoente $\zeta \cong 0.745$. Para redes com $d_f \geq 2.58$, estudamos o comportamento caótico devido a perturbações nos acoplamentos e na temperatura. Nossas simulações indicam que o expoente de caos em uma rede específica é independente do tipo de perturbação que o sistema é submetido, ou seja, ζ é o mesmo para pequenas perturbações nos acoplamentos e na temperatura. Na tabela 6.1 os resultados para as diversas redes estudadas são resumidos.

Observamos em redes que têm a mesma dimensão fractal (d_f), número mínimo de ligações a serem cortadas para isolar um spins da extremidade (q), número de ligações sobre o menor caminho que conectam os dois spins das extremidades (b) e número de ligações (g) iguais, têm em comum o mesmo expoente de caos ζ . Estas redes hierárquicas podem ser obtidas de uma rede de Bravais (a rede cúbica, por exemplo) pelo esquema de deslocamento de ligações de Kadanoff. Redes com $d_f > d_{LCD}$, como as redes tipo diamante, trança e DT1 com $d_f \cong 2.58$, apresentam uma temperatura crítica que é diferente para cada rede, porém, nesta redes os expoentes ζ e y são iguais. O mesmo ocorre com as redes tipo diamante, trança, DT2 e DT3 com $d_f = 3$.

Tabela 6.1: Resumo dos resultados obtidos para cada rede hierárquica.

Rede Hierárquica	d_f	b	g	q	d_s	ζ	y	T_f
D=1	1	2	2	1	0	1	-1	-
Diamante	2	2	4	2	1	0.769	-0.269	-
Trança	2	2	4	2	1	0.769	-0.269	-
Rede PWH	2	3	9	3	1	0.780	-0.280	-
Ponte de Wheatstone	2.32	2	5	2	1	0.81	-0.31	-
Diamante	2.58	2	6	3	1.58	0.75	0.04	0.29
Trança	2.58	2	6	3	1.58	0.75	0.04	0.5
DT1	2.58	2	6	3	1.58	0.75	0.04	0.34
Diamante	3	2	8	4	2	0.745	0.255	0.88
Trança	3	2	8	4	2	0.745	0.255	1.76
DT2	3	2	8	4	2	0.745	0.255	1.25
DT3	3	2	8	4	2	0.745	0.255	1.29

Observando a tabela 6.1, nota-se que o expoente de caos para a família de redes hierárquicas diamante decresce quando a dimensão fractal aumenta de 1 para 3. As redes que não podem ser geradas pelo esquema de “bond-moving” (rede PWH e ponte de Wheatstone) não seguem este comportamento.

Em todas as redes, o gráfico da distância entre as configurações original e perturbada em função do número de renormalizações da rede apresenta uma forma bem característica, tanto para perturbações nos acoplamentos quanto na temperatura, inicialmente crescendo de forma exponencial, $d^2(n) \simeq (\epsilon^2/2)b^{2n\zeta}$, e depois de um número n^* de iterações, tal que $L^* \equiv b^{n^*} \simeq (1/\epsilon^{1/\zeta})$, saturando no valor um. Na tabela 6.1 apresentamos os expoentes ζ e y encontrados para cada tipo de rede hierárquica estudada nesta dissertação.

Referências Bibliográficas

- [1] Cannella, V., e J. A. Mydosh, *Phys. Rev. B* **6**, 4220 (1972).
- [2] Binder, K e Young, A. P., *Rev. Mod. Phys.* **58**, 801 (1986).
- [3] Wenger, L. E. e Keesom, P. H., *Phys. Rev. B* **13**, 4053 (1976).
- [4] Edwards, S. F. e Anderson, P. W., *J. Phys. F: Metal Phys.* **5**, 965 (1975).
- [5] Sherrington, D. e Kirkpatrick, S., *Phys. Rev. Lett.* **35**, 1792 (1975).
- [6] de Almeida, J. R. L. e Thouless, D. J., *J. Phys. A* **11**, 983 (1978).
- [7] Mézard, M., Parisi, G. e Virasoro, M. A., *Spin Glass Theory and Beyond*. Singapore: World Scientific, 1987.
- [8] Parisi, G., *Phys. Rev. Lett.* **43**, 1754 (1979).
- [9] Parisi, G., *Phys. Rev. Lett.* **50**, 1946 (1983).
- [10] Mézard, M., Parisi, G., Sourlas, N., Toulouse, G. e Virasoro, M., *Phys. Rev. Lett.* **52**, 1156 (1984).
- [11] Bray, A. J. e Moore, M. A., *J. Phys. C* **17**, L613 (1984).
- [12] McMillan, W. L., *J. Phys. C* **17**, 3179 (1984).
- [13] Fisher, D. S. e Huse, D. A., *Phys. Rev. Lett.* **56**, 1601 (1986).
- [14] Fisher, D. S. e Huse, D. A., *J. Phys. A* **20**, L1005 (1987).

- [15] Fisher, D. S. e Huse, D. A., *Phys. Rev. B* **38**, 386 (1988).
- [16] Parisi, G., *Physica A* **124**, 523 (1984).
- [17] Franz, S. e Ney-Nifle, M., *J. Phys. A* **28**, 2499 (1995).
- [18] Bray, A. J. e Moore, M. A., *Phys. Rev. Lett.* **58**, 57 (1987).
- [19] Banavar, J. R. e Bray, A. J., *Phys. Rev. B* **35**, 8888 (1987).
- [20] Hartmann, A. K., *Phys. Rev. B* **77**, 144418 (2008).
- [21] Wilson, K. G. e Kogut, J., *Phys. Rep.* **12**, 75 (1974).
- [22] Kadanoff, L. P., *Ann. Phys.* **100**, 359 (1976).
- [23] Wilson, K. G., *Phys. Rev. B* **4**, 3174 (1971).
- [24] Berker, A. S. e Ostlund, S., *J. Phys. C : Solid State Phys.* **12**, 4961 (1979).
- [25] Griffiths, R. B. e Kaufman, M., *Phys. Rev. B* **26**, 5022 (1982).
- [26] Kaufman, M. e Griffiths, R. B., *Phys. Rev. B* **24**, 496 (1981).
- [27] Qin, Y. e Yang. Z. R., *Phys. Rev. B* **43**, 8576 (1991).
- [28] Oliveira, I. O. e Jesus, V. L. B., *Introdução à Física do Estado Sólido*, São Paulo: Livraria da Física, 2005.
- [29] Onsager, L., *Phys. Rev.* **65**, 117 (1944).
- [30] Baxter, R. J., *Phys. Rev. Lett.* **26**, 832 (1971).
- [31] McKay, S.R., Berker, A.N., e Kirkpatrick, S., *Phys. Rev. Lett.* **48**, 767 (1982).
- [32] Migliorini, G. e Berker, A.N., *Phys. Rev. B* **57**, 426 (1998).
- [33] Andelman, D., e Berker, A.N., *Phys. Rev. B* **29**, 2630 (1984).

- [34] Falicov, A., Beker, A. N. e McKay, S. R., *Phys. Rev. B* **51**, 8266 (1995).
- [35] Langlois, J.-M., Tremblay, A.-M.S., e Southern, B.W., *Phys. Rev. B* **28**, 218 (1983).
- [36] Stinchcombe, R.B. e . Maggs, A.C, *J. Phys. A* **19**, 1949 (1986).
- [37] Haddad, T.A.S., Pinho, S.T.R. e Salinas, S.R., *Phys. Rev. E* **61**, 3330 (2000).
- [38] Le, J. -X e Yang, Z. R., *Phys. Rev. E* **69**, 066107 (2004).
- [39] Southern, B. W. e Young, A. P., *J. Phys. C: Solid State Phys.* **10**, 2179 (1977).
- [40] Gefen, Y., Mandelbrot, B. e Aharony, A., *Phys. Rev. Lett.* **45**, 855 (1980).
- [41] Melrose, J. R., *J. Phys. A: Math. Gen.* **16**, 3077 (1983).
- [42] Melrose, J. R., *J. Phys. A: Math. Gen.* **16**, L407 (1983).
- [43] Wu, F. Y., *Rev. Mod. Phys.* **54**, 235 (1982).
- [44] Nishimori, H., *Statistical Physics of Spin Glasses and Information Processing: I Introduction*. New York: Oxford University Press, 2001.
- [45] Ruderman, M. A. e Kittel, C., *Phys. Rev.* **96**, 99 (1954).
- [46] Kasuya, T., *Prog. Theor. Phys.* **16**, 45 (1956).
- [47] Yosida, K., *Phys. Rev.* **106**, 893 (1957).
- [48] Mulder, C. A. M., van Duynveldt, A. J. e Mydosh, J. A., *Phys. Rev. B* **23**, 1384 (1981).
- [49] Nagata, S., Keesom, P. H. e Harrison H. R., *Phys. Rev. B* **19**, 1633 (1979).
- [50] Newman, C. M. e Stein D. L., *Phys. Rev. B* **46**, 973 (1992).
- [51] Newman, C. M. e Stein D. L., *Phys. Rev. Lett.* **76**, 515 (1996).

- [52] Newman, C. M. e Stein D. L., *Phys. Rev. E* **57**, 1356 (1998).
- [53] Boettcher, S. e Hartmann, A. K., *Phys. Rev. B* **72**, 014429 (2005).
- [54] Katzgraber, H. G. e Krzakala, F., *Phys. Rev. Lett.* **98**, 017201 (2007).
- [55] Boettcher, S., *Phys. Rev. Lett.* **95**, 197205 (2005).
- [56] Carter, A. C., Bray, A. J. e Moore, M. A., *Phys. Rev. Lett.* **88**, 077201 (2002).
- [57] Aspelmeier, T, Bray, A. J. e Moore, M. A., *Phys. Rev. Lett.* **89**, 197202 (2002).
- [58] Hartmann, A. K., *Phys. Rev. E* **59**, 84 (1999).
- [59] Bray, A. J. e Moore, M. A., *J. Phys. C* **17**, L463 (1984).
- [60] Curado, E. M. F. e Meunier, J. L., *Physica A* **149**, 164 (1988).
- [61] Bray, A. J. e Moore, M. A., em *Heidelberg Colloquium on Spin Glasses* eds. van Hemmen, J. L. e Morgenstern, I., Springer, P.121, 1986.
- [62] Kawashima, N. e Rieger, H., *Recent progress in spin glasses in Frustrated Spin Systems*, ed. Diep, H. T. Singapore: World Scientific 2004; cond-mat/0312432.
- [63] Fisher, D. S. e Huse, D. A., *J. Phys. A: Math. Gen.* **20**, L1005 (1987).
- [64] Imry, Y. e Ma, S. K., *Phys. Rev. Lett.* **35**, 1399 (1975).
- [65] Nobre, F. D., *Physica A* **250**, 163 (1998).