

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

O VIDRO DE SPINS DE ISING NA REDE HIERÁRQUICA  
PONTE DE WHEATSTONE TRIDIMENSIONAL

**BRÁULIO TADEU AGOSTINI**

CENTRO BRASILEIRO DE PESQUISAS FÍSICAS

Rio de Janeiro de 2008

Dedico esta Dissertação

A Deus,

A meus pais,

E a meus irmãos.

# Agradecimentos

Agradeço primeiramente a Deus por me dar todas as coisas boas e me iluminar todos os dias de minha vida.

Aos meus pais e meus irmãos pelo apoio e suporte. Em especial, ao meu pai José Antônio e a minha mãe Alzenira.

Ao meu orientador Fernando Dantas Nobre por sempre ser muito prestativo.

Ao professor Tião e todos os colegas que me ajudaram de alguma forma neste trabalho. Em especial aos meus primos Humberto e Gustavo, aos meus colegas de departamento Octavio e Veit, a Habib, a Diogo e a Marcelo.

Aos funcionários do CBPF, em especial, ao Almério e a Beth.

À CAPES pelo suporte financeiro.

# Resumo

Neste trabalho, estudamos as propriedades críticas do vidro de spins de Ising com interações entre primeiros vizinhos na rede hierárquica correspondente ao análogo tridimensional da rede gerada a partir da ponte de Wheatstone. As distribuições que utilizamos para os acoplamentos foram a bimodal e a gaussiana. Sendo esta rede hierárquica uma aproximação da rede cúbica, os resultados obtidos devem ser úteis como aproximações daqueles da rede de Bravais correspondente. Além de estimativas das temperaturas críticas, a partir das quais construímos os diagramas de fases, também calculamos os valores do expoente de rigidez a temperatura nula e do expoente crítico  $\nu$  ao longo da fronteira entre as fases vidro de spins e paramagnética. Para a obtenção dos resultados, utilizamos um método numérico para acompanhar a evolução da distribuição de probabilidades (a qual é representada por um banco de números) ao longo do procedimento de renormalização. Alguns de nossos resultados foram comparados com valores obtidos por simulações de Monte Carlo recentes existentes na literatura e verificamos:

- as temperaturas críticas estimadas, no presente trabalho, apresentam discrepâncias relativas de 1% (distribuição bimodal) e 3% (distribuição gaussiana) com relação às estimativas das simulações;
- o expoente crítico  $\nu$ , o qual satisfaz a propriedade da universalidade, apresentou uma discrepância relativa maior (da ordem de 20%) com relação ao valor estimado pelas simulações.

# Abstract

In this work, we study the critical properties of an Ising spin glass with interactions between nearest-neighbor spins on a hierarchical lattice that corresponds to a three-dimensional analogue of the one generated from the Wheatstone-bridge cell. The distributions used for the couplings were the bimodal and Gaussian ones. Since this hierarchical lattice corresponds to an approximation of the cubic lattice, its results should be useful as approximations for those of the corresponding Bravais lattice. In addition to the estimates of critical temperatures, from which we built the phase diagrams, we also calculated the values of the stiffness exponent at zero temperature and the critical exponent  $\nu$  along the border between the spin-glass and paramagnetic phases. In order to obtain the results, we used a numerical method to track the evolution of the probability distribution (which is represented by a bank of numbers) along the renormalization procedure. Some of our results were compared with values obtained by recent Monte Carlo simulations of the literature and we verified that:

- The critical temperatures estimated in this work present relative discrepancies of 1% (bimodal distribution) and 3% (Gaussian distribution) with respect to the estimates of the simulations;
- The critical exponent  $\nu$ , which satisfies the property of universality, showed a higher relative discrepancy (of the order of 20 %) with respect to the value estimated by the simulations.

# Sumário

Agradecimentos . . . . .	ii
Resumo . . . . .	iii
Abstract . . . . .	iv
<b>1 Introdução</b>	<b>1</b>
<b>2 Os fenômenos críticos</b>	<b>4</b>
2.1 Introdução aos fenômenos críticos . . . . .	4
2.2 A era moderna . . . . .	9
2.2.1 Os expoentes críticos . . . . .	9
2.2.2 A hipótese de escala . . . . .	13
2.2.3 O grupo de renormalização . . . . .	20
2.3 Redes hierárquicas . . . . .	27
2.3.1 Aplicação do grupo de renormalização à rede hierárquica do tipo diamante . . . . .	30
<b>3 Vidros de spins</b>	<b>34</b>
3.1 Introdução aos vidros de spins . . . . .	34
3.2 O método das réplicas . . . . .	37
3.3 O modelo de Edwards-Anderson . . . . .	37
3.4 Solução de campo médio . . . . .	39
3.4.1 O modelo de Sherrington-Kirkpatrick . . . . .	39
3.4.2 Quebra de simetria entre réplicas . . . . .	41
3.5 Aplicação do grupo de renormalização aos vidros de spins . . . . .	44

3.5.1 Renormalização no espaço real . . . . .	45
<b>4 Criticalidade do vidro de spins de Ising em uma rede hierárquica da família da ponte de Wheatstone</b>	<b>49</b>
4.1 Introdução . . . . .	49
4.2 Cálculo da relação de recorrência . . . . .	50
4.3 Resultados . . . . .	53
<b>5 Conclusão</b>	<b>62</b>
<b>Referências Bibliográficas</b>	<b>65</b>

# Capítulo 1

## Introdução

Os sistemas idealizados, considerados como uma primeira abordagem para se estudar os sistemas reais, possuem simplificações, podendo apresentar características diferentes daquelas dos sistemas reais. Nestes modelos, a desordem se tornou um importante aspecto a ser estudado para se entender o efeito da mesma nas propriedades dos materiais. Existem dois tipos de desordem, a recozida e a temperada. Nos sistemas com desordem recozida o tempo de relaxação é tal que os átomos podem se “acomodar” em estados de menor energia e assim os mesmos apresentam características similares aos sistemas não aleatórios. Já no caso da desordem temperada, o tempo de relaxação não é suficiente para a “acomodação” dos átomos e a desordem desempenha um papel fundamental. A física dos sistemas desordenados apresenta um vasto conjunto de publicações e como boas referências temos [1–4]. Nas últimas décadas, os vidros de spins têm atraído uma grande atenção, sendo considerados como dos mais fascinantes sistemas dentre os materiais magnéticos desordenados. Eles apresentam características bem diferentes dos sistemas não aleatórios tais como um pico pronunciado da suscetibilidade a campo zero, um máximo arredondado do calor específico e uma desordem de longo alcance congelada abaixo da temperatura de transição para a fase de vidro de spins, assim como histerese e remanescência. O primeiro modelo utilizado para o estudo dos vidros de spins foi o de Edwards-Anderson, que introduziu o conceito das *réplicas*, e que deu uma importante base para a solução de campo médio, proposta por Sherrington e Kirkpatrick. O modelo de Sherrington-Kirkpatrick permitiu calcular os parâmetros de ordem de vidros de spins e a magnetização, assim

como descreveu corretamente o diagrama de fases para altas temperaturas; já em baixas temperaturas, a solução proposta por Sherrington e Kirkpatrick falhou, uma vez que produziu uma entropia negativa, associada com uma instabilidade [47]. Este problema, foi solucionado pela solução de Parisi, através do procedimento de quebra de simetrias entre réplicas. Apesar do grande esforço empregado, ainda falta uma teoria satisfatória para a descrição dos vidros de spins com interações de curto alcance.

Para o caso de spins de Ising com  $S = \frac{1}{2}$ , muito progresso já foi alcançado, tanto em nível de campo médio, quanto em nível de interações entre spins primeiros vizinhos. Para sistemas de interações de curto alcance, diversos trabalhos [5, 8–19] concordam que a dimensão crítica inferior  $d_i$  está no intervalo  $2 \leq d_i \leq 3$ , no sentido que a transição para a fase de vidros de spins apresenta uma temperatura crítica finita em três dimensões e uma temperatura crítica nula em duas dimensões. Esta conclusão foi alcançada através de argumentos de parede de domínios a temperatura zero [8–12], poderosas simulações numéricas [13–17], e expansões de séries de altas temperaturas [18, 19].

Os primeiros a alcançarem o resultado de que a dimensão crítica inferior  $d_i$  se encontra no intervalo  $2 \leq d_i \leq 3$  foram Southern e Young [5] através de uma aproximação de grupo de renormalização de Migdal-Kadanoff, baseado em redes hierárquicas do tipo diamante. Para uma rede hierárquica do tipo diamante com dimensão fractal  $D = 3$ , Southern e Young [5] e outros autores [6, 7] estimaram as temperaturas críticas para distribuições simétricas, em especial, pode-se citar  $\frac{k_B T_C}{J} = 1,05 \pm 0,02$  (distribuição bimodal) e  $\frac{k_B T_C}{J} = 0,88 \pm 0,02$  (distribuição gaussiana) ambas de largura  $J$ . No trabalho recente, usado como referência nesta dissertação, de simulações de Monte Carlo de H. G. Katzgraber, M. Körner e A. P. Young [17], para o vidro de spins de Ising na rede cúbica, forneceram os valores de  $\frac{k_B T_C}{J} = 1,120 \pm 0,004$  para a distribuição bimodal e  $\frac{k_B T_C}{J} = 0,951 \pm 0,009$  para a distribuição gaussiana.

Nesta dissertação, estudamos as propriedades críticas do vidro de spins de Ising com interações entre primeiros vizinhos na rede hierárquica correspondente ao análogo tridimensional da ponte de Wheatstone. Esperamos que esta rede hierárquica forneça valores de temperaturas críticas próximas aos valores mostrados acima, já que a mesma representa uma aproximação da rede cúbica embora apresente dimensão fractal 3,58. Este fato

é corroborado pela rede hierárquica da ponte de Wheatstone bidimensional que fornece a temperatura crítica de transição paramagnética/ferromagnética exata [20] embora apresente dimensão fractal 2,32. Além disso, obtivemos os diagramas de fases, assim como os expoentes de rigidez e o expoente crítico  $\nu$  do modelo para as distribuições de probabilidades bimodal e gaussiana.

A organização da dissertação é a seguinte: no capítulo 2, faremos uma revisão dos principais conceitos da teoria moderna dos fenômenos críticos. Inicialmente, o capítulo começa com uma pequena introdução histórica sobre a era clássica dos fenômenos críticos. A seguir, ressaltamos os tópicos principais da era moderna na ordem histórica começando pelos expoentes críticos, depois as hipóteses de escala de Widom e Kadanoff, seguidas pelo grupo de renormalização e terminando com as redes hierárquicas.

No capítulo 3, apresentamos as principais características teóricas e experimentais dos vidros de spins. Depois efetuamos a discussão do modelo de Edwards-Anderson, seguida pela teoria do campo médio para os vidros de spins começando com o modelo de Sherrington-Kirkpatrick e terminando com a solução de Parisi. O capítulo é finalizado com a discussão da aplicação do grupo de renormalização aos vidros de spins.

No capítulo 4, mostramos os resultados obtidos através do estudo numérico das propriedades críticas do vidro de spins de Ising com interações entre primeiros vizinhos na rede hierárquica correspondente ao análogo tridimensional da ponte de Wheatstone. Finalizamos o trabalho no capítulo 5 onde apresentamos nossas conclusões.

# Capítulo 2

## Os fenômenos críticos

### 2.1 Introdução aos fenômenos críticos

Muitos dos fatos básicos dos fenômenos críticos foram observados no século XIX e no início do século XX, enquanto outros foram observados a partir da década de 60 do século passado. Por esse motivo, é comum dividir a área dos fenômenos críticos nas eras clássica e moderna.

A era clássica se baseava na equação de estado. Esta é uma relação funcional envolvendo a pressão  $P$ , a temperatura  $T$  e o volume  $V$  (ou equivalentemente a densidade  $\rho$ ) para o caso de sistemas fluidos e, para o caso magnético, o campo magnético  $H$ , a magnetização  $M$  e a temperatura  $T$ . Através da equação de estado é possível observar o comportamento dos sistemas nas diferentes fases através de gráficos bi-dimensionais  $PV$ ,  $PT$  e  $VT$  para os fluidos e  $HT$ ,  $HM$  e  $MT$  para os sistemas magnéticos. Como exemplo, nas figuras 2.1 e 2.2 são representados os gráficos  $PT$  e  $HT$ . Eles correspondem a diagrama de fases típicos dos sistemas fluidos e magnéticos, respectivamente.

No diagrama da figura 2.1, tem-se três curvas de coexistência. O ponto onde elas se encontram é chamado de *ponto triplo*, onde o fluido pode coexistir nas fases *sólida*, *líquida* e *gasosa*. A curva ligando o ponto triplo à origem é a chamada *curva de sublimação*, que divide as fases gasosa e sólida. Das demais curvas que saem do ponto triplo, a que está mais à esquerda é a *curva de fusão*, que divide as fases líquida e sólida. Já a curva mais à direita é a curva de *vaporização* ou de *pressão de vapor*, que divide as fases líquida e

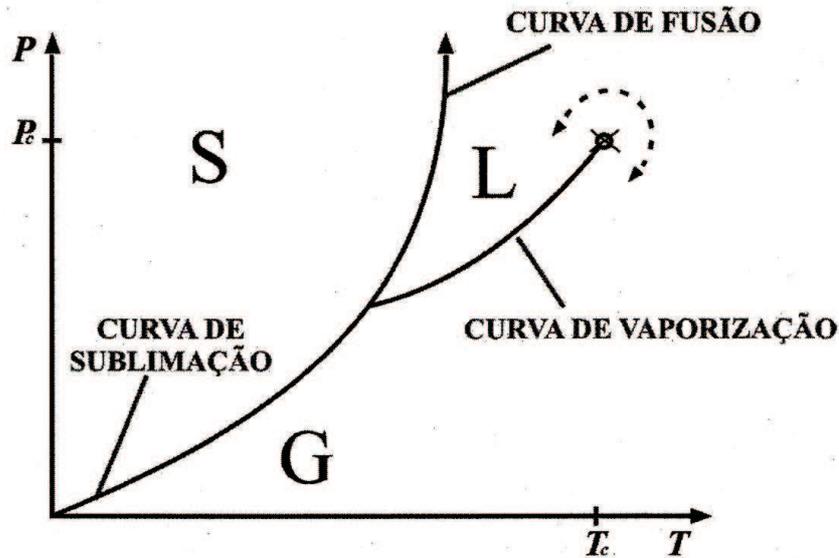


Figura 2.1: Diagrama de fases para sistemas fluidos representado pelo gráfico  $PT$ , com as fases sólida ( $S$ ), líquida ( $L$ ) e gasosa ( $G$ ) (figura retirada da referência [21]).

gasosa.

No diagrama da figura 2.2, existe uma curva de coexistência abaixo de  $T_C$ , enquanto que acima não há. Na parte do gráfico abaixo de  $T_C$ , a curva de coexistência corresponde a duas fases *ferromagnéticas*  $F$ , orientadas de acordo com o campo magnético ( $H \rightarrow 0_+$  e  $H \rightarrow 0_-$ ), e acima de  $T_C$ , existe somente a fase paramagnética  $P$  onde os spins apontam em direções aleatórias.

Nos dois gráficos, todos os pontos pertencentes às curvas de coexistência são chamados de pontos críticos. O ponto crítico localizado em  $(T_C, P_C)$ , no final da curva de vaporização, é chamado de *ponto crítico terminal*. A mesma situação ocorre para o diagrama de fases magnético no ponto  $(T_C, H = 0)$ . Até hoje, não foi detectado um ponto crítico terminal associado à curva de fusão.

Aqui, pode-se definir a grandeza chamada de *parâmetro de ordem*. O parâmetro de ordem é uma quantidade macroscópica que é normalmente diferente de zero abaixo de  $T_C$  e igual à zero acima de  $T_C$ . Para os sistemas mencionados acima, tem-se no caso fluido que o parâmetro de ordem é definido pela diferença de densidades das fases em questão,

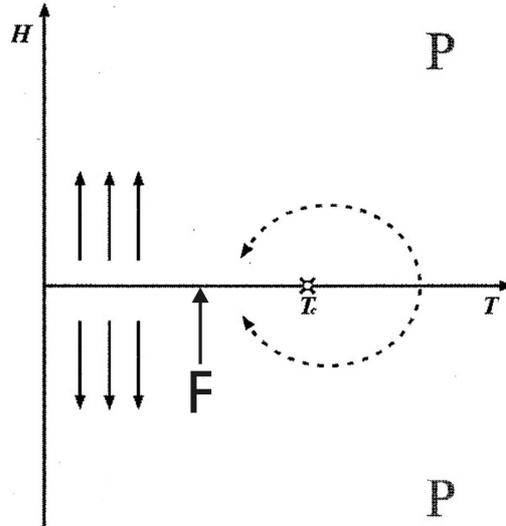


Figura 2.2: Diagrama de fases para sistemas magnéticos representado pelo gráfico  $HT$ ; a fase ferromagnética ( $F$ ) existe apenas para  $H = 0$ , enquanto que para  $H \neq 0$ , tem-se apenas a fase paramagnética ( $P$ ) (figura retirada da referência [21]).

enquanto que no sistema ferromagnético esta grandeza é a magnetização.

No diagrama de fases do caso fluido, acima de  $T_C$ , não é possível distinguir as fases líquida ( $L$ ) e gasosa ( $G$ ) e assim,  $\rho_L - \rho_G = 0$ . Da mesma forma, no diagrama magnético há a ausência de magnetização. Estes fatos são bem mostrados nas figuras 2.3 e 2.4. Na figura 2.3, tem-se o gráfico  $\rho T$  para o sistema fluido. O parâmetro de ordem é definido por  $\rho_L - \rho_G$  que se anula em  $T_C$ . À medida que a temperatura diminui abaixo de  $T_C$ , o parâmetro de ordem, representado pela curva no gráfico que separa as fases líquida ( $L$ ) e gasosa ( $G$ ) vai aumentando. Na figura 2.4, o gráfico representado no plano  $MT$  se aplica para o sistema magnético. O parâmetro de ordem é a magnetização e de maneira análoga ao caso fluido, se anula em  $T_C$  e é representada pela curva no gráfico. A fase em que o sistema se encontra no interior da curva é a ferromagnética ( $F$ ) e exterior à curva é a paramagnética ( $P$ ). A partir de agora, como é comum na literatura, o ponto crítico terminal será referido simplesmente como ponto crítico.

Ainda no contexto da era clássica, foi desenvolvida a teoria de Landau [22]. Esta é

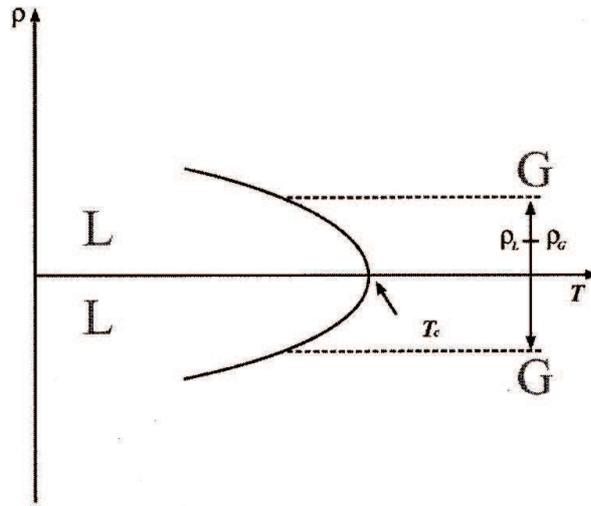


Figura 2.3: Gráfico  $\rho T$  para sistemas fluidos mostrando as fases líquida ( $L$ ) e gasosa ( $G$ ) (figura retirada da referência [21]).

uma teoria equivalente a uma teoria de campo médio. A teoria de campo médio, que geralmente é tomada como uma primeira aproximação para o tratamento dos fenômenos críticos, considera que cada um dos constituintes microscópicos (átomos, moléculas ou spins) do sistema interage com um campo resultante dos efeitos dos demais constituintes. A teoria de Landau, por sua vez, considera que a energia livre de Gibbs é uma função analítica do parâmetro de ordem na proximidade do ponto crítico, e por isso, efetua-se uma expansão em potências do parâmetro de ordem para descrever uma transição de fases contínua (onde não há um calor latente envolvido). A teoria de Landau não descreve bem todos os aspectos das transições de fases contínuas, mas é um bom ponto de partida para entendê-las.

Não há um consenso de quando começou a era moderna dos fenômenos críticos. Alguns consideram que a mesma iniciou com a solução exata de Onsager do modelo de Ising bidimensional [23], enquanto que outros consideram o seu início com o reconhecimento de que os expoentes críticos eram entidades que mereciam grande atenção. Uma importante contribuição neste sentido foi dada através de um trabalho experimental realizado por

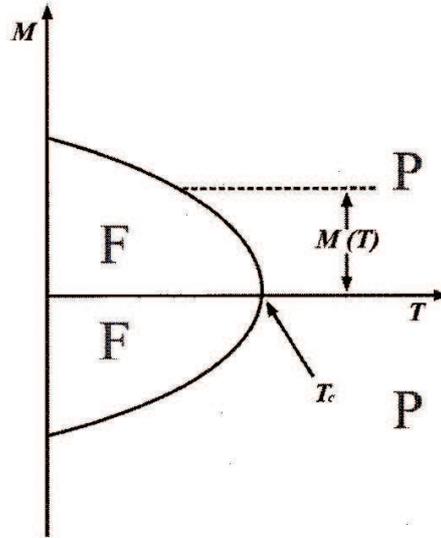


Figura 2.4: Gráfico  $MT$  para sistemas magnéticos, mostrando as fases ferromagnética ( $F$ ) e paramagnética ( $P$ ) (figura retirada da referência [21]).

Guggenheim [24], o que gerou também o conceito de *universalidade*.

Na próxima seção, será introduzida a definição matemática de um expoente crítico. Através das funções resposta termodinâmicas, obtidas a partir das derivadas da energia livre de Gibbs, tem-se relações entre os expoentes críticos dadas na forma de relações de desigualdades. Ainda neste capítulo, discutiremos como Widom [25] desenvolveu uma hipótese de escala que transformou as relações de desigualdades entre os expoentes críticos em relações de igualdades. Através disso, Kadanoff [26] mostrou como aplicar a idéia de escala ao modelo de Ising. E finalmente, a escala de Kadanoff levou Wilson [27] a formular a teoria do grupo de renormalização.

## 2.2 A era moderna

### 2.2.1 Os expoentes críticos

Primeiramente [21, 28–30], é importante introduzir uma variável importante para a definição dos expoentes críticos,

$$\varepsilon = \frac{T - T_C}{T_C}. \quad (2.1)$$

Esta variável mede a distância em temperatura que o sistema se encontra do ponto crítico; além disso, a variável  $\varepsilon$  introduz uma equivalência entre pontos críticos diferentes, pois, o valor de  $T_C$  pode mudar de um sistema para outro de várias ordens de magnitude. A forma mais geral de uma função  $f(\varepsilon)$  que descreve um expoente crítico nas proximidades do ponto crítico é,

$$f(\varepsilon) = A\varepsilon^\lambda(1 + B\varepsilon^y + \dots), \quad (2.2)$$

onde  $y > 0$ . O expoente crítico é geralmente dado pelo termo dominante desta expansão, embora a função possa apresentar correções. Com isso, o expoente crítico é definido como,

$$\lambda = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left[ \frac{\ln(f(\varepsilon))}{\ln(\varepsilon)} \right]. \quad (2.3)$$

Diversas situações são possíveis para a função  $f(\varepsilon)$ , dependendo do valor de  $\lambda$ . Se  $\lambda$  é negativo, a função  $f(\varepsilon)$  diverge no ponto crítico; se  $\lambda$  é positivo, a função vai a zero no ponto crítico. O caso  $\lambda = 0$  pode corresponder a situações distintas, como por exemplo, a dependência em  $\varepsilon$  de uma forma logarítmica ou de uma singularidade do tipo cúspide. Neste último caso, costuma-se introduzir um expoente crítico modificado tal que para o menor inteiro  $j$  onde  $\frac{d^j f(\varepsilon)}{d\varepsilon^j} = f^{(j)}(\varepsilon)$  diverge, tem-se,

$$\lambda' = j + \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left[ \frac{\ln |f^{(j)}(\varepsilon)|}{\ln(\varepsilon)} \right]. \quad (2.4)$$

### Os expoentes críticos para os sistemas *MHT*

As definições dos expoentes críticos para os sistemas magnéticos são análogas àsquelas dos sistemas fluidos. O expoente crítico associado ao parâmetro de ordem é o expoente  $\beta$ , que é definido a partir do comportamento da magnetização nas proximidades do ponto crítico,

$$M_0(T)/M_0(0) \sim (-\varepsilon)^\beta, \quad (2.5)$$

onde  $M_0(T)$  é a magnetização a campo nulo de um ferromagneto idealizado e o símbolo “ $\sim$ ” significa “comporta-se como”.

Os expoentes  $\gamma$  e  $\gamma'$  são associados à suscetibilidade magnética,

$$\chi_T/\chi_T^0 \sim (-\varepsilon)^{-\gamma'} \quad (T < T_C, H = 0), \quad (2.6)$$

$$\chi_T/\chi_T^0 \sim \varepsilon^{-\gamma} \quad (T > T_C, H = 0), \quad (2.7)$$

onde  $\chi_T^0$  é a susceptibilidade magnética de um sistema de momentos magnéticos não interagentes avaliada no ponto crítico.

O expoente  $\delta$  descreve a variação de  $H$  com  $M$  sobre a isoterma crítica ( $T = T_C$ ),

$$H/H_C^0 \sim |M_H(T = T_C)/M_0(T = 0)|^\delta \quad (T = T_C), \quad (2.8)$$

onde  $H_C^0 = k_B T_C / m_0$  e  $m_0$  é o momento magnético por spin.

Os expoentes  $\alpha$  e  $\alpha'$  são associados ao calor específico a campo constante,

$$C_H \sim (-\varepsilon)^{-\alpha'} \quad (T < T_C), \quad (2.9)$$

$$C_H \sim \varepsilon^{-\alpha} \quad (T > T_C). \quad (2.10)$$

Agora, para definir os expoentes  $\nu$ ,  $\nu'$  e  $\eta$ , ligados às correlações do sistema, é necessário lançar mão do conceito da *função de correlação*. A função de correlação  $\Gamma(r, \varepsilon)$  envolvendo spins em dois pontos separados por uma distância  $r = |\vec{r}_i - \vec{r}_j|$  é dada por,

$$\Gamma(r, \varepsilon) = \langle (S_i - \langle S_i \rangle) (S_j - \langle S_j \rangle) \rangle, \quad (2.11)$$

ou seja,

$$\Gamma(r, \varepsilon) = \langle S_i S_j \rangle - \langle S_i \rangle \langle S_j \rangle. \quad (2.12)$$

A função de correlação pode ser interpretada como a medida das flutuações no parâmetro de ordem do sistema nos sítios  $i$  e  $j$ . Uma outra quantidade importante associada à função de correlação é o comprimento de correlação  $\xi$ , que representa uma escala de comprimento em que as propriedades do sistema começam a mudar significativamente. Com isso, os expoentes  $\nu$  e  $\nu'$  podem ser definidos,

$$\xi \sim \xi_0 (-\varepsilon)^{-\nu'} \quad (T < T_C, H = 0), \quad (2.13)$$

$$\xi \sim \xi_0 \varepsilon^{-\nu} \quad (T > T_C, H = 0). \quad (2.14)$$

O comportamento da função de correlação para grandes distâncias é dado por um decaimento exponencial,  $\Gamma(r, \varepsilon) \sim \exp(-\frac{r}{\xi})$ . Porém, exatamente no ponto crítico, o decaimento com a distância  $r$  obedece uma lei de potência,

$$\Gamma(r, \varepsilon) \sim r^{-(d-2+\eta)} \quad (T = T_C, H = 0), \quad (2.15)$$

onde  $d$  é a dimensão do sistema e  $\eta$  é mais um expoente crítico.

Como dito anteriormente, os expoentes críticos obedecem certas relações, na forma de desigualdades, que normalmente são ditadas pelos princípios da termodinâmica. Sabe-se também que os expoentes críticos dependem de poucos parâmetros do sistema, o que explica porque eles variam muito pouco de um sistema para o outro, quando dentro de determinadas categorias de sistemas. Esta propriedade leva ao conceito de classes de universalidade para os expoentes críticos. As grandezas que realmente importam para as definições das classes de universalidade são:

- a dimensionalidade  $d$  do espaço em que o sistema está inserido;
- o número de componentes  $n$  do parâmetro de ordem;
- o alcance das interações microscópicas do sistema.

Como dito anteriormente, o conceito de *universalidade* foi originado quando Guggenheim exibiu a curva de coexistência de oito fluidos diferentes em um gráfico com variáveis reduzidas, onde o ajuste da curva “universal” fornecia o mesmo expoente crítico para o parâmetro de ordem,  $\beta = \frac{1}{3}$  (ver na Figura 2.5). No gráfico, tem-se uma curva  $\rho$  contra  $T$ , onde estas variáveis são escaladas por seus respectivos valores críticos, de tal forma que a curva seja equivalente para as diferentes substâncias. Portanto, uma classe de universalidade é caracterizada por diferentes sistemas que apresentam os mesmos expoentes críticos. Para a classe de universalidade dos sistemas descritos por abordagens teóricas clássicas (por exemplo, a teoria de campo médio), os expoentes críticos são dados por,

$$\beta = \frac{1}{2}, \quad \gamma = \gamma' = 1, \quad \delta = 3 \quad \text{e} \quad \alpha = \alpha' = 0. \quad (2.16)$$

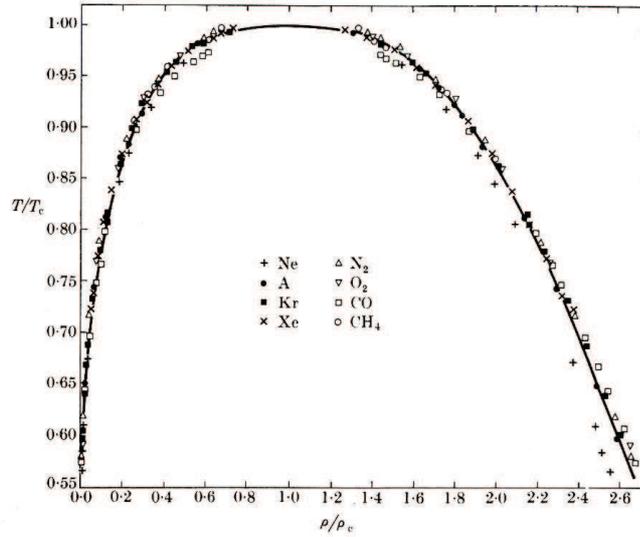


Figura 2.5: Gráfico onde a universalidade foi observada pela primeira vez (figura retirada da referência [21]).

### Desigualdades entre os expoentes críticos

Na obtenção destas desigualdades, o seguinte lema é utilizado freqüentemente: considerando  $f(x) \sim x^\lambda$  e  $g(x) \sim x^\varphi$ , assim como  $f(x) \leq g(x)$ , obtém-se que:

$$\frac{\ln f(x)}{\ln x} \geq \frac{\ln g(x)}{\ln x}, \quad (2.17)$$

para  $x < 1$  e  $\ln x < 0$ . Como essa relação é válida quando  $x \rightarrow 0$ , então,  $\lambda \geq \varphi$ .

Como dito anteriormente, diversas relações de desigualdades entre os expoentes são obtidas através de relações entre as funções resposta termodinâmicas, o que fornece uma

forte base para tais desigualdades. Dentre as mais comuns, pode-se mencionar [21]:

$$\alpha' + 2\beta + \gamma' \geq 2 \quad (\text{Rushbrooke}), \quad (2.18)$$

$$\alpha' + \beta(\delta + 1) \geq 2 \quad (\text{Griffiths}), \quad (2.19)$$

$$d \frac{\delta - 1}{\delta + 1} \geq 2 - \eta \quad (\text{Buckingham-Gunton}) \quad (2.20)$$

$$(2 - \eta) \nu \geq \gamma \quad (\text{Fisher}), \quad (2.21)$$

$$d\nu \geq 2 - \alpha \quad (\text{Josephson}), \quad (2.22)$$

$$\gamma' \geq \beta(\delta - 1) \quad (\text{Widom}), \quad (2.23)$$

onde  $d$  é a dimensionalidade do sistema.

## 2.2.2 A hipótese de escala

Foi visto na seção anterior que os expoentes críticos obedecem a relações de desigualdades, que em sua maioria são baseadas em argumentos termodinâmicos. Entretanto, muitos resultados experimentais indicam que os expoentes críticos obedecem tais relações como igualdades. O primeiro trabalho com o objetivo de dar suporte às igualdades entre os expoentes foi o de Widom, que ficou conhecido como a hipótese de escala de Widom [25]. Este trabalho foi reforçado posteriormente pela teoria do grupo de renormalização. Para definir a hipótese de escala [21, 28–30], é necessário antes introduzir o conceito de funções homogêneas.

### Funções homogêneas

Uma função  $F(\lambda x)$  é homogênea se para todos os valores de  $\lambda$ ,

$$F(\lambda x) = g(\lambda)F(x). \quad (2.24)$$

Para determinar a forma geral da função  $g(\lambda)$ , deve-se notar que

$$F(\lambda\mu x) = g(\lambda)F(\mu x) = g(\lambda)g(\mu)F(x) \implies F(\lambda\mu x) = g(\lambda\mu)F(x), \quad (2.25)$$

ou seja,

$$g(\lambda\mu) = g(\lambda)g(\mu). \quad (2.26)$$

Derivando a equação (2.26) em relação a  $\mu$ , obtém-se,

$$\frac{\partial g(\lambda\mu)}{\partial \mu} = \lambda g'(\lambda\mu) \implies \frac{\partial g(\lambda\mu)}{\partial \mu} = g(\lambda)g'(\mu). \quad (2.27)$$

Considerando  $\mu = 1$  e  $g'(1) = p$ , tem-se

$$\lambda g'(\lambda) = pg(\lambda). \quad (2.28)$$

Integrando a equação (2.28) de 1 até  $\lambda$  e lembrando que  $g(1) = 1$ ,

$$g(\lambda) = \lambda^p \quad (2.29)$$

e assim,

$$F(\lambda x) = \lambda^p F(x). \quad (2.30)$$

Agora, para uma função homogênea de duas variáveis  $f(x, y)$ , deve-se ter,

$$f(\lambda^p x, \lambda^q y) = \lambda f(x, y), \quad (2.31)$$

onde  $p$  e  $q$  são dois parâmetros arbitrários. Como a equação (2.31) é válida para qualquer valor de  $\lambda$ , ela é certamente válida para o valor,  $\lambda = y^{-\frac{1}{q}}$ . Logo,

$$f(x, y) = y^{\frac{1}{q}} f\left(\frac{x}{y^{\frac{1}{q}}}, 1\right). \quad (2.32)$$

Com isso, vê-se que a função homogênea  $f(x, y)$  apresenta um fator multiplicativo da forma  $y^{\frac{1}{q}}$  vezes uma função de  $\frac{x}{y^{\frac{1}{q}}}$ .

### Hipótese de escala de Widom

Na hipótese de escala proposta por Widom, a energia livre de Gibbs, pode ser dividida em duas partes: uma parte regular,  $G_r(T, H)$ , e uma parte singular,  $G_s(\varepsilon, H)$ . Enquanto a parte regular não muda perto do ponto crítico, a parte singular contém o comportamento do sistema na vizinhança do ponto crítico.

Nesta hipótese supõe-se que a parte singular da energia livre,  $G_s(\varepsilon, H)$ , é uma função homogênea de seus parâmetros,

$$G_s(\lambda^p \varepsilon, \lambda^q H) = \lambda G_s(\varepsilon, H), \quad (2.33)$$

onde  $\varepsilon$  é definido na equação (2.1), e é importante lembrar que a relação acima é válida para  $\lambda$  qualquer. A hipótese de escala não especifica os valores de  $p$  e  $q$ , porém a partir desta hipótese é possível escrever todos os expoentes críticos em função deles. Com isso, conhecendo-se dois expoentes críticos, pode-se determinar todos os outros.

### Relações entre os expoentes críticos

Usando que  $M = -\left(\frac{\partial G}{\partial H}\right)_T$ , onde  $M$  é a magnetização, e diferenciando ambos os lados da equação (2.33) em relação a  $H$ , tem-se,

$$\lambda^q M(\lambda^p \varepsilon, \lambda^q H) = \lambda M(\varepsilon, H). \quad (2.34)$$

Existem dois expoentes críticos que descrevem o comportamento da magnetização perto do ponto crítico:  $\beta$  e  $\delta$ . Para calcular  $\beta$ , deve-se tomar  $H = 0$  e  $\varepsilon \rightarrow 0$  na equação (2.34),

$$M(\varepsilon, 0) = \lambda^{q-1} M(\lambda^p \varepsilon, 0). \quad (2.35)$$

Como dito anteriormente, a equação (2.35) é válida para qualquer valor de  $\lambda$  e em particular, para o valor  $\lambda = \left(\frac{-1}{\varepsilon}\right)^{\frac{1}{p}}$ ,

$$M(\varepsilon, 0) = (-\varepsilon)^{\frac{1-q}{p}} M(-1, 0). \quad (2.36)$$

Comparando com a equação (2.5), tem-se:

$$\beta = \frac{1-q}{p}. \quad (2.37)$$

Para calcular o expoente  $\delta$ , faz-se  $\varepsilon = 0$  e  $H \rightarrow 0$  na equação (2.34),

$$M(0, H) = \lambda^{q-1} M(0, \lambda^q H). \quad (2.38)$$

Inserindo o valor  $\lambda = H^{-\frac{1}{q}}$  na equação (2.38), obtém-se,

$$M(0, H) = H^{\frac{1-q}{q}} M(0, 1). \quad (2.39)$$

Comparando com a equação (2.8) chega-se a,

$$\delta = \frac{q}{1-q}. \quad (2.40)$$

Agora, resolvendo-se as equações (2.37) e (2.40) para  $p$  e  $q$ ,

$$p = \frac{1}{\beta(\delta + 1)} \quad \text{e} \quad q = \frac{\delta}{\delta + 1}. \quad (2.41)$$

Pode-se calcular os outros expoentes críticos em função de  $p$  e  $q$ . Para calcular o expoente  $\gamma'$ , usa-se que  $\chi_T = -\left(\frac{\partial^2 G}{\partial H^2}\right)_T$ ; derivando a equação (2.33) duas vezes em relação a  $H$ ,

$$\lambda^{2q} \chi_T(\lambda^p \varepsilon, \lambda^q H) = \lambda \chi_T(\varepsilon, H). \quad (2.42)$$

Considerando  $H = 0$  e escolhendo  $\lambda = (-\varepsilon)^{-\frac{1}{p}}$ , a equação (2.42) resulta em,

$$\chi_T(\varepsilon, 0) = (-\varepsilon)^{-\frac{(2q-1)}{p}} \chi_T(-1, 0). \quad (2.43)$$

Tomando  $\varepsilon \rightarrow 0_-$  e comparando com a equação (2.6),

$$\gamma' = \frac{2q - 1}{p}. \quad (2.44)$$

Substituindo as equações (2.41) na equação (2.44), tem-se a igualdade,

$$\gamma' = \beta(\delta - 1), \quad (2.45)$$

que é conhecida como a *igualdade de Widom*. O expoente  $\alpha'$  é calculado através da relação  $C_H = -T \left(\frac{\partial^2 G}{\partial T^2}\right)_H$ , usando os valores  $\lambda = (-\varepsilon)^{-\frac{1}{p}}$  e  $H = 0$ , após derivar a equação (2.33) duas vezes em relação a  $\varepsilon$ , obtém-se,

$$C_H(\varepsilon, 0) = (-\varepsilon)^{\frac{1-2p}{p}} C_H(1, 0). \quad (2.46)$$

Comparando com a equação (2.9),

$$\alpha' = 2 - \frac{1}{p}. \quad (2.47)$$

Uma outra consequência da hipótese de escala é a igualdade dos expoentes dos dois lados da temperatura crítica. Utilizando-se cálculos similares àqueles desenvolvidos para  $\gamma'$  e  $\alpha'$ , chega-se a,

$$\gamma' = \gamma \quad \text{e} \quad \alpha' = \alpha. \quad (2.48)$$

Com estes resultados é possível obter mais duas igualdades. A igualdade de Griffiths é encontrada combinando a equação (2.47) com a primeira das equações (2.41),

$$\alpha' + \beta(\delta + 1) = 2 \quad \implies \quad \alpha + \beta(\delta + 1) = 2, \quad (2.49)$$

enquanto que a igualdade de Rushbrooke é obtida combinando a equação (2.49) com a equação (2.45),

$$\alpha' + 2\beta + \gamma' = 2 \implies \alpha + 2\beta + \gamma = 2. \quad (2.50)$$

### A escala de Kadanoff

Esta técnica consiste em aplicar a idéia de escala ao modelo de Ising. Considere um hamiltoniano de Ising em uma rede  $d$ -dimensional com interações somente entre os primeiros vizinhos,

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle=1}^{\frac{\Gamma N}{2}} S_i S_j - H \sum_{i=1}^N S_i, \quad (2.51)$$

onde  $N$  é o número de sítios na rede e  $\Gamma$  é o número de primeiros vizinhos de um dado sítio na rede. A idéia consiste em dividir a rede em blocos de tamanho  $Lb \ll \xi$ , onde  $L$  é a distância entre sítios e  $b$  é o fator de escala a ser usado para fazer a transformação da rede. Cada bloco se comportará como um spin na nova rede reescalada. A relação entre a nova variável de spin de bloco e a variável de spin de sítio original é,

$$S_I = \frac{1}{b^y} \sum_{i \in I} S_i, \quad (2.52)$$

onde a soma em  $i$  é feita dentro de cada bloco sobre  $b^d$  spins em cada bloco em um total de  $Nb^{-d}$  blocos. Também,  $y$  é uma constante desconhecida, de tal forma que  $S_I = \pm 1$ .

A transformação de escala procura colocar a nova rede numa forma idêntica à original, porém, com as quantidades reescaladas. Com isso, o novo hamiltoniano resulta em,

$$\mathcal{H}' = -J' \sum_{\langle IJ \rangle=1}^{\frac{\Gamma N b^{-d}}{2}} S_I S_J - H' \sum_{I=1}^{N b^{-d}} S_I. \quad (2.53)$$

Como o hamiltoniano, outras quantidades, como a energia livre de Gibbs, o comprimento de correlação, e o parâmetro  $\varepsilon$  também reescalam. Para a parte singular da energia livre de Gibbs da rede nova tem-se,

$$G(\varepsilon', H') = b^d G(\varepsilon, H). \quad (2.54)$$

Quando o sistema é descrito em termos de blocos, o comprimento de correlação é reduzido e o sistema se distancia do ponto crítico. Logo,

$$\xi'(\varepsilon', H') = b^{-1} \xi(\varepsilon, H). \quad (2.55)$$

Os parâmetros  $\varepsilon$  e  $H$  também se reescalam através das relações,

$$\varepsilon' = \varepsilon b^x \text{ e } H' = H b^y, \quad (2.56)$$

onde como  $y$ ,  $x$  é também uma constante desconhecida. Através disso, a equação (2.54) resulta em,

$$G(\varepsilon, H) = b^{-d} G(\varepsilon b^x, H b^y), \quad (2.57)$$

enquanto que para a equação (2.55) tem-se,

$$\xi(\varepsilon, H) = b \xi(\varepsilon b^x, H b^y). \quad (2.58)$$

Comparando a equação (2.57) com a equação (2.33) tem-se que os valores de  $x$  e  $y$  são dados por,

$$x = pd \text{ e } y = qd. \quad (2.59)$$

Pode-se calcular os expoentes  $\nu$ ,  $\nu'$  e  $\eta$  através das relações para a função e comprimento de correlação. Utilizando a expressão (2.12) da função de correlação para os spins de bloco,

$$\Gamma(r', \varepsilon') = \langle S_I S_J \rangle - \langle S_I \rangle \langle S_J \rangle \quad (2.60)$$

e a equação (2.52), a função de correlação se reescala como,

$$\Gamma(r', \varepsilon') = \frac{b^{2d} \Gamma(r, \varepsilon)}{b^{2y}}. \quad (2.61)$$

A distância  $r'$  entre dois diferentes blocos na rede reescalada é relacionada com a distância  $r$  entre dois sítios diferentes na rede original através da relação,

$$r' = b^{-1} r, \quad (2.62)$$

e com isso, a equação (2.61) resulta em,

$$\Gamma(r, \varepsilon) = b^{2(y-d)} \Gamma(b^{-1} r, \varepsilon b^x). \quad (2.63)$$

Considerando que a equação (2.63) é válida para qualquer valor de  $b$ , a função de correlação é uma função homogênea generalizada de seus dois argumentos,  $r$  e  $\varepsilon$ .

Agora, é possível calcular novas relações de igualdade entre os expoentes críticos. Primeiramente, toma-se o valor  $H = 0$  e  $b = \varepsilon^{\frac{-1}{x}}$  nas equações (2.57) e (2.58) para obter,

$$\xi(\varepsilon, 0) = \varepsilon^{\frac{-1}{x}} \xi(1, 0), \quad (2.64)$$

$$G(\varepsilon, 0) = \varepsilon^{\frac{d}{x}} G(1, 0). \quad (2.65)$$

Comparando a equação (2.64) com (2.14) tem-se,

$$\nu = \frac{1}{x}. \quad (2.66)$$

Na obtenção da equação (2.66) considerou-se  $\varepsilon \rightarrow 0_+$ . Repetindo este mesmo procedimento, só que agora tomando  $\varepsilon \rightarrow 0_-$ ,

$$\nu' = \nu. \quad (2.67)$$

Derivando a equação (2.65) duas vezes em relação à temperatura, verifica-se que o expoente  $\frac{d}{x}$  está relacionado com o expoente do calor específico; utilizando as equações (2.47), (2.59) e (2.66), chega-se a

$$d\nu = 2 - \alpha. \quad (2.68)$$

Considerando  $b = r$  na equação (2.63),

$$\Gamma(r, \varepsilon) = r^{2(y-d)} \Gamma(\varepsilon r^x, 1). \quad (2.69)$$

Tomando  $\varepsilon = 0$  na equação (2.69) e comparando-a à equação (2.15),

$$-(d - 2 + \eta) = 2(y - d) \implies \eta = 2 + 2y - d \implies \eta = 2 - d \left( \frac{\delta - 1}{\delta + 1} \right), \quad (2.70)$$

onde empregou-se as segundas das equações (2.59) e (2.41). Para finalizar, pode-se utilizar que

$$d - 2 + \eta = 2(d - y) = 2d(1 - q) = \frac{2d}{\delta + 1} = \frac{2d\beta}{2 - \alpha} = \frac{2\beta}{\nu}, \quad (2.71)$$

onde utilizou-se primeiramente a segunda das equações (2.41) e depois as equações (2.49) e (2.68) respectivamente. Agora, utilizando a expressão (2.50) e mais uma vez a expressão (2.68), obtém-se

$$(2 - \eta)\nu = \gamma. \quad (2.72)$$

Com isso, verifica-se que as desigualdades de Josephson, de Buckingham-Gunton e de Fisher, mencionadas anteriormente, tornam-se igualdades.

### 2.2.3 O grupo de renormalização

Como dito anteriormente, a hipótese de escala não possui um embasamento matematicamente sólido que permita calcular as relações de igualdades entre os expoentes críticos. Este problema foi contornado pelo grupo de renormalização [28–30], formulado por Wilson, que além de fornecer uma base matemática sólida para a hipótese de escala, é capaz de calcular os valores dos parâmetros  $p$  e  $q$  da energia livre de Gibbs.

A seguir, será discutido o procedimento de Wilson para um sistema de spins de Ising arbitrário; depois, como ilustrações, o procedimento será aplicado às redes unidimensional e bidimensional.

#### Cálculo dos expoentes críticos pelo grupo de renormalização

Considere um sistema de spins de Ising ( $S_i = \pm 1$ ) localizados nos sítios de uma rede regular; a função de partição desta sistema é dada por,

$$Z(\vec{K}, N) = \sum_{\{S_i\}} \exp[-\beta\mathcal{H}(\vec{K}, N, \{S_i\})], \quad (2.73)$$

com o hamiltoniano,

$$\beta\mathcal{H}(\vec{K}, N, \{S_i\}) = -K_2 \sum_i S_i - K_1 \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j \quad (2.74)$$

Aqui,  $\vec{K} = (K_1, K_2)$  é um vetor, que contém as constantes de acoplamento (divididas pela temperatura) e o somatório  $\sum_{\langle ij \rangle}$  significa que apenas os pares de spins primeiros vizinhos são somados. No modelo em questão, tem-se que  $K_2 = \frac{H}{k_B T}$  e  $K_1 = \frac{J}{k_B T}$  onde  $H$  é o campo magnético,  $J$  é a energia de interação entre os spins,  $k_B$  é a constante de Boltzmann e  $T$  é a temperatura.

O procedimento do grupo de renormalização consiste em transformar uma rede de sítios com constantes de acoplamento contidas no vetor  $\vec{K}$ , em uma outra rede idêntica de blocos com constantes de acoplamento contidas no vetor  $\vec{K}'$ . Assim, a função de

partição, a energia livre de Gibbs e o comprimento de correlação resultam em,

$$Z(\vec{K}, N) = Z(\vec{K}', Nb^{-d}), \quad (2.75)$$

$$G(\vec{K}, N) = b^{-d}G(\vec{K}', Nb^{-d}), \quad (2.76)$$

$$\xi' = b^{-1}\xi. \quad (2.77)$$

Logo, cada componente do vetor  $\vec{K}'$  será função das componentes do vetor  $\vec{K}$ , através da relação,

$$\vec{K}' = \mathbf{T}(\vec{K}). \quad (2.78)$$

As transformações são feitas aumentando-se o tamanho de cada bloco de tal forma que o comprimento de correlação é reduzido em cada transformação. Após  $n$  transformações, tem-se,

$$\vec{K}'_n = \mathbf{T}(\vec{K}'_{(n-1)}). \quad (2.79)$$

Os pontos fixos são dados para o valor de  $\vec{K}^*$ , que depois de atingido, não muda de valor em transformações posteriores. A condição para o ponto fixo é dada por,

$$\vec{K}^* = \mathbf{T}(\vec{K}^*). \quad (2.80)$$

A sequência de transformações  $\mathbf{T}$  é denominada de *grupo de renormalização*, embora matematicamente, esta seja um semi-grupo, pois, não existe a transformação inversa.

Para exemplificar, considere o vetor bi-dimensional  $\vec{K} = (K_1, K_2)$ . Para determinar o ponto fixo  $\vec{K}^* = (K_1^*, K_2^*)$ , da transformação (2.78), deve-se linearizar a equação (2.79) em torno de  $\vec{K}^*$ . Definindo  $\delta\vec{K}' = (\vec{K}' - \vec{K}^*)$  e  $\delta\vec{K} = (\vec{K} - \vec{K}^*)$  pequenos, tem-se,

$$\delta\vec{K}' = \mathbb{R}\delta\vec{K}, \quad (2.81)$$

onde,

$$\mathbb{R} = \begin{pmatrix} \frac{\partial K'_1}{\partial K_1} & \frac{\partial K'_1}{\partial K_2} \\ \frac{\partial K'_2}{\partial K_1} & \frac{\partial K'_2}{\partial K_2} \end{pmatrix}_{\substack{K_1=K_1^* \\ K_2=K_2^*}}. \quad (2.82)$$

É necessário encontrar os autovalores e autovetores da matriz  $\mathbb{R}$ . A equação de autovetores pode ser escrita como  $\delta\vec{u}' = \Lambda\delta\vec{u}$ , onde  $\Lambda$  é a matriz,

$$\Lambda = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix}. \quad (2.83)$$

Os autovalores  $\lambda_1$  e  $\lambda_2$  da matriz  $\mathbb{R}$  determinam o comportamento crítico do sistema. Normalmente, os autovalores  $\lambda_i > 1$  são denominados relevantes e aqueles  $\lambda_i < 1$ , irrelevantes. Os autovetores associados com  $\lambda_i > 1$  serão identificados com as quantidades físicas<sup>1</sup> que medem a distância do sistema com relação ao ponto crítico.

Em geral, a parte singular da energia livre de Gibbs é escrita em termos dos autovalores  $\lambda_i$  e autovetores  $\delta \vec{u}$ ,

$$G_S(\delta u_1, \delta u_2, \dots) = b^{-d} G_S(\lambda_1 \delta u_1, \lambda_2 \delta u_2, \dots). \quad (2.84)$$

No exemplo em questão, identifica-se  $\delta u_1 = \varepsilon$  e  $\delta u_2 = H$ . Supondo que os autovalores  $\lambda_1$  e  $\lambda_2$  são maiores do que um e comparando a equação (2.84) com a equação (2.33), tem-se

$$\lambda = b^d, \quad (2.85)$$

$$\lambda_1 = (b^d)^p \implies p = \frac{\ln \lambda_1}{d \ln b}, \quad (2.86)$$

$$\lambda_2 = (b^d)^q \implies q = \frac{\ln \lambda_2}{d \ln b}. \quad (2.87)$$

Logo, vê-se que é possível calcular os expoentes críticos através dos autovalores da matriz  $\mathbb{R}$ .

## Aplicação do grupo de renormalização nas redes de Ising unidimensional e bidimensional

**Caso unidimensional [31]:** O hamiltoniano do sistema é dado por,

$$\mathcal{H} = -J \sum_{i=1}^N S_i S_{i+1} - \frac{H}{2} \sum_{i=1}^N (S_i + S_{i+1}), \quad (2.88)$$

onde  $S_i = \pm 1$ . Pensando a rede como uma cadeia de spins fechada, ou seja,  $S_{N+1} = S_1$  a função de partição do sistema torna-se,

$$Z(K_1, K_2) = \sum_{\{S_i\}=\pm 1} \exp \left\{ \sum_{i=1}^N \left[ K_0 + K_1 S_i S_{i+1} + \frac{K_2}{2} (S_i + S_{i+1}) \right] \right\}, \quad (2.89)$$

onde  $K_1 = \frac{J}{k_B T}$  e  $K_2 = \frac{H}{k_B T}$ . A razão de se considerar a constante aditiva arbitrária  $K_0$  se tornará clara depois.

---

<sup>1</sup>Por exemplo  $\varepsilon$  ou  $H$ .

Como visto na teoria do grupo de renormalização, para se obter a rede normalizada, é necessário introduzir os blocos de spins. Porém, é útil utilizar um procedimento similar conhecido como *dizimação*. A dizimação consiste em reduzir o número de graus de liberdade da rede através de um traço parcial sobre parte dos spins da rede, neste caso, será efetuada esta operação sobre a metade dos spins da rede (supondo a mesma formada por  $N$  sítios, onde  $N$  é par). Com isso, fazendo uma mudança de variável  $i = 2j - 1$  de tal maneira a preparar a função de partição para efetuar a soma sobre os spins pares ( $S_2, S_4, S_6, \dots$ ), tem-se

$$Z(K_1, K_2) = \sum_{\{S_i\}=\pm 1} \prod_{i=1}^N \exp \left[ K_0 + K_1 S_i S_{i+1} + \frac{K_2}{2} (S_i + S_{i+1}) \right] \implies \quad (2.90)$$

$$\begin{aligned} Z(K_1, K_2) &= \sum_{\{S_{2j-1}\}=\pm 1} \sum_{\{S_{2j}\}=\pm 1} \prod_{j=1}^{\frac{N}{2}} \exp [2K_0 + K_1 (S_{2j-1} S_{2j} + S_{2j} S_{2j+1})] \\ &\times \exp \left[ \frac{K_2}{2} (S_{2j-1} + 2S_{2j} + S_{2j+1}) \right] \end{aligned} \quad (2.91)$$

Efetuando-se uma soma sobre  $S_{2j}$ , tem-se

$$\begin{aligned} Z(K_1, K_2) &= \sum_{\{S_{2j-1}\}=\pm 1} \prod_{j=1}^{\frac{N}{2}} \{2 \exp(2K_0) \cosh [K_1 (S_{2j-1} + S_{2j+1}) + K_2]\} \\ &\times \left\{ \exp \left[ \frac{K_2}{2} (S_{2j-1} + S_{2j+1}) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (2.92)$$

Denotando  $S_{2j-1}$  por  $\sigma_j$ ,

$$\begin{aligned} Z(K_1, K_2) &= \sum_{\{\sigma_j\}=\pm 1} \prod_{j=1}^{\frac{N}{2}} \{2 \exp(2K_0) \cosh [K_1 (\sigma_j + \sigma_{j+1}) + K_2]\} \\ &\times \left\{ \exp \left[ \frac{K_2}{2} (\sigma_j + \sigma_{j+1}) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (2.93)$$

Segundo a teoria do grupo de renormalização, a função de partição da rede transformada deve ser igual à função de partição da rede original. Assim, a função de partição (2.93) deve ser colocada numa forma similar à função de partição (2.89),

$$Z(K_1, K_2) = \sum_{\{\sigma_j\}=\pm 1} \prod_{j=1}^{\frac{N}{2}} \left\{ \exp \left[ K'_0 + K'_1 \sigma_j \sigma_{j+1} + \frac{K'_2}{2} (\sigma_j + \sigma_{j+1}) \right] \right\}. \quad (2.94)$$

Esta condição requer, para todas as escolhas possíveis de  $\sigma_j$  e  $\sigma_{j+1}$ ,

$$\begin{aligned} & 2 \exp(2K_0) \cosh [K_1(\sigma_j + \sigma_{j+1}) + K_2] \exp \left[ \frac{K_2}{2}(\sigma_j + \sigma_{j+1}) \right] \\ &= \exp \left[ K'_0 + K'_1 \sigma_j \sigma_{j+1} + \frac{K'_2}{2}(\sigma_j + \sigma_{j+1}) \right], \end{aligned} \quad (2.95)$$

onde as escolhas possíveis são dadas por:  $\sigma_j = \sigma_{j+1} = 1$ ,  $\sigma_j = \sigma_{j+1} = -1$  e  $\sigma_j = -\sigma_{j+1} = \pm 1$ . Logo, tem-se um sistema de três equações e três incógnitas,

$$\exp(K'_0 + K'_1 + K'_2) = 2 \exp(2K_0 + K_2) \cosh(2K_1 + K_2), \quad (2.96)$$

$$\exp(K'_0 + K'_1 - K'_2) = 2 \exp(2K_0 - K_2) \cosh(2K_1 - K_2), \quad (2.97)$$

$$\exp(K'_0 - K'_1) = 2 \exp(2K_0) \cosh(K_2). \quad (2.98)$$

As soluções deste sistema de equações são dadas por,

$$K'_0 = \ln 2 + 2K_0 + \frac{1}{4} \ln [\cosh(2K_1 + K_2) \cosh(2K_1 - K_2) \cosh^2(K_2)], \quad (2.99)$$

$$K'_1 = \frac{1}{4} \ln \left[ \frac{\cosh(2K_1 + K_2) \cosh(2K_1 - K_2)}{\cosh^2(K_2)} \right], \quad (2.100)$$

$$K'_2 = K_2 + \frac{1}{2} \ln \left[ \frac{\cosh(2K_1 + K_2)}{\cosh(2K_1 - K_2)} \right]. \quad (2.101)$$

Considerando  $H = K_2 = 0$ , existe uma única relação de recorrência para o termo de interação entre os spins,

$$K' = \frac{1}{2} \ln [\cosh(2K)], \quad (2.102)$$

onde se fez as modificações:  $K_1 \rightarrow K$  e  $K'_1 \rightarrow K'$ . Os pontos fixos ( $K' = K = K^*$ ) da relação de recorrência são dados para  $K^* = 0$  ( $T = \infty$ ) e  $K^* = \infty$  ( $T = 0$ ). Tomando um  $K$  inicial maior do que zero e aplicando-se sucessivamente a relação de recorrência, o sistema flui para o ponto fixo trivial  $K^* = 0$ . Como para todo  $K \neq 0$  o sistema flui para  $K = 0$ , conclui-se que todo ponto  $K > 0$  está na mesma fase; isto não é válido para  $T = 0$ . Assim, vê-se que o sistema não exibe uma mudança de fases para  $T > 0$ .

**Caso bidimensional [31, 32]:** Aqui, considerar-se-á o sistema na ausência de um campo e com isso, o hamiltoniano é dado por,

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j, \quad (2.103)$$

onde  $S_i = \pm 1$  e  $\sum_{\langle ij \rangle}$  indica uma soma entre os pares de spins primeiros vizinhos em uma rede quadrada. A função de partição será dada por,

$$Z(N, K) = \sum_{\{S_i\}} \exp \left( K \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j \right), \quad (2.104)$$

onde  $K = \frac{J}{k_B T}$ .

Agora, efetuando o processo de dizimação na rede, tem-se para um sítio em particular (onde se localiza um spin  $S_0$ , com quatro vizinhos mais próximos,  $S_1, S_2, S_3$  e  $S_4$ ),

$$\sum_{S_0=\pm 1} \exp[K S_0(S_1 + S_2 + S_3 + S_4)] = 2 \cosh[K(S_1 + S_2 + S_3 + S_4)]. \quad (2.105)$$

Análogo ao caso unidimensional, deve-se colocar a função de partição da rede renormalizada na mesma forma da função de partição da rede original. Essa condição é dada pela igualdade,

$$2 \cosh[K(S_1 + S_2 + S_3 + S_4)] = \exp \left[ A + \frac{B}{2}(S_1 S_2 + S_1 S_3 + S_2 S_4 + S_3 S_4) \right] \\ \times \exp [C(S_1 S_4 + S_2 S_3) + D S_1 S_2 S_3 S_4] \quad (2.106)$$

O sistema de equações será obtido pelas combinações de estados dos spins envolvidos na relação acima,

$$\begin{aligned} S_1 = S_2 = S_3 = S_4, \\ S_1 = S_2 = S_3 = -S_4, \\ S_1 = S_2 = -S_3 = -S_4, \\ S_1 = -S_2 = -S_3 = S_4. \end{aligned} \quad (2.107)$$

O sistema de equações gerado é

$$\begin{aligned} 2 \cosh 4K &= \exp(A + 2B + 2C + D), \\ 2 \cosh 2K &= \exp(A - D), \\ 2 &= \exp(A - 2C + D), \\ 2 &= \exp(A - 2B + 2C + D), \end{aligned} \quad (2.108)$$

com a solução,

$$\begin{aligned} A &= \ln 2 + \frac{1}{2} \ln \cosh 2K + \frac{1}{8} \ln \cosh 4K, \\ B &= \frac{1}{4} \ln \cosh 4K, \\ C &= \frac{1}{8} \ln \cosh 4K, \\ D &= \frac{1}{8} \ln \cosh 4K - \frac{1}{2} \ln \cosh 2K. \end{aligned} \quad (2.109)$$

Assim, a função de partição do sistema resulta em

$$Z(N, K) = \sum_{\{\sigma_j\}} \exp \left( \frac{NA}{2} + B \sum_{\langle jk \rangle} \sigma_j \sigma_k + C \sum_{\langle\langle jk \rangle\rangle} \sigma_j \sigma_k + D \sum_{[j,k,l,m]} \sigma_j \sigma_k \sigma_l \sigma_m \right), \quad (2.110)$$

onde  $\{\sigma_j\}$  representam spins de Ising na rede após o processo de dizimação,  $\sum_{\langle\langle jk \rangle\rangle}$  uma soma sobre spins segundos vizinhos e  $\sum_{[j,k,l,m]}$  uma soma sobre grupos de quatro spins na rede renormalizada. Verifica-se, então, o surgimento de novas interações entre os spins, como exibidos nas somas entre spins segundos vizinhos e entre quatro spins. Continuando o processo com mais transformações, termos mais complicados aparecem e nesse caso, diz-se haver uma *proliferação de interações*.

Uma maneira para tratar este problema consiste em truncar as interações. Considerando apenas as interações entre os primeiros e os segundos vizinhos, no regime de altas temperaturas (para  $K$  pequenos), tem-se,

$$K'_1 \approx 2K^2, \quad (2.111)$$

$$K'_2 \approx K^2, \quad (2.112)$$

onde definiu-se,

$$K'_1 = B, \quad K'_2 = C \quad \text{e} \quad D = 0. \quad (2.113)$$

Como a função de partição renormalizada apresenta interação entre segundos vizinhos, seria importante introduzir desde o início dos cálculos um termo de segundos vizinhos. Em altas temperaturas, isto corresponde a adicionar um termo  $K_2$  na equação (2.111); fazendo  $K = K_1$  nas equações (2.111) e (2.112), obtém-se,

$$K'_1 = 2K_1^2 + K_2 \quad \text{e} \quad (2.114)$$

$$K'_2 = K_1^2. \quad (2.115)$$

O sistema de equações acima fornece um ponto fixo não trivial dado por,

$$K_1^* = \frac{1}{3} \quad \text{e} \quad K_2^* = \frac{1}{9}. \quad (2.116)$$

Linearizando as equações em torno do ponto fixo, tem-se,

$$\mathbb{R} = \begin{pmatrix} \frac{4}{3} & 1 \\ \frac{2}{3} & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.117)$$

cujos autovalores são dados por,

$$\lambda_1 = \frac{2 + \sqrt{10}}{3} \quad \text{e} \quad \lambda_2 = \frac{2 - \sqrt{10}}{3}, \quad (2.118)$$

ou seja,  $\lambda_1 > 1$  e  $|\lambda_2| < 1$ .

O autovalor  $\lambda_1$  é então relevante, enquanto que  $\lambda_2$  é irrelevante. Como resultado da transformação de escala do grupo de renormalização acima, chega-se a,

$$\nu = \frac{\ln b}{\ln \lambda_1}, \quad (2.119)$$

onde  $b = \sqrt{2}$ . Com isto, obtém-se  $\nu = 0.64$ , o valor exato para este expoente é  $\nu = 1$ . Assim, a aproximação acima fornece uma estimativa ruim para o expoente crítico  $\nu$ ; entretanto, outras abordagens de grupo de renormalização podem fornecer estimativas bem melhores para este expoente. Na próxima seção, será introduzido o conceito de redes hierárquicas, nas quais, o procedimento do grupo de renormalização é exato para sistemas de spins.

## 2.3 Redes hierárquicas

Redes hierárquicas [33–35] são geradas de uma maneira iterativa começando normalmente por dois sítios unidos por uma ligação, onde se substitui a ligação por uma célula básica e o processo é repetido  $n$  vezes ( $n$  podendo ser grande) através da substituição de cada ligação pela célula básica. Diferente das redes de Bravais, as redes hierárquicas são, em geral, altamente inhomogêneas e não apresentam invariância translacional. As redes hierárquicas podem mostrar uma grande variedade de transições de fase, embora também apresentem aspectos não usuais. Muitas aproximações de dimensão em redes regulares são exatas em redes hierárquicas.

Exemplos de redes hierárquicas são mostradas na figura 2.6. Na figura está mostrado exemplos de processos de construção das redes hierárquicas, que pode ser feito de duas maneiras. A primeira consiste de no primeiro passo substituir a ligação entre os sítios externos, ou terminais, da rede (aqui representados pelo círculos abertos) pela célula básica da rede e depois nos passos seguintes substituir cada ligação pela célula básica da rede (isto é chamado de iteração). A segunda maneira consiste em considerar que cada ligação tem

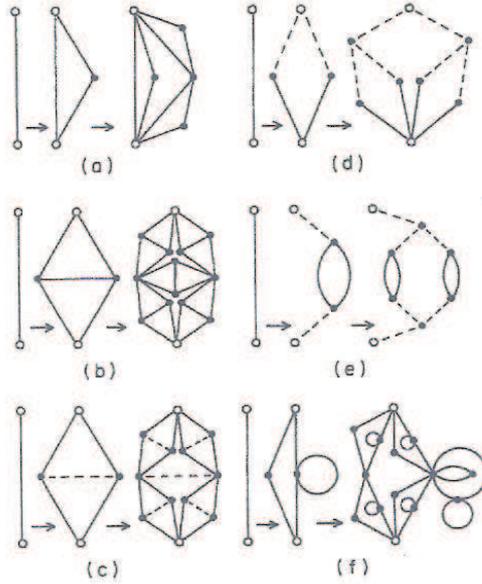


Figura 2.6: Exemplos de gerações de redes hierárquicas (figura retirada da referência [36]).

uma estrutura interna dada pela própria célula e nos passos seguintes considerar que cada ligação tenha uma estrutura interna dada pela própria rede. É interessante notar na figura 2.6 que somente nas ligações em linha cheia é que se faz a transformação, enquanto que nas linhas tracejadas não há a transformação. Na figura 2.6, o processo de transformação representado é chamado de *decoreação* enquanto que o processo de dizimação, que é o utilizado no grupo de renormalização, será o inverso, onde cada célula será transformada em uma ligação.

Agora, dois parâmetros úteis em redes hierárquicas serão introduzidos. O primeiro é o *número de agregação*  $g$  e o segundo é o *corte mínimo*  $q$ . O número de agregação é o número de ligações na célula básica e o corte mínimo é o número mínimo de ligações que devem ser cortadas na célula básica para separar os sítios terminais. Um outro parâmetro é a mudança de escala associada ao passo de renormalização,  $b$ , que é a distância em ligações entre os sítios terminais da célula básica. A  $n$ -ésima hierarquia da rede será associada com um comprimento  $b^n$  no  $n$ -ésimo passo de decoração. Como exemplo, tem-se que para redes de Migdal-Kadanoff (redes em que os spins de uma linha não se ligam com spins de uma outra linha na rede e que um caso particular será discutido na próxima seção) que

$g = MA$  e  $q = M$ , onde  $M$  é o número de linhas na célula básica e  $A$  é o número de vértices na célula básica [33–35].

Com esses parâmetros em mãos, agora pode-se calcular grandezas importantes para o comportamento crítico da rede, dentre as quais têm-se a dimensão fractal  $D$  e a conectividade  $Q$ , que são definidas como o número de ligações e o corte mínimo na rede crescem como potências de  $b^n$ , respectivamente. Em redes regulares, tem-se que  $D = 1 + Q$  (onde  $D = d$  a dimensão euclidiana) que mantém-se para as redes de Migdal-Kadanoff, porém, para outras redes hierárquicas, em geral,  $D > 1 + Q$ . As expressões para estas grandezas são dadas por,

$$D = \frac{\ln g}{\ln b} \quad \text{e} \quad Q = \frac{\ln q}{\ln b}. \quad (2.120)$$

Foi proposto que estas grandezas descrevessem a universalidade das propriedades das redes hierárquicas perto do ponto crítico [33, 37], ou seja, que redes com os mesmos valores de  $D$  e  $Q$  apresentassem os mesmos expoentes. Porém, Hu [38] mostrou que os fenômenos críticos nas redes hierárquicas dependem muito mais da estrutura detalhada da rede. Como exemplo, tem-se as duas redes mostradas na figura 2.7, as quais, apesar de

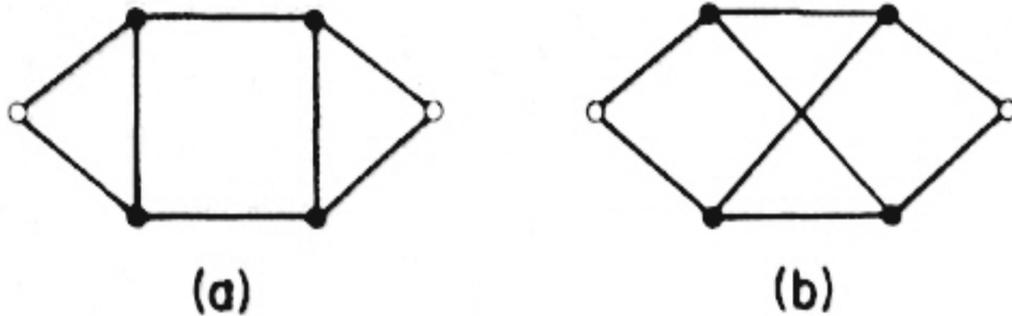


Figura 2.7: Duas redes hierárquicas com os mesmos  $D$ ,  $Q$  e  $g$ ,  $q$ ,  $b$  (figura retirada da referência [38]).

possuírem os mesmos valores dos expoentes  $D$  e  $Q$  e dos parâmetros  $g$ ,  $q$ ,  $b$ , apresentam os expoentes críticos diferentes. Com isso, Hu argumentou que existe uma falta de evidência conclusiva teórica ou experimental de que a universalidade se aplica nestes casos, e mesmo se provada deve-se manter em uma maneira muito restrita.

### 2.3.1 Aplicação do grupo de renormalização à rede hierárquica do tipo diamante

Aqui, como exemplo será considerada a aplicação do grupo de renormalização [39] à rede hierárquica da família de Migdal-Kadanoff, do tipo diamante cujo resultado é exato.

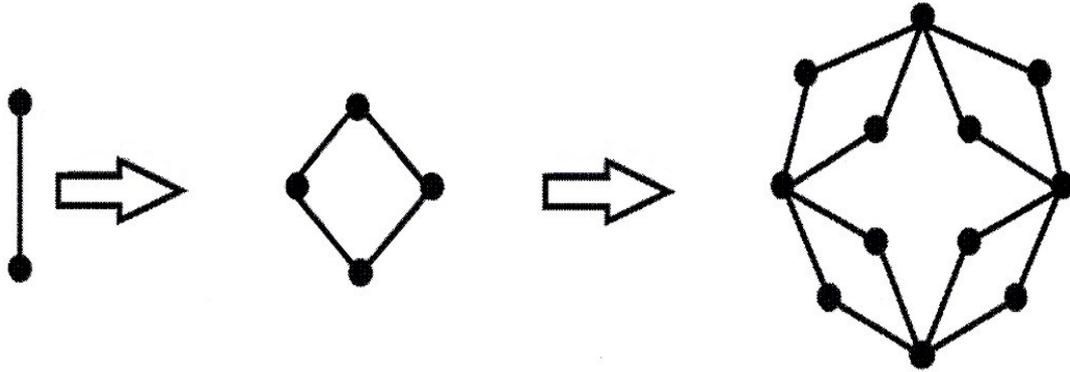


Figura 2.8: Rede hierárquica diamante, pertencente à família de redes hierárquicas do tipo Migdal-Kadanoff, apresentando dimensão fractal  $D = 2$  (figura retirada da referência [39]).

Na figura 2.8, são mostrados a cela unitária e o procedimento de geração da rede até o segundo passo  $n = 2$ . No passo  $n$  da decoração haverá  $4^n$  ligações conectando  $\frac{2(2+4^n)}{3}$  spins. Cada um desses spins será do tipo Ising, ou seja,  $S_i = \pm 1$ .

Rotulando as ligações da hierarquia mais alta da rede por  $l$  ( $l = 1, 2, \dots, N$ ) e definindo  $i(l)$  e  $j(l)$  como os sítios das partes superior e inferior da ligação  $l$ , respectivamente, o hamiltoniano do sistema será dado por,

$$\mathcal{H} = -J \sum_{l=1}^N S_{i(l)} S_{j(l)} - H \sum_i S_i. \quad (2.121)$$

A função de partição será,

$$Z = \sum_{\sigma_i = \pm 1} \left( \prod_{l=1}^N \Theta^{B(l)} \right) \left( \prod_i \Gamma^{S_i} \right), \quad (2.122)$$

onde para simplificar a notação, fez-se,  $K_1 = \frac{J}{k_B T}$ ,  $K_2 = \frac{H}{k_B T}$ ,  $\Theta = e^{K_1}$ ,  $\Gamma = e^{K_2}$  e  $B(l) = S_{i(l)}S_{j(l)}$ , com  $B(l)$  assumindo os valores  $\pm 1$ .

Efetuada a dizimação dos spins internos das células da rede no último passo de decimação, como na figura 2.9 (onde estão indicadas as ligações) para ser obter as relações de recorrência do grupo de renormalização, tem-se,

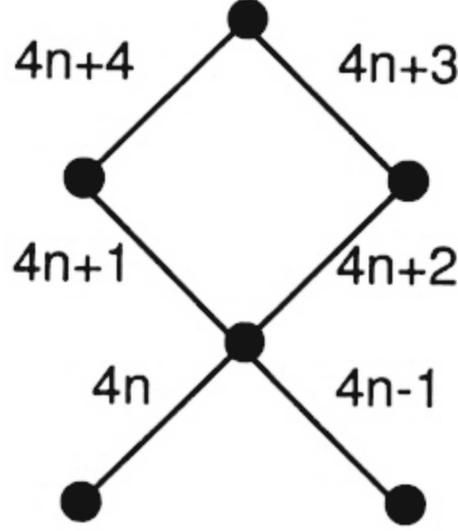


Figura 2.9: Uma pequena parte da rede após  $n$  passos do grupo de renormalização. Aqui, estão rotuladas as ligações para a relação de recorrência (figura retirada da referência [39]).

$$Z = \sum_{S_{i(4n)}=\pm 1} \left[ \prod_{n=1}^{\frac{N}{4}} A_n(S_{i(4n)}S_{i(4n+4)}) \right] \left( \prod_{i'} \Gamma^{S_{i'}} \right), \quad (2.123)$$

onde  $i'$  indica os spins remanescentes e

$$A_n = \sum_{S_{i(4n+1)}=\pm 1, S_{i(4n+2)}=\pm 1} \Theta^{B(4n+1)} \Theta^{B(4n+2)} \Theta^{B(4n+3)} \Theta^{B(4n+4)} \Gamma^{S_{i(4n+1)}} \Gamma^{S_{i(4n+2)}}. \quad (2.124)$$

As possibilidades para  $A_n$  são

$$\begin{aligned} A(1, 1) &= \left( \Theta^2 \Gamma + \frac{1}{\Theta^2 \Gamma} \right)^2 = 4 \cosh^2(2K_1 + K_2), \\ A(-1, 1) &= A(1, -1) = \left( \Gamma + \frac{1}{\Gamma} \right)^2 = 4 \cosh^2(K_2), \\ A(-1, -1) &= \left( \frac{\Theta^2}{\Gamma} + \frac{\Gamma}{\Theta^2} \right)^2 = 4 \cosh^2(2K_1 - K_2). \end{aligned} \quad (2.125)$$

Como feito anteriormente, a função de partição da rede renormalizada deve ficar igual à função de partição da rede original,

$$Z = \sum_{\sigma_i = \pm 1} \left( \prod_{n=1}^{\frac{N}{4}} C \bar{\Theta}^{B(n)} \right) \left( \prod_i \bar{\Gamma}^{\sigma_i} \right), \quad (2.126)$$

onde  $C$  é uma constante a ser determinada e  $\bar{\Theta}$ ,  $\bar{\Gamma}$  são as novas constantes de acoplamento. Assim, o seguinte sistema de equações é gerado,

$$C \bar{\Theta} \bar{\Gamma} = A(1, 1) \Gamma,$$

$$\frac{C}{\bar{\Theta}} = A(1, -1), \quad (2.127)$$

$$\frac{C \bar{\Theta}}{\bar{\Gamma}} = \frac{A(-1, -1)}{\Gamma}.$$

A solução desse sistema de equações é

$$C = [A(1, 1)A(1, -1)^2 A(-1, -1)]^{\frac{1}{4}},$$

$$\bar{\Theta} = \left[ \frac{A(1, 1)A(-1, -1)}{A(1, -1)^2} \right]^{\frac{1}{4}}, \quad (2.128)$$

$$\bar{\Gamma} = \left[ \frac{A(1, 1)}{A(-1, -1)} \right]^{\frac{1}{2}} \Gamma.$$

Definindo as novas quantidades  $f$ ,  $K'_1$  e  $K'_2$  como  $C = e^{4f}$ ,  $K'_1 = \ln \bar{\Theta}$  e  $K'_2 = \ln \bar{\Gamma}$  e também as expressões para os  $A$ 's nas equações (2.125), tem-se uma relação de recorrência para a função de partição,

$$Z(N, K_1, K_2) = e^{Nf(K_1, K_2)} Z\left(\frac{N}{4}, K'_1, K'_2\right), \quad (2.129)$$

onde

$$f = \frac{1}{8} \ln [16 \cosh(2K_1 + K_2) \cosh(2K_1 - K_2) \cosh^2(K_2)],$$

$$K'_1 = \frac{1}{2} \ln \left[ \frac{\cosh(2K_1 + K_2) \cosh(2K_1 - K_2)}{\cosh^2(K_2)} \right], \quad (2.130)$$

$$K'_2 = K_2 + \ln \left[ \frac{\cosh(2K_1 + K_2)}{\cosh(2K_1 - K_2)} \right].$$

O ponto fixo não trivial pode ser calculado numericamente, sendo dado por  $K_1 = K_1^* \cong 0,690938$  e  $K_2 = 0$ . Para determinar os expoentes críticos é necessário achar os autovalores da matriz (2.82),

$$\mathbb{R} = \begin{pmatrix} \frac{\partial K'_1}{\partial K_1} & \frac{\partial K'_1}{\partial K_2} \\ \frac{\partial K'_2}{\partial K_1} & \frac{\partial K'_2}{\partial K_2} \end{pmatrix}_{\substack{K_1=0,690938 \\ K_2=0}}, \quad (2.131)$$

que aqui é dada por,

$$\mathbb{R} = \begin{pmatrix} 1.67857 & 0 \\ 0 & 2.67857 \end{pmatrix}. \quad (2.132)$$

O expoente  $\nu$ , será dado pela equação,

$$\nu = \frac{\ln b}{\ln \lambda_1}, \quad (2.133)$$

onde aqui o valor de escala é  $b = 2$  e o autovalor associado ao cálculo do expoente  $\nu$  é  $\lambda_1 = 1.67857$ , pelas equações (2.59), (2.66) e (2.86). Substituindo os valores, tem-se que  $\nu = 1.33827$ . É importante lembrar que as estimativas da temperatura crítica e do expoente  $\nu$ , para esta rede hierárquica, podem ser ainda melhorados através de cálculos mais elaborados, como por exemplo, aqueles que calculam as magnetizações de todos os sítios da rede exatamente [40,41]. Assim, embora o valor de  $\nu$  calculado acima ainda esteja distante do valor exato  $\nu = 1$ , vê-se que as redes hierárquicas não apresentam processos de proliferações de interações e podem fornecer resultados bem melhores do que o grupo de renormalização de Wilson mostrado na seção anterior.

# Capítulo 3

## Vidros de spins

### 3.1 Introdução aos vidros de spins

A expressão vidro de spins [2–4], foi criada para denominar algumas ligas magnéticas diluídas (tais como  $Au_{1-x}Fe_x$  e  $Cu_{1-x}Mn_x$ , com  $x$  muito pequeno) que apresentavam uma configuração aleatória das orientações dos spins na rede, em baixas temperaturas. Diferentemente de um sistema paramagnético, a configuração dos spins não varia com o tempo, sendo assim congelada. Os vidros de spins são, em certo sentido, a contrapartida magnética dos vidros comuns.

Como principais características experimentais pode-se mencionar um pico pronunciado da suscetibilidade a campo zero, um máximo arredondado do calor específico e falta de qualquer ordem de longo alcance abaixo da temperatura de transição para a fase de vidro de spins, embora este sistema exiba tanto histerese, quanto remanescência. Pode-se dizer que os vidros de spins pertencem à classe dos sistemas magnéticos desordenados, a qual se divide em *recozidos* e *temperados*. Os sistemas recozidos (onde o resfriamento é lento, permitindo a relaxação dos átomos para os estados de menor energia) são de pouco interesse, pois, com um tempo de observação longo, eles se comportarão como os sistemas magnéticos não aleatórios. Já os sistemas temperados, para os quais o resfriamento é rápido, não permitindo aos átomos se “acomodarem”, será de maior interesse. É nesse

último caso onde os vidros de spins são enquadrados.

A desordem desempenha um papel muito importante nos vidros de spins. Isso é conhecido pelo fato da mesma ser o fator dominante para as propriedades do estado fundamental do sistema, mudando drasticamente as propriedades de baixas temperaturas do sistema magnético, quando se compara a fase de vidro de spins com a fase ferromagnética. Identifica-se a transição de vidro de spins com um congelamento dos spins do sistema em direções aleatórias. A existência de histerese e remanescência é uma evidência de que isso ocorre. Além disso, suspeita-se que os vidros de spins não apresentam um único estado fundamental.

Como dito anteriormente, a interação entre átomos magnéticos é *congelada* ou *temperada* e, em um meio metálico, esta interação é modelada pela interação RKKY (Ruderman-Kittel-Kasuya-Yosida) [42–44],

$$\mathcal{H} = \sum_{i,j} J(R_{ij}) \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j = J_0 \sum_{i,j} \frac{\cos(2k_F R_{ij} + \phi)}{R_{ij}^3} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j, \quad (0 < R_{ij} < \infty). \quad (3.1)$$

Aqui, tem-se que  $J_0$  e  $\phi$  são constantes,  $k_F$  é o vetor de onda de Fermi do metal nobre,  $\sum_{i,j}$  representa a soma da interação entre pares de átomos e  $R_{ij}$  a distância entre os átomos. A representação que se tem em mente, é que o espalhamento dos elétrons de condução nos spins leva a uma interação de troca indireta que oscila fortemente com a distância. Como as distâncias entre os spins são aleatórias, algumas interações serão positivas, favorecendo um alinhamento paralelo, e outras serão negativas, favorecendo um alinhamento antiparalelo. Assim, podem ocorrer situações nas quais nenhum alinhamento de spins satisfaz à todas as ligações de troca, levando a uma competição das diferentes ligações entre os spins. Este fenômeno é chamado de *frustração*. Para ilustrar, considere um modelo de Ising bidimensional em uma rede quadrada onde os acoplamentos entre primeiros vizinhos  $J_{ij}$  só podem assumir os valores  $\pm J$ , como mostrado na Figura 3.1. As configurações de menor energia de um único quadrado com um spin em cada vértice são diferentes dependendo se o número de ligações negativas é par ou ímpar, pois elas são aleatórias e independentes. Tal elemento unitário da rede costuma ser denominado por “plaqueta”. Quando o número de ligações negativas é par, então é sempre possível determinar configurações de spins que satisfazem todas as ligações. Por exemplo, escolhe-

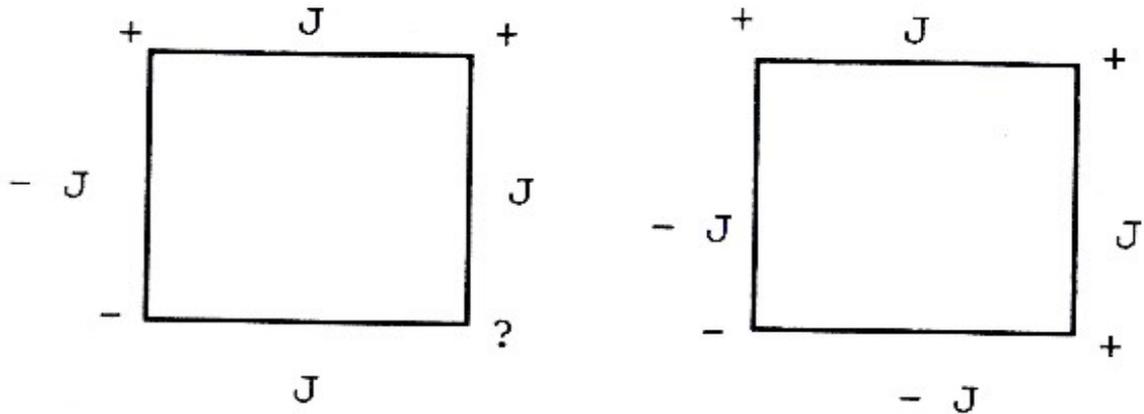


Figura 3.1: Sistema de duas plaquetas ilustrando a frustração. A plaqueta da esquerda é frustrada, enquanto que a da direita, não é (a figura foi retirada da referência [39]).

se um dos spins (vértice inferior esquerdo da plaqueta) e move-se no sentido horário, adotando os valores dos spins em cada vértice da plaqueta de tal forma a minimizar a energia associada à cada ligação. Nessa configuração, não haverá frustração. Porém, se o número de ligações negativas é ímpar, haverá um conflito quando se tenta satisfazer todas as ligações durante o trajeto no quadrado. A ligação entre o primeiro e o último spin não será satisfeita. Tentando inverter um dos spins para satisfazer uma ligação, uma outra ligação será violada. Assim, a plaqueta apresenta uma degenerescência do estado fundamental, de tal forma que um sistema frustrado é caracterizado por um alto grau de degenerescência do estado fundamental.

Um outro aspecto dos vidros de spins a ser mencionado é a *quebra de ergodicidade*. A causa dessa quebra é que o sistema sendo resfriado a partir de uma fase paramagnética em altas temperaturas, o mesmo “congela”, ao passar pela temperatura crítica, numa configuração aleatória que é dependente das condições de resfriamento. Isto significa que o sistema pode cair em um estado metaestável do qual não é capaz de escapar se a temperatura é muito baixa. Isto significa que a energia livre apresenta muitos mínimos locais no espaço das configurações dos estados. No limite termodinâmico, as barreiras que separam estes mínimos se tornam infinitas e o sistema fica preso em um vale de energia mínima para sempre. Logo, a média temporal do sistema não será igual à média

do ensemble estatístico, pois o sistema irá explorar apenas uma parte do espaço das configurações, e com isso, o sistema não mais será ergódico. Como o sistema é ergódico na fase paramagnética, diz-se ocorrer uma quebra de ergodicidade.

## 3.2 O método das réplicas

O procedimento usual de tratar um sistema com desordem temperada consiste em efetuar a média da desordem da energia livre por partícula associada a uma configuração da desordem  $\{x\}$ ,

$$f = \langle f\{x\} \rangle = -\frac{k_B T}{N} \langle \ln Z\{x\} \rangle, \quad (3.2)$$

onde os parênteses angulares indicam uma média sobre a desordem. O cálculo dessa quantidade pode ser muito difícil de realizar, pois inicialmente, teria-se que calcular a energia livre  $f\{x\} = -\frac{k_B T}{N} \ln Z\{x\}$  dependente de uma dada configuração da desordem  $\{x\}$ . Na prática, teria-se que trabalhar com um hamiltoniano contendo muitos parâmetros no limite termodinâmico e que não apresenta invariância translacional. O passo final consiste em calcular a média sobre o conjunto das variáveis da desordem. Uma técnica possível para efetuar este cálculo é conhecido como método das réplicas, baseado na identidade,

$$\langle \ln Z\{x\} \rangle = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{\langle Z^n\{x\} \rangle - 1}{n} = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{\partial}{\partial n} \langle Z^n\{x\} \rangle, \quad (3.3)$$

onde utilizou-se que  $y^n = \exp(n \ln y) \approx 1 + n \ln y$  quando  $n \rightarrow 0$ . Para  $n$  inteiro positivo, pode-se expressar  $Z^n\{x\}$  em termos de  $n$  réplicas idênticas e independentes do sistema,

$$Z^n\{x\} = \prod_{\alpha=1}^n Z_{\alpha}\{x\} = \prod_{\alpha=1}^n \exp \left[ \frac{-\mathcal{H}\{x, S_i^{\alpha}\}}{k_B T} \right] = \exp \left[ -\sum_{\alpha=1}^n \frac{\mathcal{H}\{x, S_i^{\alpha}\}}{k_B T} \right], \quad (3.4)$$

onde  $Z_{\alpha}$  é a função de partição da  $\alpha$ -ésima réplica.

## 3.3 O modelo de Edwards-Anderson

Mesmo utilizando o método das réplicas, é difícil tratar um modelo real de vidro de spins considerando todos os ingredientes essenciais, como interações, anisotropias, e campos externos de tal maneira a efetuar a média sobre a desordem do sistema. Entretanto,

a experiência com os fenômenos cooperativos mostra que é conveniente formular modelos que incorporam os pontos essenciais da Física do sistema em questão, negligenciando alguns dos detalhes microscópicos característicos de um material real. Desta forma, Edwards e Anderson [45] propuseram um modelo em que um vidro de spins pudesse ser descrito em termos de uma hamiltoniana do tipo,

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} S_i S_j - H \sum_i S_i, \quad (3.5)$$

onde os spins do tipo Ising são colocados nos sítios de uma rede regular, a soma sobre  $\sum_{\langle ij \rangle}$  abrange os pares de spins primeiros vizinhos de uma rede regular e a desordem é introduzida através de uma distribuição  $P(J_{ij})$  associada às ligações de troca  $\{J_{ij}\}$  e o sistema se encontra na presença de um campo externo  $H$ . É importante salientar que no sistema real, os spins são os que se encontram em posições aleatórias. A escolha padrão é o modelo gaussiano de Edwards-Anderson,

$$P(J_{ij}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi J^2}} \exp \left[ \frac{-(J_{ij} - J_0)^2}{2J^2} \right], \quad (3.6)$$

onde aqui  $J_0$  é a média e  $J$  é o desvio padrão ou a largura da distribuição gaussiana. Uma outra distribuição também bastante utilizada é a distribuição bimodal,

$$P(J_{ij}) = p\delta(J_{ij} - J) + (1 - p)\delta(J_{ij} + J), \quad (3.7)$$

onde  $p$  representa a concentração de ligações  $+J$ .

Para a obtenção de uma quantidade física utilizando o hamiltoniano (3.5), deve-se calcular a função de partição em relação às variáveis de spins  $\{S_i\}$  sobre um conjunto fixo  $\{J_{ij}\}$ ,

$$Z\{J_{ij}\} = \text{Tr} \exp(-\beta\mathcal{H}), \quad (3.8)$$

que é uma função dos  $\{J_{ij}\}$ . Como exemplo, a energia livre de Helmholtz é dada por

$$F\{J_{ij}\} = -\beta \ln Z\{J_{ij}\}. \quad (3.9)$$

O próximo passo consiste em efetuar uma média da energia livre sobre os  $\{J_{ij}\}$ . Este procedimento, denominado de média configuracional, é, conforme definido na seção anterior,

$$\langle F \rangle = -\beta \langle \ln Z \rangle = -\beta \int \prod_{\langle ij \rangle} dJ_{ij} P(J_{ij}) \ln Z. \quad (3.10)$$

Uma das técnicas utilizadas, para se calcular a integral acima, é o método das réplicas, baseado na identidade da equação (3.3). A partir da energia livre  $\langle F \rangle$ , segue-se o procedimento padrão da termodinâmica para se obter as quantidades físicas desejadas. A razão para se efetuar primeiro a média térmica sobre os spins e depois sobre os  $\{J_{ij}\}$  é que as posições dos spins são aleatórias no espaço, mas fixas na escala temporal.

## 3.4 Solução de campo médio

### 3.4.1 O modelo de Sherrington-Kirkpatrick

A teoria de campo médio do ferromagnetismo apresenta algumas virtudes como uma primeira aproximação para descrever um sistema físico: simplicidade e resultados qualitativamente razoáveis para descrever um sistema tridimensional. Embora sendo uma aproximação, a mesma torna-se exata no limite de interações de alcance infinito, onde cada spin interage igualmente com qualquer outro spin do sistema. Assim, Sherrington e Kirkpatrick [46] propuseram uma teoria de campo médio para os vidros de spins, a qual deveria apresentar a solução exata do modelo de Edwards-Anderson com interações de alcance infinito; desta forma a distribuição de probabilidades  $P(J_{ij})$  é a mesma para todos os pares de spins, não importando o quão longe eles estejam. Essas considerações não possuem suporte matemático rigoroso, mas levando em conta que o modelo de alcance infinito do ferromagnetismo leva a resultados qualitativamente corretos para a descrição de um ferromagneto simples em uma rede de dimensão maior ou igual a dois, parece razoável tentar uma aproximação análoga para os vidros de spins.

O hamiltoniano de Sherrington-Kirkpatrick é dado por,

$$\mathcal{H} = - \sum_{(ij)} J_{ij} S_i S_j - H \sum_i S_i, \quad (3.11)$$

onde  $S_i = \pm 1$ , a soma no primeiro termo se estende sobre todos os pares de spins sem dupla contagem, e um campo externo uniforme é incluído. As constantes de acoplamento serão distribuídas de acordo com a distribuição gaussiana,

$$P(J_{ij}) = \sqrt{\frac{N}{2\pi J^2}} \exp\left(\frac{-N \left(J_{ij} - \frac{J_0}{N}\right)^2}{2J^2}\right) \quad (3.12)$$

sendo a mesma para todos os pares de spins com  $\langle J_{ij} \rangle = \frac{J_0}{N}$  e  $\langle J_{ij}^2 \rangle - \langle J_{ij} \rangle^2 = \frac{J^2}{N}$ . As dependências no número total de spins  $N$  são necessários para a obtenção de um limite termodinâmico razoável, mas não trivial.

Seguindo a proposta de Edwards e Anderson, Sherrington e Kirkpatrick estudaram o modelo acima através do método das réplicas, cuja solução obteve os seguintes parâmetros de ordem,

$$q_{\alpha\beta} = \langle S^\alpha S^\beta \rangle_L = \frac{\text{Tr} S^\alpha S^\beta e^L}{\text{Tr} e^L} \quad \text{e} \quad (3.13)$$

$$m_\alpha = \langle S^\alpha \rangle_L = \frac{\text{Tr} S^\alpha e^L}{\text{Tr} e^L}, \quad (3.14)$$

onde  $\alpha$  e  $\beta$  são os índices de réplica e os parênteses representam médias térmicas com relação ao “hamiltoniano efetivo” no espaço das réplicas,

$$L = \beta^2 J^2 \sum_{\alpha < \beta} q_{\alpha\beta} S^\alpha S^\beta + \beta \sum_{\alpha} (J_0 m_\alpha + H) S^\alpha, \quad (3.15)$$

onde  $J_0$  é dado na equação (3.12) e  $\beta$  (não sendo índice) vale  $\frac{1}{k_B T}$ . Estas quantidades aparecem no cálculo da média configuracional da  $n$ -ésima potência da função de partição como artefatos matemáticos para realizar o cálculo e identificou-se  $q_{\alpha\beta}$  e  $m_\alpha$  como parâmetros de ordem. Sherrington e Kirkpatrick consideraram a seguinte solução, denominada de simetria entre réplicas,  $q_{\alpha\beta} = q, \forall (\alpha, \beta)$  e  $m_\alpha = m, \forall \alpha (\alpha = 1, 2, \dots, n)$ . O parâmetro  $q$  foi considerado o parâmetro de ordem da fase de vidro de spins, enquanto que o parâmetro  $m$  representa o parâmetro de ordem da fase ferromagnética.

O diagrama de fases obtido por Sherrington e Kirkpatrick na ausência de campo externo é mostrado na figura 3.2. Têm-se, as fases paramagnética ( $q = m = 0$ ), ferromagnética ( $q \neq 0$  e  $m \neq 0$ ) e de vidro de spins ( $q \neq 0$  e  $m = 0$ ). Para  $1 \leq J_0/J \leq 1,25$ , existe uma reentrância  $P \rightarrow F \rightarrow VS$  quando se reduz a temperatura nesta região. Também, notou-se que em baixas temperaturas, a solução de Sherrington e Kirkpatrick é incorreta, pois fornece uma entropia negativa. Foi observado por de Almeida e Thouless que existe uma linha [47], acima da qual a solução de simetria entre réplicas é correta, enquanto que abaixo da mesma tal solução gera uma instabilidade termodinâmica.

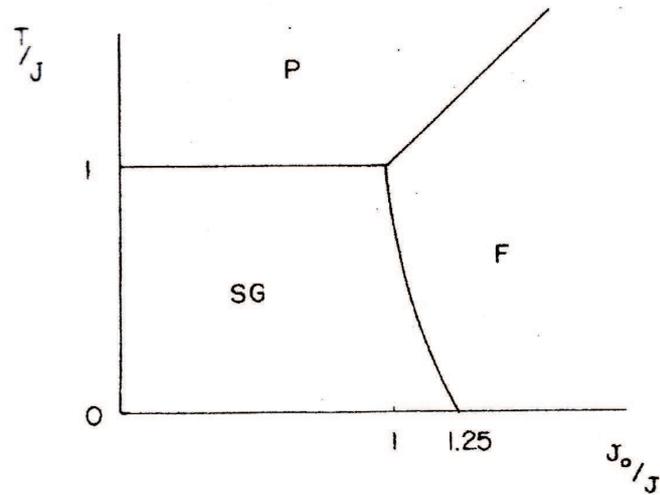


Figura 3.2: Diagrama de fases para a solução de Sherrington-Kirkpatrick para o modelo com interações de alcance infinito. Aqui,  $P$  representa a fase paramagnética,  $F$  a fase ferromagnética e  $SG$  a fase de vidro de spins (figura retirada da referência [2]).

### 3.4.2 Quebra de simetria entre réplicas

Como visto na seção anterior, a solução de simetria entre réplicas fornece uma entropia negativa em baixas temperaturas. A solução de simetria entre réplicas é estável acima da linha de Almeida-Thouless e instável abaixo da mesma; para resolver este problema, Parisi propôs um procedimento, denominado de procedimento de quebra de simetria entre réplicas.

O passo zero da proposta de Parisi para a quebra de simetria entre réplicas [48] consiste em considerar  $q_{\alpha\beta}$  como uma matriz simétrica  $n \times n$ , com todos os elementos da diagonal iguais a zero e os elementos fora da diagonal iguais a um valor  $q_0$ . Em outras palavras, neste estágio tem-se a solução com simetria entre réplicas proposta por Sherrington e

Kirkpatrick. Como exemplo, para uma matriz  $6 \times 6$ , tem-se

$$q_{\alpha\beta} = \begin{pmatrix} 0 & q_0 & q_0 & q_0 & q_0 & q_0 \\ q_0 & 0 & q_0 & q_0 & q_0 & q_0 \\ q_0 & q_0 & 0 & q_0 & q_0 & q_0 \\ q_0 & q_0 & q_0 & 0 & q_0 & q_0 \\ q_0 & q_0 & q_0 & q_0 & 0 & q_0 \\ q_0 & q_0 & q_0 & q_0 & q_0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.16)$$

O primeiro passo da solução de Parisi consiste em dividir a matriz  $q_{\alpha\beta}$  em blocos de matrizes  $m_1 \times m_1$  e nos blocos diagonais, fazer com que os elementos fora das diagonais se tornem iguais a  $q_1$ . Como exemplo, para o caso em que  $n = 6$  e  $m_1 = 3$ ,

$$q_{\alpha\beta} = \begin{pmatrix} 0 & q_1 & q_1 & q_0 & q_0 & q_0 \\ q_1 & 0 & q_1 & q_0 & q_0 & q_0 \\ q_1 & q_1 & 0 & q_0 & q_0 & q_0 \\ q_0 & q_0 & q_0 & 0 & q_1 & q_1 \\ q_0 & q_0 & q_0 & q_1 & 0 & q_1 \\ q_0 & q_0 & q_0 & q_1 & q_1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.17)$$

No próximo passo os blocos diagonais são subdivididos em blocos de tamanho  $m_2 \times m_2$  e os elementos fora das diagonais destes blocos adquirem o valor igual a  $q_2$ . O caso  $n = 12$ ,

$m_1 = 6$  e  $m_2 = 3$  corresponde a

$$q_{\alpha\beta} = \begin{pmatrix} 0 & q_2 & q_2 & q_1 & q_1 & q_1 & q_0 & q_0 & q_0 & q_0 & q_0 & q_0 \\ q_2 & 0 & q_2 & q_1 & q_1 & q_1 & q_0 & q_0 & q_0 & q_0 & q_0 & q_0 \\ q_2 & q_2 & 0 & q_1 & q_1 & q_1 & q_0 & q_0 & q_0 & q_0 & q_0 & q_0 \\ q_1 & q_1 & q_1 & 0 & q_2 & q_2 & q_0 & q_0 & q_0 & q_0 & q_0 & q_0 \\ q_1 & q_1 & q_1 & q_2 & 0 & q_2 & q_0 & q_0 & q_0 & q_0 & q_0 & q_0 \\ q_1 & q_1 & q_1 & q_2 & q_2 & 0 & q_0 & q_0 & q_0 & q_0 & q_0 & q_0 \\ q_0 & q_0 & q_0 & q_0 & q_0 & q_0 & 0 & q_2 & q_2 & q_1 & q_1 & q_1 \\ q_0 & q_0 & q_0 & q_0 & q_0 & q_0 & q_2 & 0 & q_2 & q_1 & q_1 & q_1 \\ q_0 & q_0 & q_0 & q_0 & q_0 & q_0 & q_2 & q_2 & 0 & q_1 & q_1 & q_1 \\ q_0 & q_0 & q_0 & q_0 & q_0 & q_0 & q_1 & q_1 & q_1 & 0 & q_2 & q_2 \\ q_0 & q_0 & q_0 & q_0 & q_0 & q_0 & q_1 & q_1 & q_1 & q_2 & 0 & q_2 \\ q_0 & q_0 & q_0 & q_0 & q_0 & q_0 & q_1 & q_1 & q_1 & q_2 & q_2 & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.18)$$

Nos passos seguintes, o procedimento é continuado de maneira análoga aos passos anteriores, gerando subdivisões dos blocos das diagonais tais que,

$$n \geq m_1 \geq m_2 \geq \dots m_k \geq 1. \quad (3.19)$$

Até então, considerou-se que  $n$  e  $m_i$  inteiros. No procedimento da solução deve-se considerar a continuação analítica  $n \rightarrow 0$ , levando à inversão da ordem em (3.19),

$$0 \leq m_1 \leq m_2 \leq \dots \leq m_k \leq 1. \quad (3.20)$$

No limite  $k \rightarrow \infty$  pode-se substituir  $0 \leq m_i \leq 1$  por uma variável contínua  $0 \leq x \leq 1$ , enquanto que o conjunto dos parâmetros  $q_i$  gera uma função contínua  $q(x)$ , definida no intervalo entre 0 e 1, denominada de função de Parisi.

O diagrama de fases obtido por Parisi é mostrado na figura 3.3. Os contornos da fase paramagnética continuam os mesmos que os da solução de simetria entre réplicas. Entretanto, as fases de vidro de spins e ferromagnética mista ( $F'$ ) estão separadas por uma linha vertical reta, onde tanto nesta fase ferromagnética, como na fase de vidro de spins tem-se quebra de simetria entre réplicas. Também, tem-se uma linha de Almeida-Thouless separando as fases ferromagnéticas sem e com quebra de simetria entre réplicas.

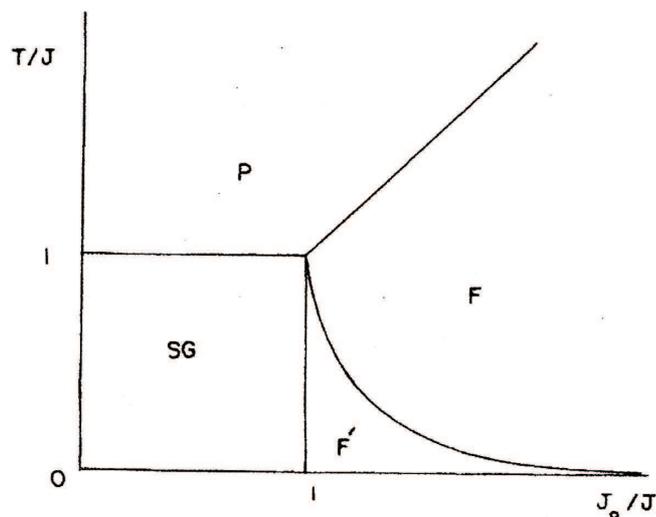


Figura 3.3: Diagrama de fases exato para o modelo de Sherrington-Kirkpatrick na ausência de campo magnético externo. As fronteiras  $P - SG$  e  $P - F$  são as mesmas da figura 3.2. A fase  $F'$  é uma fase ferromagnética com quebra de simetria entre réplicas e é separada de  $F$  por uma linha de Almeida e Thouless (figura foi retirada da referência [2]).

### 3.5 Aplicação do grupo de renormalização aos vidros de spins

Existem dois formalismos de grupo de renormalização que podem ser usados. O primeiro consiste na aproximação no espaço dos momentos, com um hamiltoniano efetivo no espaço das réplicas para as flutuações de longos comprimentos de onda. A técnica consiste em efetuar uma expansão sistemática para os expoentes críticos em potências de  $\varepsilon = d - d_{CS}$ , onde  $d_{CS}$  corresponde à dimensão crítica superior, a qual é igual a seis para os vidros de spins.

Uma aproximação diferente consiste em trabalhar no espaço real com spins de comprimento fixo. A principal desvantagem desta técnica é que pode ser necessário fazer aproximações não controladas; por outro lado, pode-se obter aspectos globais do diagrama de fases (o que não é possível nas técnicas do espaço dos momentos) simplesmente

reescalando a distribuição de probabilidades para as variáveis aleatórias.

### 3.5.1 Renormalização no espaço real

Na aproximação do espaço real, trabalha-se diretamente em uma rede com spins de comprimento fixo. Como verificado anteriormente, pode ser necessário truncar a proliferação das interações geradas pela transformação, geralmente considerando uma pequena parte da rede. A aproximação mais simples é devida à Migdal e Kadanoff, a qual mostrou-se bem sucedida quando conduzida cuidadosamente. Considera-se somente as interações de pares de spins primeiros vizinhos e esta aproximação pode ser aplicada sem qualquer dificuldade em dimensões arbitrárias, embora a mesma seja mais bem sucedida em baixas dimensões. Aqui, vê-se a importância das redes hierárquicas introduzidas no capítulo anterior, já que as mesmas só apresentam interações entre primeiros vizinhos e não geram proliferações de interações diferentes das dos primeiros vizinhos. Para problemas aleatórios, tem-se que achar a transformação para a distribuição de probabilidades da desordem. No modelo de Edwards e Anderson, as ligações são estatisticamente independentes e mantêm-se assim depois de reescaladas na aproximação de Migdal, embora correlações são geradas em cenários mais complicados. Por causa disso, para os spins de Ising, a transformação leva a

$$P(J_{ij}) \rightarrow P'(J'_{ij}) \quad (3.21)$$

e os expoentes críticos são determinados para distribuições de ponto fixo, isto é, quando  $P = P'$ . Os expoentes podem ser encontrados pela linearização da distribuição sobre sua forma de ponto fixo. A forma da distribuição pode ser seguida por técnicas numéricas, onde a distribuição é representada por um banco de números, e o método a ser utilizado nessa dissertação é o da reescala, introduzido por Young e Stinchcombe [49] e Southern e Young [5].

O método da reescala consiste em efetuar a dizimação na rede e analisar as interações efetivas entre os spins remanescentes. Por exemplo, na rede quadrada [49], elimina-se metade dos sítios da rede deixando os sítios remanescentes ainda em uma rede quadrada mas com o espaçamento de rede aumentado de  $b = \sqrt{2}$  (fator de escala) de acordo com a figura 3.4. A relação de recorrência para a interação efetiva entre dois spins remanescentes

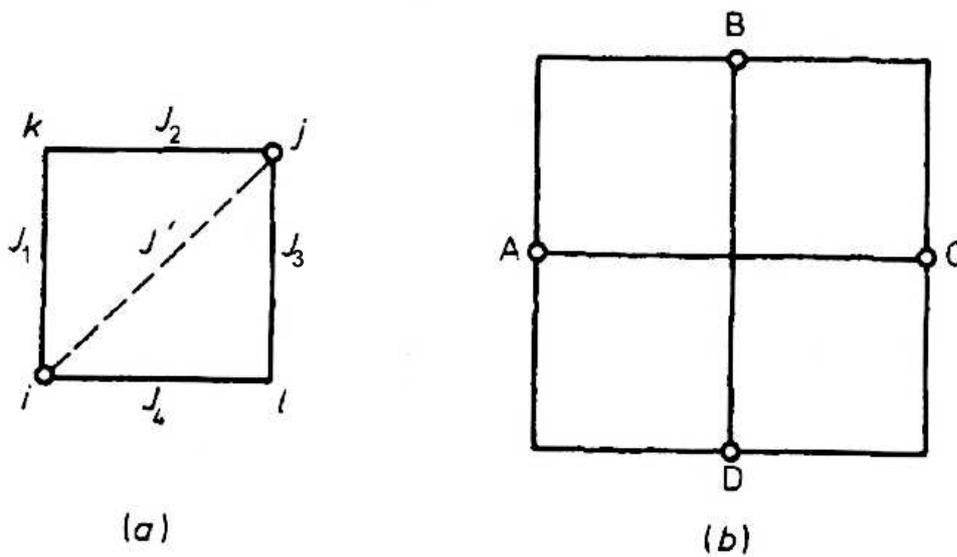


Figura 3.4: Na parte (a) da figura tem-se um aglomerado com quatro sítios usados na transformação de reescala. Na parte (b) tem-se um aglomerado com quatro sítios deixados após a reescala, com o espaçamento da rede aumentado por um fator de escala  $b = \sqrt{2}$  (figura retirada da referência [49]).

na rede quadrada é dada por

$$J' = k_B T \tanh^{-1} t'; \quad t' = \frac{t_1 t_2 + t_3 t_4}{1 + t_1 t_2 t_3 t_4}, \quad (3.22)$$

onde  $t' = \tanh(\beta J')$  e  $t_i = \tanh(\beta J_i)$  ( $i = 1, 2, 3, 4$ ). Aqui,  $t'$  é a transmissividade renormalizada entre os sítios  $i$  e  $j$  do aglomerado que são deixados depois da rescala e  $t_i$  são as transmissividades associadas às ligações da célula exibida na parte (a) da figura 3.4. Na parte (b) é mostrado um aglomerado maior onde são deixados os sítios  $A$ ,  $B$ ,  $C$  e  $D$  depois da reescala. O procedimento numérico utilizado para o acompanhamento da distribuição  $P(J_{ij})$  é o mesmo introduzido nas referências [5, 49]. Primeiramente, considera-se um banco de números gerados a partir da distribuição inicial  $P(J_{ij})$ , de tamanho  $M$ , e escolhe-se quatro números aleatoriamente que representarão os  $J_i$ 's da equação de recorrência e calcula-se o valor da nova interação  $J'$  através da relação (3.22). O processo é continuado  $M$  vezes até que um novo banco de números, que representará a distribuição renormalizada  $P'(J'_{ij})$ , seja gerado.

Em sistemas aleatórios, as interações entre os spins da rede são governados por uma distribuição de probabilidade que é, em geral, diferente da distribuição original. Para os vidros de spins, a distribuição inicial é tomada como simétrica e espera-se que se mantenha assim sob as transformações, enquanto que na análise da competição entre as fases de vidro de spins e ferromagnética, considera-se distribuições não centradas na origem. A tarefa é então seguir esta distribuição através de reescalas sucessivas monitorando a evolução dos seus momentos, principalmente os de ordem mais baixa. A partir destes momentos pode-se calcular a largura da distribuição, o desvio  $\sqrt{\langle J_{ij}^2 \rangle - \langle J_{ij} \rangle^2} = J$  e outra quantidade importante, a ser utilizada é a média,  $\langle J_{ij} \rangle = J_0$ . Agora, para se identificar em qual fase o sistema se encontra basta seguir o comportamento dessas duas quantidades. Na fase paramagnética, onde o comprimento de correlação é finito, as interações diminuem sob iterações sucessivas, pois, estas interações efetivas dão informação sobre as correlações em distâncias cada vez maiores, sucessivamente. Se, por outro lado, a largura da distribuição continua a aumentar, este efeito pode estar associado a uma ordem de vidro de spins; no caso ferromagnético, as interações crescem sob a reescala mas todas têm o mesmo sinal.

Os diversos atratores característicos das diferentes fases do sistema são identificados por,

$$J_0, J \rightarrow 0 \quad (\text{Fase paramagnética}) \quad (3.23)$$

$$J_0, J \rightarrow \infty, \frac{J}{J_0} \rightarrow 0 \quad (\text{Fase ferromagnética}) \quad (3.24)$$

$$J \rightarrow \infty, \frac{J_0}{J} \rightarrow 0 \quad (\text{Fase de vidro de spins}). \quad (3.25)$$

# Capítulo 4

## Criticalidade do vidro de spins de Ising em uma rede hierárquica da família da ponte de Wheatstone

### 4.1 Introdução

O presente capítulo é destinado a mostrar os procedimentos para a obtenção de diagramas de fases e expoentes críticos para uma rede hierárquica da família da ponte de Wheatstone. Esta rede corresponde ao análogo tridimensional da ponte de Wheatstone, cuja renormalização da célula básica é exibida na figura 4.1. Os parâmetros da rede e os expoentes são dados por número de agregação  $g = 12$ , corte mínimo  $q = 4$ , fator de escala  $b = 2$ , dimensão fractal  $D = 3,58$  e conectividade  $Q = 2$ . Os círculos vazios nos extremos da rede representam os sítios terminais, onde ficarão os spins remanescentes depois de efetuada a dizimação e os círculos cheios representam os sítios internos onde se encontram os spins a serem somados. O procedimento de renormalização consiste em transformar a célula básica da rede em uma ligação unindo os sítios terminais, como mostra a figura 4.1. Nesta dissertação, os spins a serem considerados serão do tipo Ising. O hamiltoniano que utilizaremos será o seguinte,

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

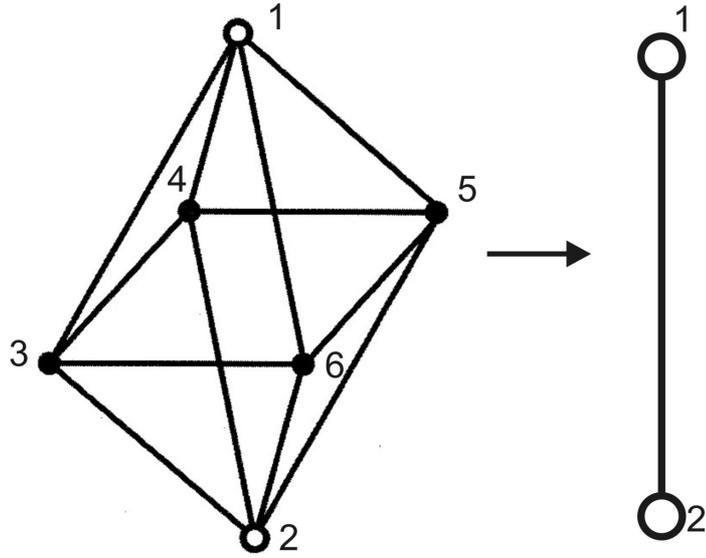


Figura 4.1: Célula básica da rede hierárquica correspondente ao análogo tridimensional da ponte de Wheatstone. O procedimento consiste em dizimar os spins nos sítios internos ( $S_3, S_4, S_5, S_6$ ), transformando a célula básica em uma única ligação unindo os sítios externos.

onde a soma  $\sum_{\langle ij \rangle}$  é restrita a pares de spins primeiros vizinhos da rede hierárquica definida acima. Os acoplamentos aleatórios  $\{J_{ij}\}$  serão gerados a partir das distribuições gaussiana e bimodal. Na próxima seção calcularemos a relação de recorrência a ser utilizada no procedimento do grupo de renormalização; na seção 4.3 discutiremos os resultados obtidos.

## 4.2 Cálculo da relação de recorrência

Agora, para o cálculo da função de partição associada à célula básica, faremos o tabelamento das ligações na rede, de acordo com a figura 4.2, onde os  $K'_i$ s correspondem aos  $J'_{ij}$ s divididos por  $k_B T$  (constante de Boltzmann multiplicada pela temperatura).

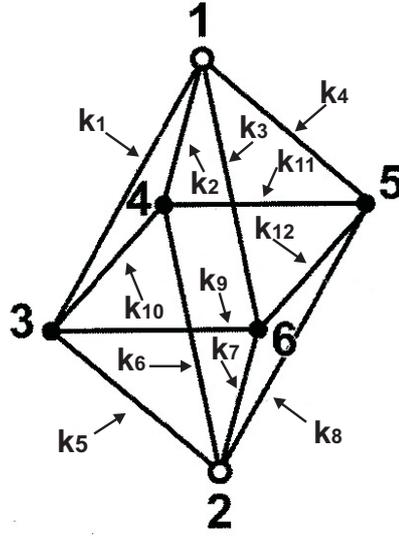


Figura 4.2: Notação utilizada para as ligações da célula básica para o cálculo da função de partição associada à mesma.

Assim, a função de partição associada à célula básica é dada por,

$$Z = \sum_{S_1, S_2, S_3, S_4, S_5, S_6 = \pm 1} \exp(K_1 S_1 S_3 + K_2 S_1 S_4 + K_3 S_1 S_6 + K_4 S_1 S_5 + K_5 S_2 S_3 + K_6 S_2 S_4 + K_7 S_2 S_6 + K_8 S_2 S_5 + K_9 S_3 S_6 + K_{10} S_3 S_4 + K_{11} S_4 S_5 + K_{12} S_5 S_6). \quad (4.2)$$

A dizimação é efetuada considerando um traço parcial sobre os spins  $S_3$ ,  $S_4$ ,  $S_5$  e  $S_6$  ficando a função de partição como função somente dos spins  $S_1$  e  $S_2$ . Como feito anteriormente, a função de partição da rede renormalizada deve ser igual à função de partição da rede original. A nova forma da função de partição da rede renormalizada é

$$Z' = \sum_{S_1, S_2 = \pm 1} \exp(K' S_1 S_2 + C), \quad (4.3)$$

onde  $K'$  representa a interação efetiva entre os spins  $S_1$  e  $S_2$  e  $C$  é uma constante aditiva. Para determinar  $K'$  e  $C$ , forma-se um sistema de equações definido pelas possibilidades de  $S_1$  e  $S_2$  dadas pelas combinações  $(1, 1)$  e  $(-1, 1)$ . A expressão para  $\exp(2K')$  é dada pelo quociente da equação gerada pela combinação  $(1, 1)$  por aquela da combinação  $(-1, 1)$ ,

forneendo assim o valor da interação efetiva,

$$K' = \frac{1}{2} \ln \left( \frac{\sum_{i=1}^{16} \exp(A_i)}{\sum_{i=1}^{16} \exp(B_i)} \right), \quad (4.4)$$

onde os argumentos das exponenciais no numerador são,

$$\begin{aligned} A_1 &= -K_1 - K_2 - K_3 - K_4 - K_5 - K_6 - K_7 - K_8 + K_9 + K_{10} + K_{11} + K_{12}, \\ A_2 &= K_1 - K_2 - K_3 - K_4 + K_5 - K_6 - K_7 - K_8 - K_9 - K_{10} + K_{11} + K_{12}, \\ A_3 &= -K_1 + K_2 - K_3 - K_4 - K_5 + K_6 - K_7 - K_8 + K_9 - K_{10} - K_{11} + K_{12}, \\ A_4 &= K_1 + K_2 - K_3 - K_4 + K_5 + K_6 - K_7 - K_8 - K_9 + K_{10} - K_{11} + K_{12}, \\ A_5 &= -K_1 - K_2 - K_3 + K_4 - K_5 - K_6 - K_7 + K_8 + K_9 + K_{10} - K_{11} - K_{12}, \\ A_6 &= K_1 - K_2 - K_3 + K_4 + K_5 - K_6 - K_7 + K_8 - K_9 - K_{10} - K_{11} - K_{12}, \\ A_7 &= -K_1 + K_2 - K_3 + K_4 - K_5 + K_6 - K_7 + K_8 + K_9 - K_{10} + K_{11} - K_{12}, \\ A_8 &= K_1 + K_2 - K_3 + K_4 + K_5 + K_6 - K_7 + K_8 - K_9 + K_{10} + K_{11} - K_{12}, \\ A_9 &= -K_1 - K_2 + K_3 - K_4 - K_5 - K_6 + K_7 - K_8 - K_9 + K_{10} + K_{11} - K_{12}, \\ A_{10} &= K_1 - K_2 + K_3 - K_4 + K_5 - K_6 + K_7 - K_8 + K_9 - K_{10} + K_{11} - K_{12}, \\ A_{11} &= -K_1 + K_2 + K_3 - K_4 - K_5 + K_6 + K_7 - K_8 - K_9 - K_{10} - K_{11} - K_{12}, \\ A_{12} &= K_1 + K_2 + K_3 - K_4 + K_5 + K_6 + K_7 - K_8 + K_9 + K_{10} - K_{11} - K_{12}, \\ A_{13} &= -K_1 - K_2 + K_3 + K_4 - K_5 - K_6 + K_7 + K_8 - K_9 + K_{10} - K_{11} + K_{12}, \\ A_{14} &= K_1 - K_2 + K_3 + K_4 + K_5 - K_6 + K_7 + K_8 + K_9 - K_{10} - K_{11} + K_{12}, \\ A_{15} &= -K_1 + K_2 + K_3 + K_4 - K_5 + K_6 + K_7 + K_8 - K_9 - K_{10} + K_{11} + K_{12}, \\ A_{16} &= K_1 + K_2 + K_3 + K_4 + K_5 + K_6 + K_7 + K_8 + K_9 + K_{10} + K_{11} + K_{12}. \end{aligned} \quad (4.5)$$

Já os argumentos das exponenciais no denominador são,

$$\begin{aligned}
B_1 &= -K_1 - K_2 - K_3 - K_4 + K_5 + K_6 + K_7 + K_8 + K_9 + K_{10} + K_{11} + K_{12}, \\
B_2 &= K_1 - K_2 - K_3 - K_4 - K_5 + K_6 + K_7 + K_8 - K_9 - K_{10} + K_{11} + K_{12}, \\
B_3 &= -K_1 + K_2 - K_3 - K_4 + K_5 - K_6 + K_7 + K_8 + K_9 - K_{10} - K_{11} + K_{12}, \\
B_4 &= K_1 + K_2 - K_3 - K_4 - K_5 - K_6 + K_7 + K_8 - K_9 + K_{10} - K_{11} + K_{12}, \\
B_5 &= -K_1 - K_2 - K_3 + K_4 + K_5 + K_6 + K_7 - K_8 + K_9 + K_{10} - K_{11} - K_{12}, \\
B_6 &= K_1 - K_2 - K_3 + K_4 - K_5 + K_6 + K_7 - K_8 - K_9 - K_{10} - K_{11} - K_{12}, \\
B_7 &= -K_1 + K_2 - K_3 + K_4 + K_5 - K_6 + K_7 - K_8 + K_9 - K_{10} + K_{11} - K_{12}, \\
B_8 &= K_1 + K_2 - K_3 + K_4 - K_5 - K_6 + K_7 - K_8 - K_9 + K_{10} + K_{11} - K_{12}, \\
B_9 &= -K_1 - K_2 + K_3 - K_4 + K_5 + K_6 - K_7 + K_8 - K_9 + K_{10} + K_{11} - K_{12}, \\
B_{10} &= K_1 - K_2 + K_3 - K_4 - K_5 + K_6 - K_7 + K_8 + K_9 - K_{10} + K_{11} - K_{12}, \\
B_{11} &= -K_1 + K_2 + K_3 - K_4 + K_5 - K_6 - K_7 + K_8 - K_9 - K_{10} - K_{11} - K_{12}, \\
B_{12} &= K_1 + K_2 + K_3 - K_4 - K_5 - K_6 - K_7 + K_8 + K_9 + K_{10} - K_{11} - K_{12}, \\
B_{13} &= -K_1 - K_2 + K_3 + K_4 + K_5 + K_6 - K_7 - K_8 - K_9 + K_{10} - K_{11} + K_{12}, \\
B_{14} &= K_1 - K_2 + K_3 + K_4 - K_5 + K_6 - K_7 - K_8 + K_9 - K_{10} - K_{11} + K_{12}, \\
B_{15} &= -K_1 + K_2 + K_3 + K_4 + K_5 - K_6 - K_7 - K_8 - K_9 - K_{10} + K_{11} + K_{12}, \\
B_{16} &= K_1 + K_2 + K_3 + K_4 - K_5 - K_6 - K_7 - K_8 + K_9 + K_{10} + K_{11} + K_{12}.
\end{aligned} \tag{4.6}$$

A partir dos resultados acima, pode-se determinar o diagrama de fases e os expoentes associados ao sistema, que são mostrados a seguir.

### 4.3 Resultados

Na análise abaixo, utilizamos como distribuições iniciais para o procedimento do grupo de renormalização, a distribuição de probabilidades gaussiana,

$$P(J_{ij}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi J^2}} \exp\left[-\frac{(J_{ij} - J_0)^2}{2J^2}\right], \tag{4.7}$$

assim como a distribuição bimodal,

$$P(J_{ij}) = p\delta(J_{ij} - J) + (1 - p)\delta(J_{ij} + J). \tag{4.8}$$

O motivo para se considerar as duas distribuições acima deve-se ao fato de que estas são as distribuições mais utilizadas na literatura para o estudo teórico de sistemas do tipo

vidros de spins, de maneira que os resultados obtidos neste trabalho sejam comparados com aqueles obtidos por outros métodos.

A receita utilizada para a obtenção dos pontos foi a seguinte. Primeiro, consideramos um banco de números (de tamanho  $M$ ) gerados aleatoriamente segundo a distribuição gaussiana equação (4.7), ou a distribuição bimodal na equação (4.8). Os valores dos momentos desta distribuição inicial serão fornecidos de acordo com os dados de entrada da execução do programa computacional. No caso da distribuição bimodal o dado de entrada foi a probabilidade  $p$ , enquanto que para a distribuição gaussiana estes dados foram a média e a largura; o outro dado de entrada importante é a temperatura para ambas as distribuições. No caso do programa para o cálculo de parâmetros críticos à temperatura zero, não utiliza-se a temperatura como dado de entrada. A seguir, escolhemos aleatoriamente 12 números deste banco de dados e associa-os aos valores dos  $K'_i$ s, mostrados na figura 4.2, para obter o valor de  $K'$  dado pela equação (4.4). O processo é continuado  $M$  vezes, até um novo banco de dados, representando uma nova distribuição de probabilidades, ser gerado. Este é o primeiro passo do grupo de renormalização na rede. O processo é continuado por vários passos (normalmente até o trigésimo passo) do grupo de renormalização, sempre escolhendo aleatoriamente os valores dos  $K'_i$ s no banco de dados do passo anterior e monitorando os comportamentos dos valores dos momentos da distribuição gerada em cada passo. A partir desta receita, é possível descobrir em qual fase o sistema se encontra, segundo a temperatura e os valores dos momentos iniciais, observando como a distribuição se comportará de acordo com as definições dos atratores dados nas equações (3.23) a (3.25).

Na determinação dos diagramas de fases, precisou-se descobrir os pontos críticos de acordo com os dados de entrada. Geralmente, mantínhamos fixos a probabilidade (para a distribuição bimodal) ou a média e a largura (para a distribuição gaussiana) e variávamos a temperatura até que os momentos das respectivas distribuições geradas não apresentassem grandes variações nos passos de ordem mais baixa. Para o caso da fronteira crítica vidro de spins/ferromagnética, fixamos a temperatura e variávamos a probabilidade ou a média e a largura.

Os pontos determinados numericamente através do procedimento descrito acima, com

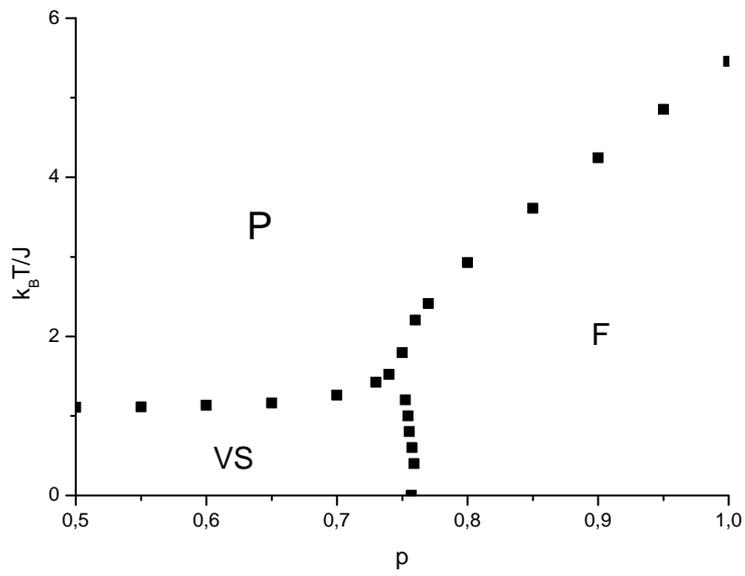


Figura 4.3: Pontos obtidos para a geração do diagrama de fases do vidro de spins com a distribuição bimodal, utilizando o procedimento numérico descrito.

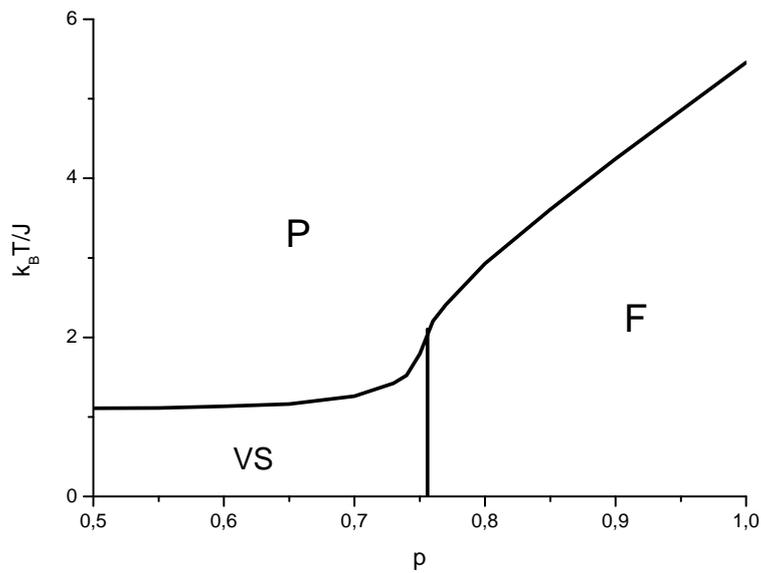


Figura 4.4: Diagrama de fases obtido a partir da distribuição bimodal para os acoplamentos, utilizando um banco de números com 100 mil pontos no procedimento de grupo de renormalização.

o propósito de se obter o diagrama de fases para o vidro de spins com a distribuição bimodal são exibidos na figura 4.3. O diagrama de fases correspondente, obtido a partir de linhas intermediárias entre tais pontos é mostrado na figura 4.4, representando a temperatura escalada  $\frac{k_B T}{J}$  em função da probabilidade  $p$ . A nomenclatura utilizada para as fases corresponde às regiões em que o sistema se encontra nas probabilidades e temperaturas, com  $P$  correspondendo à fase paramagnética,  $F$  correspondendo à fase ferromagnética e  $VS$  correspondendo à fase de vidro de spins. A razão de representar o diagrama no intervalo  $0,5 \leq p \leq 1$  deve-se ao fato de que a parte  $0 \leq p \leq 0,5$  é simétrica ao diagrama exibido na figura 4.4.

De maneira análoga, exibimos os pontos determinados numericamente para o caso da distribuição gaussiana na figura 4.5, enquanto que o diagrama de fases correspondente, obtido a partir de linhas intermediárias entre tais pontos é mostrado na figura 4.6, representando a temperatura escalada  $\frac{k_B T}{J}$  em função de  $\frac{J_0}{J}$ . Os intervalos utilizados foram de  $0 \leq \frac{J_0}{J} \leq 1$  e  $0 \leq \frac{k_B T}{J} \leq 6$ . As letras utilizadas para denotar as fases no diagrama são as mesmas que as da distribuição bimodal.

Um fato importante a ser mencionado refere-se à representação da fronteira separando as fases de vidro de spins e ferromagnética nos diagramas de fases das duas distribuições. Para se tratar os pontos nessa região, utilizamos um procedimento para se tratar os problemas numéricos nessa região de baixa temperatura. Porém, os pontos obtidos nessa região não formaram uma curva suave devido a dificuldades numéricas em baixas temperaturas, e assim, os pontos dessa fronteira, foram representados fazendo-se uma média entre os pontos obtidos e o ponto de temperatura zero. Por conta destas dificuldades, é possível que a fronteira entre as fases vidro de spins e ferromagnética não seja uma reta vertical como mostrado nos diagramas de fases das figuras 4.4 e 4.6, mas sim curvas suavemente inclinadas com derivadas negativas em temperatura nula. O ponto de temperatura zero foi calculado separadamente dos demais pontos devido às suas peculiaridades; para o cálculo deste ponto foi considerado na equação de recorrência (4.4) apenas a diferença entre os valores máximos,

$$J' = \frac{1}{2}(C_{\max} - D_{\max}), \quad (4.9)$$

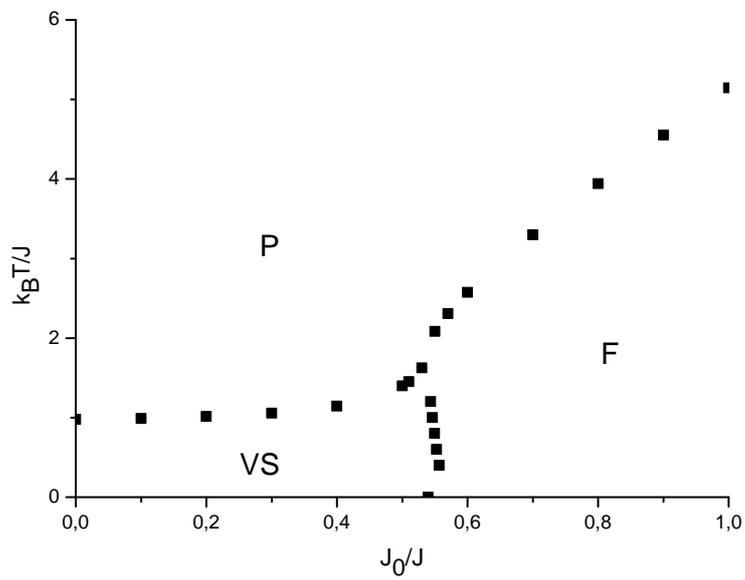


Figura 4.5: Pontos obtidos para a geração do diagrama de fases do vidro de spins com a distribuição gaussiana, utilizando o procedimento numérico descrito.

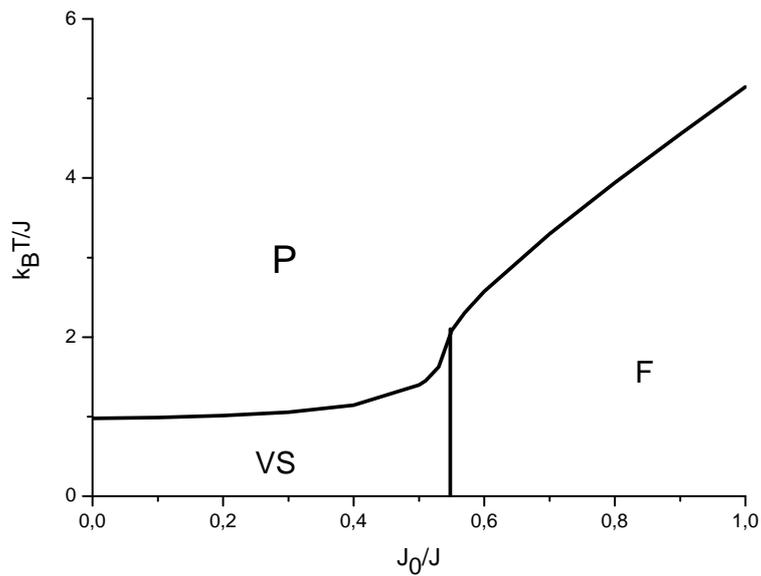


Figura 4.6: Diagrama de fases obtido a partir da distribuição gaussiana para os acoplamentos, utilizando um banco de números com 100 mil pontos no procedimento de grupo de renormalização.

onde

$$C_{\max} = \max(C_1, C_2, \dots, C_{16}), \quad C_i = \lim_{T \rightarrow 0} (k_B T) A_i \quad \text{e} \quad (4.10)$$

$$D_{\max} = \max(D_1, D_2, \dots, D_{16}), \quad D_i = \lim_{T \rightarrow 0} (k_B T) B_i \quad (i = 1, 2, \dots, 16). \quad (4.11)$$

Nas figuras 4.4 e 4.6 são exibidos os diagramas de fases para os bancos de números com 100 mil pontos; verificamos que diagramas de fases para bancos maiores são muito próximos aos exibidos acima. Para se certificar disto e checar a convergência do método empregado, calculamos a temperatura crítica em  $p = 0,5$  (distribuição bimodal) e  $J_0 = 0$  (distribuição gaussiana) para bancos de números de 50, 100, 200, 400 e 800 mil pontos. Os resultados são  $\frac{k_B T_C}{J} = 1,111 \pm 0,003$  (distribuição bimodal) e  $\frac{k_B T_C}{J} = 0,983 \pm 0,005$  (distribuição gaussiana). Nas figuras 4.7 e 4.8 ilustramos a evolução das larguras com o passo da iteração de grupo de renormalização  $n$ , considerando como distribuições iniciais a bimodal e a gaussiana, respectivamente, para o caso de bancos de números com 100 mil pontos, em diversas temperaturas nas proximidades destas temperaturas críticas. Comparando-se as temperaturas críticas obtidas neste trabalho com aquelas do trabalho recente de simulações de Monte Carlo de H. G. Katzgraber, M. Körner e A. P. Young [17], para o vidro de spins de Ising na rede cúbica, que fornecem os valores de  $1,120 \pm 0,004$  para a distribuição bimodal e  $0,951 \pm 0,009$  para a distribuição gaussiana, tem-se diferenças até a segunda casa decimal de 1% e 3%, respectivamente. Aqui, é oportuno dizer que determinamos o ponto multicrítico a partir do encontro das fronteiras das regiões nos diagramas de fase. Para isso, fizemos estimativas de pontos o mais próximo possível do ponto multicrítico e depois unimos as fronteiras, devido à dificuldade numérica de lidar com o ponto em questão.

Agora, introduziremos o conceito do expoente de rigidez (“stiffness”) que será denotado por  $y$ . O mesmo é definido em temperatura nula, sendo diretamente relacionado à fase de baixa temperatura, governando o comportamento das interações sob mudanças de escala [50]. Tem-se que para um  $y$  positivo (negativo) o sistema escala para acoplamentos fortes (fracos), característico de uma fase de vidro de spins (paramagnética) em baixas temperaturas. Na verdade, espera-se que  $y < 0$  para  $d < d_C$  e  $y > 0$  para  $d > d_C$ . O expoente de rigidez é obtido a partir da relação  $J'(L) \sim J L^y$ , que se observa em tempera-

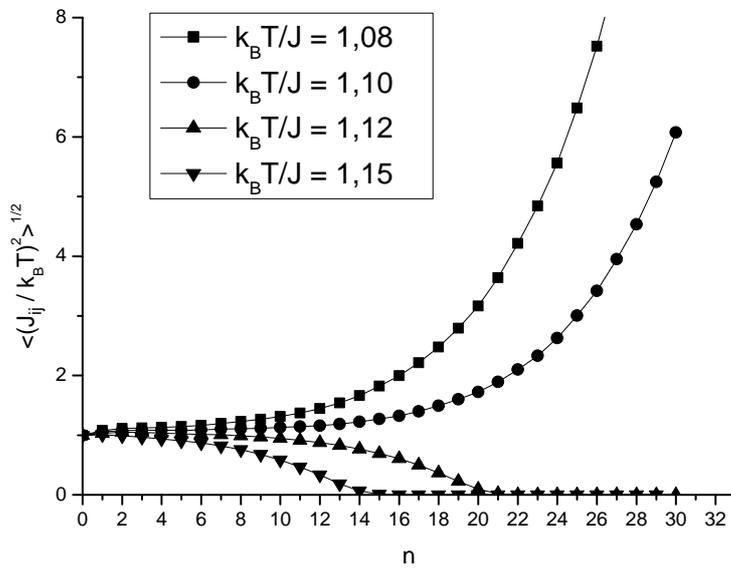


Figura 4.7: Evolução da largura da distribuição versus o passo da renormalização  $n$ , para uma distribuição bimodal simétrica ( $p = 0,5$ ) em  $n = 0$ , para diversas temperaturas em torno da temperatura crítica.

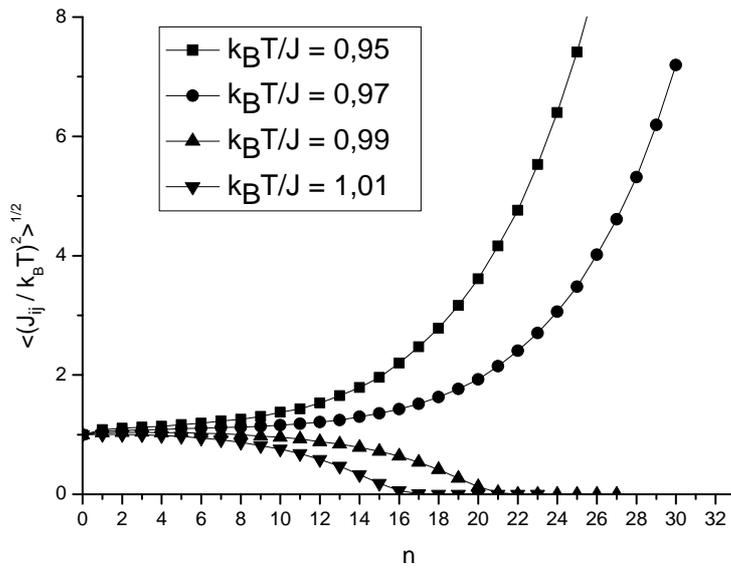


Figura 4.8: Evolução da largura da distribuição versus o passo da renormalização  $n$ , para uma distribuição gaussiana centrada ( $J_0 = 0$ ) em  $n = 0$ , para diversas temperaturas em torno da temperatura crítica.

tura nula, onde  $L$  é o tamanho da rede. Aqui tem-se que  $J'(L) = \left[ \langle (J'_{ij})^2 \rangle - \langle J'_{ij} \rangle^2 \right]^{1/2}$ ,  $J = \left[ \langle (J_{ij})^2 \rangle - \langle J_{ij} \rangle^2 \right]^{1/2}$  e  $L = b^n$ , onde  $b$  é o fator de escala ( $b = 2$  no presente caso) e  $n$  representa o passo do procedimento de grupo de renormalização. Realizamos o cálculo do expoente de rigidez  $y$  para as duas distribuições para a fase de vidro de spins a temperatura nula. Para determinar o valor de  $y$  [51], considera-se a inclinação  $\theta$  do gráfico representando  $-\ln J$  em função dos passos de renormalização, onde os  $J$ 's serão dados em cada passo da renormalização. Obtida a inclinação, utiliza-se a forma abaixo para se obter o expoente  $y$ ,

$$\theta = -y \ln b \implies y = -\frac{\theta}{\ln b}. \quad (4.12)$$

Os valores estimados foram  $y = 0,297 \pm 0,003$  para a distribuição bimodal e de  $y = 0,299 \pm 0,002$  para a distribuição gaussiana, onde utilizamos as seguintes probabilidades  $p = 0,5$ ,  $p = 0,6$  e  $p = 0,7$  para a distribuição bimodal e  $J_0/J = 0$ ,  $J_0/J = 0,2$  e  $J_0/J = 0,4$  para a distribuição gaussiana. Os bancos de números utilizados foram de 50 e 100 mil pontos.

Agora, para o cálculo do expoente  $\nu$  na fronteira crítica paramagnética/vidro de spins, usamos o seguinte procedimento [52],

- 1º Passo: Determinar a temperatura crítica  $T_C$  associada com a distribuição fixa.
- 2º Passo: Considerar duas temperaturas  $T_1$  e  $T_2$  ( $T_1 > T_2$ ) levemente abaixo de  $T_C$ , ou seja, ambas na fase de vidro de spins. Assim, as temperaturas a serem utilizadas serão  $T_1 = T_C(1 - a)$  e  $T_2 = T_1(1 - \delta T)$ , onde  $a$  e  $\delta T$  são pequenas constantes (tipicamente da ordem de  $10^{-2}$  e  $10^{-3}$ , respectivamente).
- 3º Passo: A partir daí segue-se os passos do procedimento de grupo de renormalização obtendo as larguras associadas à temperatura  $T_2$  em cada passo, as quais serão levemente maiores do que aquelas da temperatura  $T_1$ ; a partir daí, calcula-se a diferença  $\Delta_n$  entre estas larguras em cada passo  $n$ .
- 4º Passo: O expoente  $\nu$  é calculado em cada passo  $n$  da iteração através da fórmula,

$$\nu_n = \frac{\ln 2}{\ln(\Delta_{n+1}/\Delta_n)}. \quad (4.13)$$

O valor de  $\nu$  irá convergir após algumas iterações.

Na realização do cálculo, observamos que o valor de  $\nu$  apresentava grandes flutuações à medida que os passos do procedimento de renormalização aumentavam (geralmente a partir da 13<sup>a</sup> iteração); levando em conta este fato, consideramos o intervalo  $1 \leq n \leq 12$  para o cálculo do expoente  $\nu$ . Neste cálculo, tomamos três valores diferentes para  $a$  (0,01; 0,02 e 0,05), com os bancos de números de 50, 100 e 200 mil pontos, assim como valores para  $\delta T < 10^{-3}$ , e fizemos uma média do valor de  $\nu$ , considerando as estimativas obtidas para diferentes valores de  $p$  ( $p = 0,5$ ;  $p = 0,6$  e  $p = 0,7$ ) e  $J_0/J$  ( $J_0/J = 0$ ;  $J_0/J = 0,1$ ;  $J_0/J = 0,2$ ;  $J_0/J = 0,3$  e  $J_0/J = 0,4$ ) para as distribuições consideradas. Os valores médios de  $\nu$  estimados correspondem a  $\nu = 2,93 \pm 0,30$  (distribuição bimodal) e  $\nu = 3,11 \pm 0,25$  (distribuição gaussiana), os quais apresentam discrepâncias com relação aos valores encontrados na referência [17],  $\nu = 2,39 \pm 0,05$  (distribuição bimodal) e  $\nu = 2,44 \pm 0,09$  (distribuição gaussiana), conforme calculados abaixo. Utilizando a expressão para o cálculo destas discrepâncias relativas,  $|\nu_{pt} - \nu_{ref}|/\nu_{pt}$ , onde  $\nu_{pt}$  corresponde ao valor de  $\nu$  no presente trabalho e  $\nu_{ref}$  ao valor de  $\nu$  na referência [17], obtivemos que as discrepâncias relativas no expoente  $\nu$  para as distribuições bimodal e gaussiana são 18% e 22%, respectivamente. Considerando a universalidade dos resultados deste trabalho e aqueles obtidos para a rede cúbica na referência [17], os valores médios das estimativas para as duas distribuições nos levam a  $3,02 \pm 0,38$  (presente trabalho) e  $2,42 \pm 0,11$  (referência [17]). A discrepância relativa é de 20%.

# Capítulo 5

## Conclusão

Neste trabalho, estudamos as propriedades críticas do vidro de spins de Ising com interações entre primeiros vizinhos na rede hierárquica da família ponte de Wheatstone com dimensão fractal  $D = 3,58$ . O objetivo foi obter valores das temperaturas críticas próximos ao da rede cúbica, já que esta rede hierárquica representa uma aproximação da rede cúbica. Além disso, objetivamos calcular também os valores do expoente de rigidez e do expoente crítico  $\nu$ .

No capítulo 1, fizemos uma introdução ao trabalho realizado mostrando a importância do estudo de sistemas de vidros de spins, assim como a relevância da realização do trabalho. Primeiro, efetuamos uma breve discussão sobre sistemas teóricos desordenados, ressaltando a sua importância para uma boa compreensão dos sistemas reais. A seguir, discutimos os vidros de spins começando com suas características experimentais e terminando com o modelo de Edwards-Anderson e a solução de campo médio, através do modelo de Sherrington-Kirkpatrick e a solução de Parisi. Depois, fizemos uma discussão sobre os principais resultados para os sistemas com interações de curto alcance mostrando alguns de seus principais resultados. Para finalizar, mostramos a organização da dissertação ao longo do restante da mesma.

No capítulo 2, efetuamos uma revisão sobre os fenômenos críticos, mostrando, primeiramente, uma rápida introdução histórica sobre a era clássica dos fenômenos críticos e os seus principais aspectos. Depois, apresentamos os principais aspectos da era moderna, começando com os expoentes críticos, seguidos das hipóteses de escalas de Widom e

Kadanoff. Em seguida, argumentamos como a teoria do grupo de renormalização forneceu uma base matemática sólida para a hipótese de escala e fizemos uma aplicação do grupo de renormalização para o ferromagneto de Ising nas redes unidimensional e bidimensional. No final deste capítulo, introduzimos as redes hierárquicas, onde mostramos as suas principais características e fizemos a aplicação do grupo de renormalização para um ferromagneto de Ising na rede hierárquica do tipo diamante, na qual o mesmo é exato.

No capítulo 3, introduzimos os conceitos principais de sistemas do tipo vidros de spins. O capítulo iniciou-se mostrando as principais características teóricas e experimentais dos vidros de spins. Em seguida, introduzimos um método importante utilizado para o cálculo de médias temperadas, denominado método das réplicas. Após, definimos o modelo de Edwards-Anderson, que consiste em um modelo de vidro de spins com interações de curto alcance. Logo depois, apresentamos a teoria de campo de médio através do modelo de Sherrington-Kirkpatrick, com a solução de simetria entre réplicas, assim como a parametrização proposta por Parisi. Para finalizar, fizemos uma rápida introdução à aplicação do grupo de renormalização aos vidros de spins e a descrição do procedimento numérico utilizado no trabalho.

No capítulo 4, apresentamos o modelo, a técnica e os resultados obtidos no estudo do vidro de spins de Ising com interações entre primeiros vizinhos na rede hierárquica do análogo tridimensional da ponte de Wheatstone. Primeiramente, definimos a rede hierárquica, onde calculamos a relação de recorrência para o estudo. A seguir, mostramos os diagramas de fases para as distribuições de probabilidades gaussianas e bimodais. Constatamos uma similaridade qualitativa muito grande entre os diagramas de fases das duas distribuições. Verificamos uma boa concordância para o expoente de rigidez nestas duas distribuições, dentro das barras de erros, o que sugere uma universalidade nesta grandeza. Deve ser ressaltado também, que o expoente de rigidez (para as duas distribuições) mostrou ser positivo, o que indica que a dimensão fractal da rede está acima da dimensão crítica inferior. Para os valores da temperatura crítica no caso de distribuições centradas, nossas estimativas ficaram muito próximas daquelas da referência [17] utilizada para comparação com este trabalho. As discrepâncias relativas foram de 1% e 3%, para as distribuições bimodal e gaussianas, respectivamente. Já no que diz respeito aos valo-

res para o expoente crítico  $\nu$ , obtivemos resultados idênticos para as duas distribuições, dentro das barras de erros, sugerindo uma universalidade nesta grandeza. Comparando nossas estimativas para o expoente  $\nu$  com os resultados da referência [17], as discrepâncias relativas foram da ordem de 20%. Estes resultados são mostrados na tabela abaixo.

Distribuição	Presente trabalho	Ref. [17]	Presente trabalho	Ref. [17]
	$k_B T_C / J$	$k_B T_C / J$	$\nu$	$\nu$
Bimodal	$1,111 \pm 0,003$	$1,120 \pm 0,004$	$2,93 \pm 0,30$	$2,39 \pm 0,05$
Gaussiana	$0,983 \pm 0,005$	$0,951 \pm 0,009$	$3,11 \pm 0,25$	$2,44 \pm 0,09$

Como perspectivas abertas pelo presente trabalho, podemos citar:

- o estudo de outras redes hierárquicas da família da ponte de Wheatstone;
- a investigação das propriedades críticas da rede hierárquica considerada neste trabalho utilizando outras distribuições de probabilidade para os acoplamentos;
- o estudo do vidro de spins acima na presença de um campo magnético, com o propósito de investigar a possibilidade de uma linha de Almeida-Thouless.

# Referências Bibliográficas

- [1] J. M. Ziman, *Models of Disorder* (Cambridge University Press, Cambridge, 1979).
- [2] K. Binder e A. P. Young, *Rev. Mod. Phys.* **58**, 801 (1986).
- [3] K. H. Fischer e J. A. Hertz, *Spin Glasses* (Cambridge Studies in Magnetism, Cambridge, 1993).
- [4] V. Dotsenko, *Introduction to the Replica Theory of Disordered Statistical Systems* (Cambridge University Press, Cambridge, 2005).
- [5] B. W. Southern e A. P. Young, *J. Phys. C* **10**, 2179 (1977).
- [6] E. Nogueira Jr., S. Coutinho, F. D. Nobre e E. M. F. Curado, *Physica A* **257**, 365 (1998).
- [7] E. Nogueira Jr., S. Coutinho, F. D. Nobre e E. M. F. Curado, *Physica A* **271**, 125 (1999).
- [8] W. McMillan, *Phys. Rev. B* **30**, 476 (1984).
- [9] W. McMillan, *Phys. Rev. B* **31**, 340 (1985).
- [10] A. J. Bray e M. A. Moore, *J. Phys. C* **17**, L463 (1984).
- [11] A. J. Bray e M. A. Moore, *Phys. Rev. B* **31**, 631 (1985).
- [12] A. J. Bray e M. A. Moore, *Heidelberg Colloquium on Glassy Dynamics (Lecture Notes in Physics 275)* Editores J. L. van Hemmen e I. Morgenstern (Springer, Berlim, 1987).

- [13] R. N. Bhatt e A. P. Young, *Phys. Rev. Lett.* **54**, 924 (1985).
- [14] R. N. Bhatt e A. P. Young, *Phys. Rev. B* **37**, 5606 (1988).
- [15] A. T. Ogielski e I. Morgenstern, *Phys. Rev. Lett.* **54**, 928 (1985).
- [16] N. Kawashima e A. P. Young, *Phys. Rev. B* **53**, R484 (1996).
- [17] H. Katzgraber, M. Körner e A. P. Young, *Phys. Rev. B.* **73**, 224432 (2006).
- [18] R. Singh e S. Chakravarty, *Phys. Rev. Lett.* **57**, 245 (1986).
- [19] L. Klein, J. Adler, A. Aharony, A. B. Harris e Y. Meir, *Phys. Rev. B* **43**, 11249 (1991).
- [20] C. Tsallis e A. C. N. Magalhães, *Phys. Rep.* **268**, 305 (1996).
- [21] H. E. Stanley, *Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena* (Oxford University Press, Nova Iorque, 1971).
- [22] L. D. Landau e E. M. Lifshitz, *Statistical Physics*. 3ª edição, parte 1 (Butterworth Heinemann, Oxford, 1980).
- [23] L. Onsager, *Phys. Rev.* **65**, 117 (1944).
- [24] E. A. Guggenheim, *J. Chem. Phys.* **13**, 253 (1945).
- [25] B. Widom, *J. Chem. Phys.* **43**, 3898 (1965).
- [26] L. P. Kadanoff, *Physics* **2**, 263 (1966).
- [27] K. Wilson. *Phys. Rev.* **B4**, 3174 1971.
- [28] N. Goldenfeld, *Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena (Frontiers in Physics, 85)*. (Westview Press, Boulder, 1992).
- [29] J. M. Yeomans, *Statistical Mechanics of Phase Transitions* (Oxford Science Publications, Nova Iorque, 1992).

- [30] L. E. Reichl, *A Modern Course in Statistical Physics*, 2ª edição (Wiley-Interscience, Nova Iorque, 1998).
- [31] R. K. Pathria, *Statistical Physics*, 2ª edição (Elsevier, Cornwall, 1996).
- [32] S. R. A. Salinas, *Introdução à Física Estatística* (EdUsp, São Paulo, 1999).
- [33] J. R. Melrose, *J. Phys. A* **16**, 1041 (1983).
- [34] J. R. Melrose, *J. Phys. A* **16**, 3077 (1983).
- [35] F. T. Lee e M. C. Huang, *Chinese Journal of Physics* **4**, 398 (1999).
- [36] R. B. Griffiths e M. Kaufman, *Phys. Rev. B.* **9**, 5022 (1982).
- [37] Y. Gefen, B. B. Mandelbrot e A. Aharony, *Phys. Rev. Lett* **45**, 855 (1980).
- [38] B. Hu, *Phys. Rev. Lett* **21**, 2316 (1985).
- [39] M. Plischke e B. Bergensen, *Equilibrium Statistical Physics* (World Scientific, Singapura, 2006).
- [40] W. A. M. Morgado, S. Coutinho, E. M. F. Curado, *J. Stat. Phys.* Vol. **61**, 913 (1990).
- [41] W. A. M. Morgado, S. Coutinho, E. M. F. Curado, *Braz. J. Phys.* Vol. **21**, 247 (1991).
- [42] M. A. Ruderman e C. Kittel *Phys. Rev.* **96**, 99 (1954).
- [43] T. Kasuya. *Prog. Theor. Phys.* **16**, 45 (1956).
- [44] K. Yosida. *Phys. Rev.* **106**, 895 (1957).
- [45] S. F. Edwards e P. W. Anderson, *J. Phys. F* **5**, 965 (1975).
- [46] D. Sherrington e S. Kirkpatrick, *Phys. Rev. Lett.* **35**, 1972 (1975).
- [47] J. R. L. de Almeida e D. J. Thouless, *J. Phys. A* **11**, 983 (1978).
- [48] G. Parisi, *Phys. Rev. Lett.* **43**, 1754 (1979).

- [49] A. P. Young e R. B. Stinchcombe, *J. Phys. C* **9**, 4419 (1976).
- [50] F. D. Nobre, *Physica A* **280**, 456 (2000).
- [51] F. D. Nobre, *Phys. Lett. A* **250**, 163 (1998).
- [52] J. Machta e M. S. Cao, *J. Phys. A* **25**, 529 (1992).