

Dénis da Mata Oliveira

Estudo de excitações tipo strings em gelos de
spin artificiais através de cadeias lineares de
dipolos magnéticos

Belo Horizonte
2014

Dénis da Mata Oliveira

Estudo de excitações tipo strings em gelos de spin artificiais através de cadeias lineares de dipolos magnéticos

Dissertação apresentada à Universidade Federal de Minas Gerais como requisito parcial para a obtenção do grau de Mestre em Física.

Orientador: Lucas Alvares da Silva Mól

Belo Horizonte
2014

Agradecimentos

Ao orientador, pela proposta de trabalho e pela orientação.

À universidade pelo excelente ambiente de trabalho.

Aos colegas de pós-graduação Alexandre Aquino Soares e Marcelo Guimarães pelas discussões e orientações.

Aos meus pais pelo apoio nas horas difíceis.

Ao CNPQ e à FAPEMIG pelo apoio financeiro.

“Com a simulação computacional um dia seremos capazes de acabar com a matança de ratos em laboratório.”

Resumo

Neste trabalho estudamos um sistema de dipolos magnéticos (spins) clássicos tipo Ising sobre a rede quadrada interagindo exclusivamente por interação magnética dipolar. Os spins são posicionados em sequência formando cadeias lineares (strings) sobre os elos da rede, paralelos ao plano desta. Nosso intuito é entender melhor o comportamento de excitações coletivas que se comportam como monopolos magnéticos nos gelos de spin artificiais, uma vez que estas se assemelham às cadeias estudadas neste trabalho. Observamos um comportamento muito rico destas estruturas, com presença de sinais de transições de fase e um comportamento não-trivial com o tamanho das cadeias. Apresentamos também alguns resultados para a rede hexagonal. Observamos que as propriedades de baixa temperatura na rede quadrada são determinadas por configurações que satisfazem uma regra de alternância na direção da caminhada, enquanto que na rede hexagonal a distância ponta-a-ponta mínima é o fator determinante.

Palavras-chave: gelos de spin artificiais, dipolos magnéticos tipo Ising, Caminhadas Auto-Excludentes.

Abstract

In this work we study a system of classical magnetic Ising-like dipoles (spins) on the square lattice interacting exclusively by magnetic dipolar interaction. The spins are positioned in sequence, forming linear chains on the lattice's links (strings), parallel to its plane, through self-avoiding walks. Our aim is to better understand the behavior of collective excitations that behave as magnetic monopoles in artificial spin ice systems, since they resemble the chains studied here. We observe a very rich behavior of these structures with the presence of signs of phase transitions and a non-trivial behavior with chain length. We also present some results for the hexagonal lattice. We observed that the low temperature properties of the square lattice are determined by configurations that satisfy a rule of alternation in the direction of the walk, while in the hexagonal lattice the minimum end-to-end distance is the key factor.

Keywords: artificial spin ice, magnetic dipoles, Ising-like, Self-Avoiding Walks.

Apresentação

Este trabalho de Mestrado pertence as subáreas da Física chamadas Física Computacional e Física da Matéria Condensada. Na Física da Matéria Condensada estamos interessados em sistemas de muitos corpos fortemente interagentes como sólidos e líquidos. Já na física computacional estamos interessados em extrair informações de um sistema físico através de experimentos virtuais feitos através de computadores. A física computacional é recorrente quando o problema físico em questão é difícil/inviável analiticamente ou experimentalmente.

Estes experimentos virtuais correspondem a sistemas idealizados de modo que nem sempre reproduzem fielmente a realidade. Sendo assim, o sistema físico considerado é um modelo e as informações obtidas a partir dele são aproximações da realidade.

O sistema físico abordado, apesar de ser pequeno (da ordem dos nanômetros), possui suas entidades fundamentais (pequenos ímãs) muito maiores do que o tamanho do átomo e, por isso, efeitos quânticos são desprezados, de modo que fazemos a aproximação semiclássica trocando os operadores por vetores e seguindo o tratamento da teoria eletromagnética clássica.

Por tratarmos de pequenos ímãs, da ordem dos nanômetros, o trabalho em questão pertence também a ciência do nanomagnetismo. A ciência do nanomagnetismo estuda corpos de tamanhos nanométricos depositados sobre uma matriz onde estes corpos interagem basicamente por interação magnética. O nanomagnetismo tem diversas aplicações, como em biologia e engenharia [24]. A aplicação do nanomagnetismo mais corriqueira no dia a dia das pessoas é na tecnologia de armazenamento de dados.

Estamos interessados em sistemas bidimensionais tipo Ising em que os spins estão paralelos ao plano e sobre os elos de uma rede. Os spins interagem exclusivamente por interação dipolar magnética devido ao momento magnético intrínseco das nanoilhas.

Inicialmente falaremos da origem dos Gelos de Spin (GS) e depois passamos para os Gelos de Spin Artificiais (GSA) que é o sistema bidimensional acima citado. O trabalho computacional e de análise de dados desta dissertação se concentrará somente sobre os GSA. Os GSA exibem propriedades de interesse à temperatura ambiente, diferente dos GS que exibem as propriedades de interesse só a temperaturas muito baixas [1]. Além disso, os GSA, por serem bidimensionais e da ordem dos nanômetros, permitem fácil visualização/domínio do sistema e manipulação das suas geometrias.

Nos GSA estudamos apenas estados de baixa energia correspondentes a giros dos spins, a partir do estado fundamental, em sequência, formando Caminhadas Auto-Excludentes (CAE's) (em inglês Self-Avoiding Walks (SAW's)). Esses formatos de sequências de spins girados são de particular interesse porque são simples, de baixa energia e espera-se que apresentem, nos seus extremos, quase-partículas semelhantes a monopolos magnéticos.

Nos GSA todas as conformações possíveis de um dado tamanho de string (sequência de spins girados) são geradas de modo que conhecemos todos os microestados do sistema. Assim os resultados aqui obtidos, dentro do modelo proposto, são exatos, ou seja, sem aproximações como é feito nos métodos de Monte Carlo.

Este trabalho se assemelha aos trabalhos da ciência das proteínas e polímeros que se baseiam em Caminhadas Auto-Excludentes [31, 21]. No caso das proteínas considera-se,

por exemplo, uma sequência de monômeros conectados, situados sobre os sítios da rede, ao invés de uma sequência de spins conectados situados sobre os elos da rede. Proteínas se movem continuamente (fora da rede) de modo que a rede constitui uma simplificação do problema. Os modelos de simulação de polímeros e proteínas mais familiares a esta dissertação são os dos homopolímeros e HP (hidrofóbico-polar). Um dos grandes desafios desta ciência é entender o enovelamento de proteínas e identificar as conformações de mais baixa energia.

Para o trabalho específico abordado foram utilizados conhecimentos de Mecânica Estatística [19], Termodinâmica e Programação de Computadores. Destas áreas do conhecimento a Programação de Computadores não é uma área específica da física mas é necessária pois a todo momento temos a necessidade de confeccionar programas para a realização das simulações.

Todo o trabalho de programação foi desenvolvido sobre duas linguagens de programação: Visual Basic, linguagem de referência, boa para programas que exigem visualização e; Fortran 90, linguagem de padrão científico adequada para cálculos matemáticos intensivos. Para análise de dados e plotagem de gráficos foi utilizado o Gnuplot.

Sendo esta uma dissertação de Mestrado, não estamos comprometidos em fazer uma descoberta de amplo impacto científico mas sim, boa parte das vezes, aprender as capacidades da técnica de pesquisa, aprofundar nosso conhecimento nas Ciências Físicas e melhorar a nossa capacidade de utilização de recursos computacionais.

A expectativa é que esta dissertação sirva de referência para estudantes da área e que possa suscitar novos estudos acerca deste tema.

Sumário

1	Gelos de Spin	1
1.1	Gelos de Spin Cristalinos	1
1.2	Gelos de Spin Artificiais (GSA)	5
1.3	Considerações Sobre o Formato das Excitações	10
1.4	Caminhadas Auto-Excludentes	11
2	Métodos Computacionais	13
2.1	Algumas Observações Sobre Programação de Computadores	13
2.2	Gerador de Caminhadas Auto-Excludentes	14
2.3	Explorando Simetria	16
2.4	CAE's com Interação	20
2.5	Strings na Rede	22
3	Análise de Dados	24
3.1	Energia e Degenerescência da Energia	24
3.2	Medidas Termodinâmicas	32
3.2.1	Rede Quadrada Strings RG	33
3.2.2	Rede Quadrada Strings CAE	40
3.2.3	Strings de 1 ^{os} Vizinhos Na Rede Quadrada	43
3.2.4	Rede Hexagonal	47
4	Conclusões	52
A	Algoritmo Gerador de Caminhas Auto-Excludentes	54
	Referências Bibliográficas	56

Capítulo 1

Gelos de Spin

1.1 Gelos de Spin Cristalinos (GS 3D)

Vários esforços já foram feitos no sentido de encontrar monopolos magnéticos, uma vez que as Teorias de Unificação (GUT) predizem a existência destas partículas [1], mas esta busca, até o momento, foi em vão. Apesar da inexistência dos monopolos magnéticos para partículas foi descoberto, mais recentemente, sistemas que se comportam como se contivessem monopolos magnéticos. Nesse caso, os monopolos magnéticos em questão são quase-partículas, já que correspondem a um comportamento coletivo do sistema que “imita” a presença de monopolos magnéticos. Este tipo de fenômeno, chamado de fenômeno emergente, ocorre em sistemas de muitos corpos fortemente interagentes onde as quase-partículas derivam da fracionalização de partículas fundamentais que compõem o sistema. A partir desta propriedade das quase-partículas é que Castelnovo e colaboradores decidiram investigar em 2008 [2] a existência de quase-partículas tipo monopolos magnéticos em um sistema de dipolos magnéticos conhecidos como gelo de spin. No caso, as entidades fundamentais que compõem o sistema são dipolos magnéticos, partículas, que se fracionam em monopolos magnéticos, quase-partículas.

A interação entre os monopolos magnéticos é muito bem aproximada, nas circunstâncias investigadas [2], pelo potencial tipo Coulomb, o que torna a teoria acerca dessas cargas magnéticas mais simétrica com a teoria das cargas elétricas.

Os primeiros materiais em que foram detectados esses monopolos magnéticos [2] são os materiais cristalinos da forma $R_2M_2O_7$ (R é terra rara, M metal e O oxigênio) cujo os íons magnéticos R formam a rede pirocloro, que é, uma rede de tetraedros compartilhando seus vértices, conforme ilustra a *Fig. 1.1*. Destes materiais, os mais estudados são $Dy_2Ti_2O_7$ e $Ho_2Ti_2O_7$.

Na *Fig. 1.1* mostramos a rede pirocloro com a posição e orientação dos spins dos íons magnéticos, em que estes íons possuem spin com comportamento tipo Ising. Estes spins, que geram momentos magnéticos $\vec{\mu}_i = \mu\vec{S}_i$, são conhecidos interagir segundo o hamiltoniano

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j + D \sum_{i < j} \left[\frac{\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j}{|\vec{r}_{ij}|^3} - \frac{3(\vec{S}_i \cdot \vec{r}_{ij})(\vec{S}_j \cdot \vec{r}_{ij})}{|\vec{r}_{ij}|^5} \right], \quad (1.1)$$

onde o primeiro somatório se refere a interação ferromagnética de primeiros vizinhos e o segundo somatório à interação dipolar de longo alcance, com $D = \mu_0\mu^2/(4\pi a^3)$ sendo a

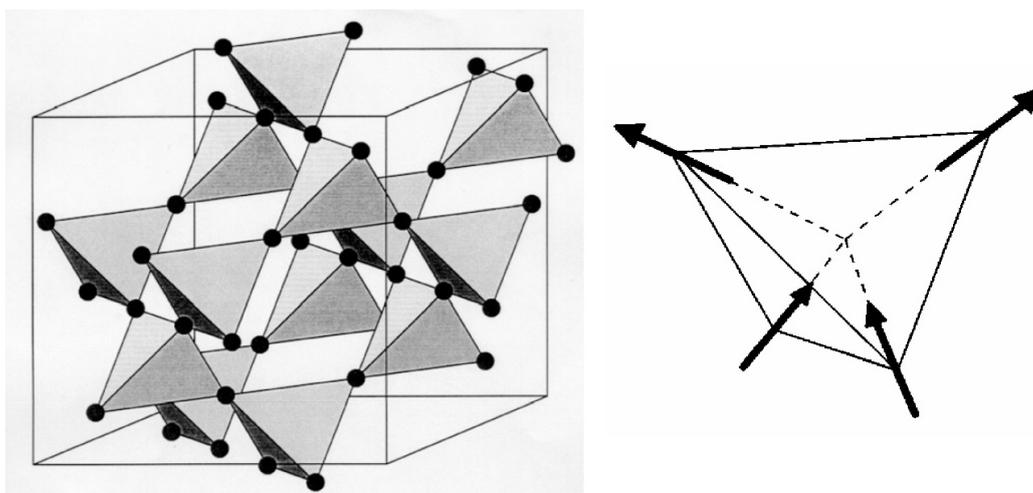


Fig. 1.1: Rede pirocloro formada pelos íons magnéticos terra rara (pontos na estrutura mostrada à esquerda) onde cada íon terra rara possui um spin (seta) direcionado ao longo do eixo que conecta os vértices ao centro dos tetraedros (como ilustrado à direita). Retirado de [6].

constante de acoplamento magnética.

O comportamento dos íons magnéticos representados por spins (setas) da *Fig. 1.1* é parecido com o comportamento dos vetores posição dos íons de hidrogênio da água no seu estado sólido (gelo). A molécula de água é muito estável, por isso mesmo na fase sólida os íons de hidrogênio, que também formam a rede pirocloro, com o oxigênio no centro dos tetraedros, tendem a ficar dois mais próximos do oxigênio e dois mais afastados. Da mesma maneira, para as configurações de mais baixa energia, os tetraedros dos íons terra rara, representados pela *Fig. 1.1*, tendem a ter dois spins apontando para dentro dos tetraedros e dois spins apontado para fora (regra do gelo 2in-2out). Além disso, na água, a posição dos íons de hidrogênio fica ao longo dos eixos que unem os centros dos tetraedros e no material $R_2M_2O_7$ os spins apontam ao longo desses mesmos eixos. Devido a essas semelhanças com o gelo da água esses materiais são chamados de gelos de spin. Esta semelhança está esquematizada na *Fig. 1.2*. As referências [1, 3, 4, 5] também contêm

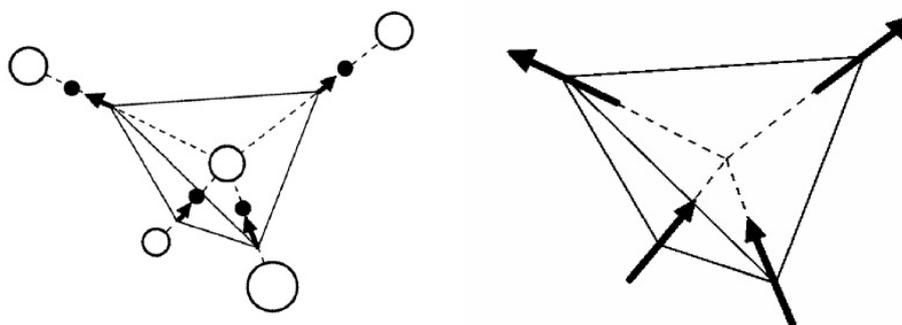


Fig. 1.2: Semelhanças entre gelo da água e gelo de spin. À esquerda a estrutura do gelo da água com as bolas preenchidas representando os átomos de hidrogênio e as abertas os de oxigênio. Retirado de [6].

uma abordagem didática sobre o assunto.

No caso dos gelos de spin é fácil ver porque a interação ferromagnética de primeiros vizinhos exige que os spins obedeam a regra do gelo para a configuração de menor energia. Interações dipolares de primeiros vizinhos também exigem que a regra do gelo seja obedecida para o estado de menor energia mas a interação dipolar é de longo alcance de modo que observamos experimentalmente que o estado de menor energia do sistema é aquele que obedece a regra do gelo (todos os tetraedros do sistema obedecendo a regra do gelo).

Nesses dois sistemas, gelo da água e gelo de spin, existem não só uma mas várias configurações que satisfazem a regra do gelo de modo que o estado de menor energia do sistema é degenerado.

A degenerescência do estado fundamental é devida à frustração na interação entre os spins (frustração geométrica). A título de exemplo sobre frustração geométrica vamos explicar um sistema bem simples tipo Ising com interação antiferromagnética onde essa frustração geométrica ocorre.

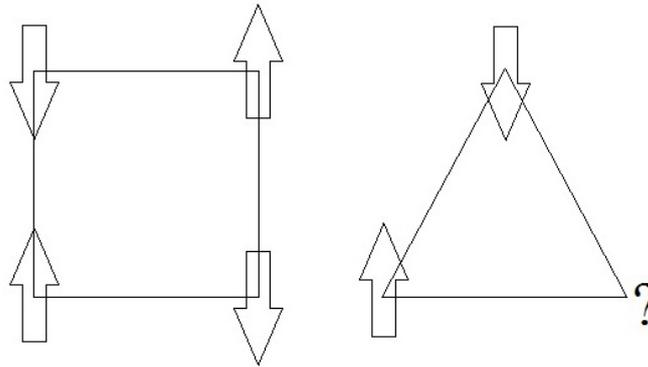


Fig. 1.3: Dois sistemas tipo Ising com interação antiferromagnética de primeiros vizinhos onde o sistema da direita é frustrado.

Considere os dois sistemas tipo Ising da *Fig. 1.3*. O estado de menor energia de cada sistema é aquele em que todos spins estão antiparalelos aos seus primeiros vizinhos. No quadrado todos os pares de primeiros vizinhos satisfazem esta condição mas no triângulo dois pares de interação spin-spin não podem ter suas energias minimizadas simultaneamente, de modo que a interação é frustrada e o sistema exibe mais possibilidades de estados fundamentais. No triângulo, as configurações de menor energia diferem entre si apenas por operações de rotação e inversão de sinal de todos os spins. Uma vez que estes diferentes estados estão ligados por operações de simetria presentes no sistema, não dizemos que estes levam a um estado fundamental degenerado, já que estas diferentes configurações correspondem a um mesmo estado microscópico do sistema, ligado aos demais por simetria. No entanto, o mesmo não ocorre quando consideramos uma rede triangular completa ao invés de um único triângulo conforme discutido acima. Nesta situação, a frustração geométrica presente na célula unitária - um único triângulo - leva ao aparecimento de inúmeros estados fundamentais não mais conectados pelas operações de simetria do sistema. A presença de estados fundamentais degenerados é, portanto, uma das principais características de sistemas sujeitos à frustração geométrica.

Essa mesma frustração geométrica é observada na rede pirocloro dos gelos de spin só

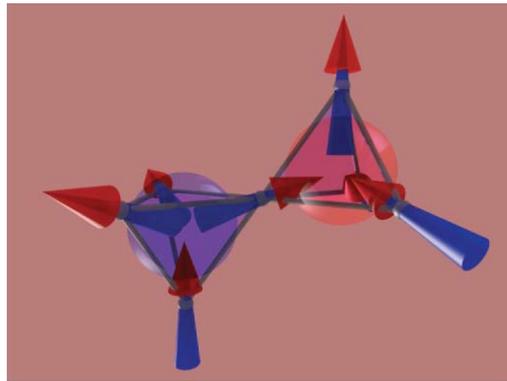


Fig. 1.4: Dois tetraedros adjacentes com um spin girado (spin entre os dois tetraedros). Tetraedros com 3in(out)-1out(in). Retirado de [2].

que em uma geometria diferente. Devido a essa frustração na interação o estado fundamental é degenerado o que impede o completo congelamento do sistema a temperatura nula. Isto corresponde a dizer que o sistema tem entropia residual, ou seja, entropia não-nula a temperatura nula (caso em que não se aplica o quarto postulodo da termodinâmica).

Sendo assim, o estado fundamental do gelo de spin pode ser obtido ao considerarmos uma regra local em que dois spins devem apontar para dentro e dois para fora de cada tetraedro. Para gerar um estado excitado do sistema giramos um único spin de modo que a regra do gelo deixa de valer para dois tetraedros adjacentes, como mostra a *Fig. 1.4*. Neste caso, se girarmos mais spins, exceto pelos já girados, de modo a formar um caminho, sem intersecções, de spins girados (chamados strings) em que os tetraedros intermediários voltem a obedecer a regra do gelo, a energia do sistema é bem aproximada por um po-

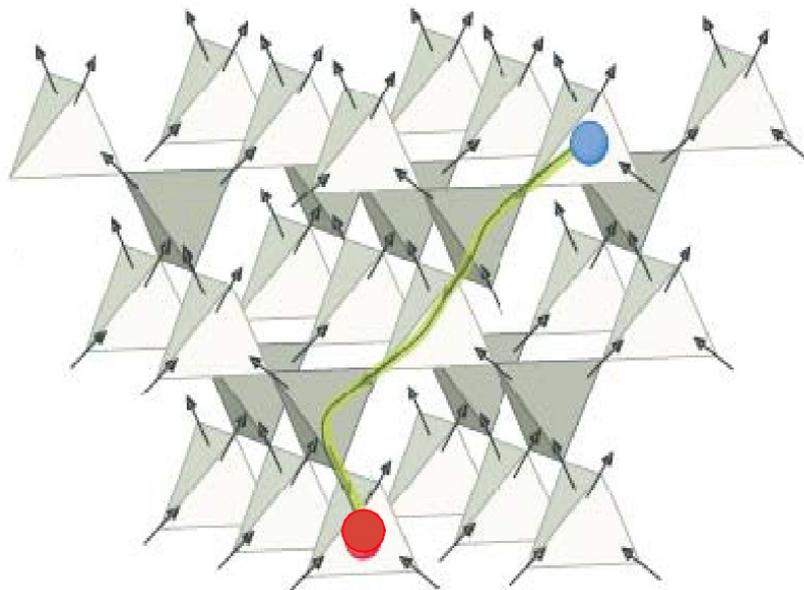


Fig. 1.5: String de spins girados dando origem a um par monopolo-antimonopolo de quase-partícula. Retirado de [7]

tencial tipo Coulomb com cargas magnéticas associadas aos extremos do string. Dessa maneira as características marcantes desses materiais gelos de spin são duas: frustração geométrica e presença de quase-partículas tipo monopolos magnéticos associados aos extremos dos strings.

Graças a frustração geométrica, que permite que o sistema assuma várias configurações sem alterar sua energia, os monopolos ficam livres para se mover pela rede de modo que a única energia necessária para separar dois monopolos é a energia para vencer a atração Coulombiana. Sendo a energia Coulombiana inversamente proporcional a distância é necessário uma energia finita para separar os monopolos a uma distância infinita. Por isso, os monopolos são ditos desconfinados. Isso difere dos materiais Gelos de Spin Artificiais, que serão estudados mais a frente, onde a geometria é não-frustrada (estado fundamental não-degenerado) e à medida que giramos mais spins (distanciamos mais os antimonopolos) existe um aumento na energia do string que é diretamente proporcional a quantidade de spins girados, que faz com seja necessário uma energia infinita para separar os monopolos a uma distância infinita. Por isso, os monopolos nos gelos de spin artificiais estudados são ditos confinados.

Mais detalhes acerca dos Gelos de Spin 3D não nos interessam pois o alvo de pesquisa desta dissertação serão os Gelos de Spin Artificiais. Com isso, afirmamos a existência de quase-partículas monopolares magnéticas em materiais Gelo de Spin e a liberdade de locomoção dessas partículas na rede devido à frustração geométrica.

1.2 Gelos de Spin Artificiais (GSA)

Investindo no sistema bidimensional imaginou-se criar um sistema que contivesse as mesmas propriedades dos Gelos de Spin 3D só que em duas dimensões. Este sistema, chamado Gelo de Spin Artificial, consiste de ilhas ferromagnéticas monodomínio de tamanho da ordem dos nanômetros, fabricadas litograficamente. Na *Fig. 1.6* mostramos uma

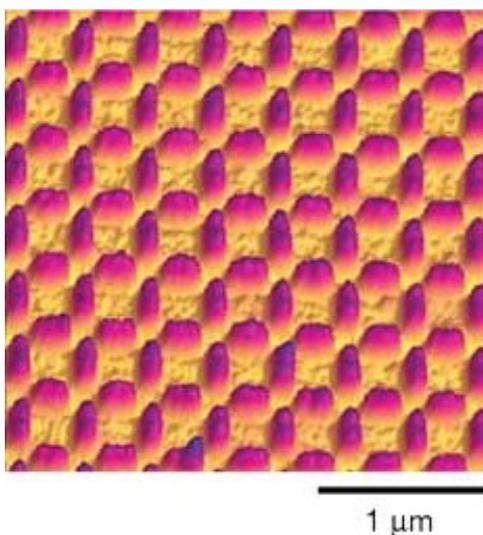


Fig. 1.6: Imagem obtida via AFM. Arranjo de ilhas (elos da rede quadrada) ferromagnéticas de permalloy (mistura de ferro e níquel) facilmente magnetizáveis e desmagnetizáveis. As ilhas são as partes mais escuras da imagem que são pequenas “montanhas”. Retirado de [8].

imagem deste sistema feita por microscopia de força atômica (AFM).

Em cada ilha existem vários átomos, cada um com um momento magnético intrínseco gerado pelo seu spin. As ilhas são criadas suficientemente pequenas de forma a serem monodomínios com temperatura de Curie da ordem de 540K [9]. Assim, o sistema pode ser analisado trocando, para cada ilha, todos os spins devido a cada átomo por um único spin, que é, a soma de todos os spins de uma ilha. Este spin total é considerado localizado no centro da ilha. Sendo assim, a estrutura interna das ilhas é desprezada (veja *Fig. 1.7*). Como as ilhas são grandes em relação ao tamanho atômico, efeitos quânticos são desprezados de modo que fazemos a aproximação semiclássica, que é, tratar os spins como vetores em vez de operadores, seguindo o tratamento da teoria eletromagnética clássica ao invés do tratamento da mecânica quântica.

Devido ao caráter monodomínio e à anisotropia de forma, os spins de cada ilha se comportam efetivamente como spins tipo Ising ao longo do comprimento maior das ilhas (veja a *Fig. 1.7*). A anisotropia de forma é a preferência que os spins tem em apontar em uma determinada direção. Um exemplo bastante simples de anisotropia de forma é o que ocorre na magnetização da agulha: é mais fácil magnetizar a agulha ao longo do seu comprimento maior do que ao longo de qualquer outra direção. Assim, os spins verticais assumem os valores $\pm(0, 1)$ e os spins horizontais $\pm(1, 0)$. Por ser um sistema tipo Ising fica implícito que nosso modelo não possui energia cinética.

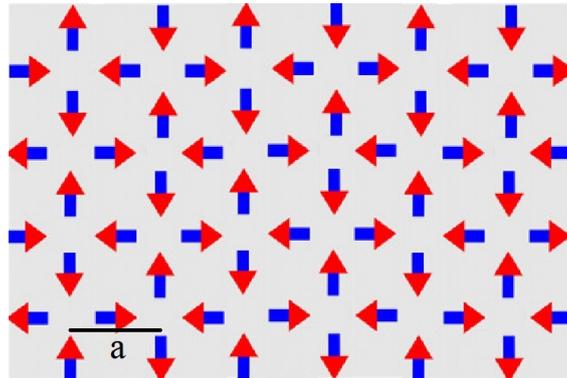


Fig. 1.7: Estado fundamental do GSA na rede quadrada¹. Todos os vértices obedecem a regra do gelo. Parâmetro de rede a . Retirado de [10].

Neste sistema, tanto a geometria, como as dimensões das ilhas e espaçamentos entre elas, é manipulável, diferente dos sistemas Gelos de Spin 3D. Sendo assim, o espaçamento entre as ilhas pode ser escolhido de tal modo que a interação de troca ferromagnética entre os spins possa ser desprezada. Assim, ficamos só com a contribuição da interação dipolar magnética de longo alcance para a energia do sistema, ou seja, só a segunda parcela da eq. 1.1

$$H = D \sum_{i < j} \left[\frac{\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j}{|\vec{r}_{ij}|^3} - \frac{3(\vec{S}_i \cdot \vec{r}_{ij})(\vec{S}_j \cdot \vec{r}_{ij})}{|\vec{r}_{ij}|^5} \right], \quad (1.2)$$

¹Este estado fundamental só veio a ser parcialmente obtido experimentalmente em 2011 [Morgan et. al., Nature Phys. 7, 75 (2011)]

onde $D = \mu_0 \mu^2 / (4\pi a^3)$. \vec{S}_i é o vetor unitário $\pm(0, 1)$ ou $\pm(1, 0)$ que deriva do momento magnético do spin $\vec{\mu} = \mu \vec{S}_i$, r_{ij} é a distância adimensional e a é o parâmetro de rede adotado (\vec{r}_{ij} é a distância dividida por a). Em [8], por exemplo, o autor usa $a = 320-880nm$. Essa energia de interação tende a repelir polos iguais em um mesmo vértice.

Este sistema é dito tipo Gelo de Spin porque a configuração do estado fundamental, assim como nos materiais Gelo de Spin 3D, tem cada vértice obedecendo a regra do gelo, *Fig. 1.7*, ou seja, em cada vértice temos dois spins entrando e dois spins saindo. Apesar da analogia com os Gelos de Spin 3D o estado fundamental deste sistema é não-degenerado. Uma evidência disso é a observação de que os primeiros spins adjacentes a um vértice (4 ao todo) não interagem igualmente entre si, diferente do que ocorre nos GS 3D em que todos os spins pertencentes a um mesmo tetraedro são mutuamente equidistantes.

Analisando somente os quatro spins adjacentes a um vértice, vemos que de fato a configuração que minimiza a energia é aquela que obedece a regra do gelo pois nessa configuração a concentração de polos de mesmo tipo no centro do vértice é mínima. As configurações de cada vértice podem ser divididas em 4 topologias, como mostrado na *Fig. 1.8*.

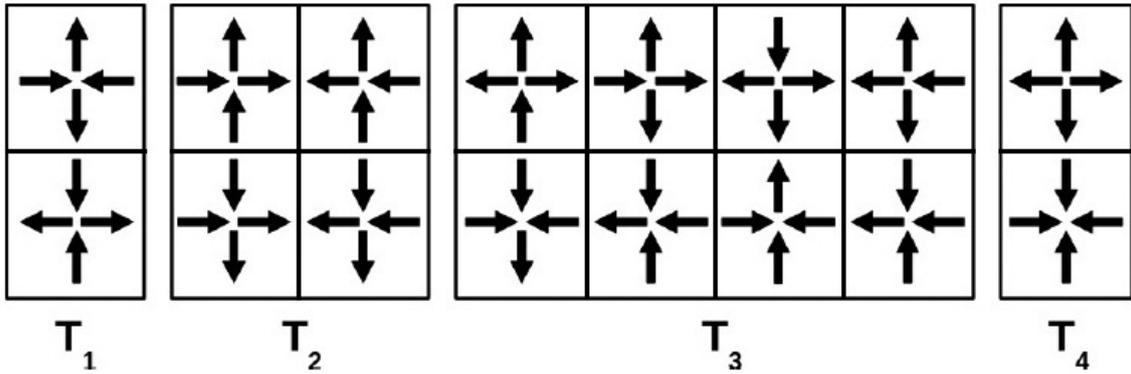


Fig. 1.8: As quatro diferentes topologias para um vértice. A energia aumenta da esquerda para a direita. T_1 obedece a regra do gelo e fornece o estado fundamental. T_2 obedece a regra do gelo mas é mais energético que T_1 . T_3 tem 3in(out)-1out(in). T_4 tem 4in(out)-0out(in). Retirado de [11].

Apesar de não haver degenerescência do estado fundamental, este sistema apresenta também quase-partículas monopolos magnéticos associados aos extremos das excitações tipo string, que é a propriedade que mais nos interessa neste sistema.

A vantagem desse sistema, em relação aos GS 3D, é que ele permite fácil visualização/manipulação da sua geometria, por ser bidimensional e de dimensões maiores que a do átomo (nanométrica). Além disso, ele apresenta estado tipo gelo de spin a temperatura ambiente [1], diferente dos materiais GS 3D que tem estado gelo de spin só a temperaturas muito baixas. Também podemos manipular as propriedades físicas deste sistema pela manipulação de suas características, como o parâmetro de rede e o momento de dipolo magnético das ilhas. Isso torna o estudo sobre estes sistemas mais factível.

Partindo do estado fundamental a inversão de um único spin da rede viola a regra do gelo para dois vértices adjacentes que passam a ter a topologia T_3 . Girando uma sequência de spins, como mostrado na *Fig. 1.9*, de modo que o caminho de spins girados não se auto-intercepte (Caminhada Auto-Excludente, ou simplesmente CAE), com os vértices intermediários do caminho obedecendo a regra do gelo, com topologia T_2 , formamos um

string. A energia do sistema E , subtraída pela energia do estado fundamental E_0 (energia antes de girar os spins) se comporta como se pudéssemos atribuir cargas magnéticas aos extremos do caminho, com energia potencial dada por [10].

$$E - E_0 = V(R, N) \approx \frac{-q}{R} + XN + c \quad (1.3)$$

A interação dessas cargas magnéticas é bem aproximada por um potencial tipo Coulomb, onde $-q$ é o produto das cargas magnéticas e R é a distância entre elas (distância ponta-a-ponta do string). Além dessa contribuição para a energia, também temos mais um termo proporcional à quantidade de spins girados e mais um termo constante c responsável pela criação de um par monopolo-antimonopolo [12] devido ao primeiro spin girado. Na *Fig. 1.9* fazemos uma ilustração desta situação.

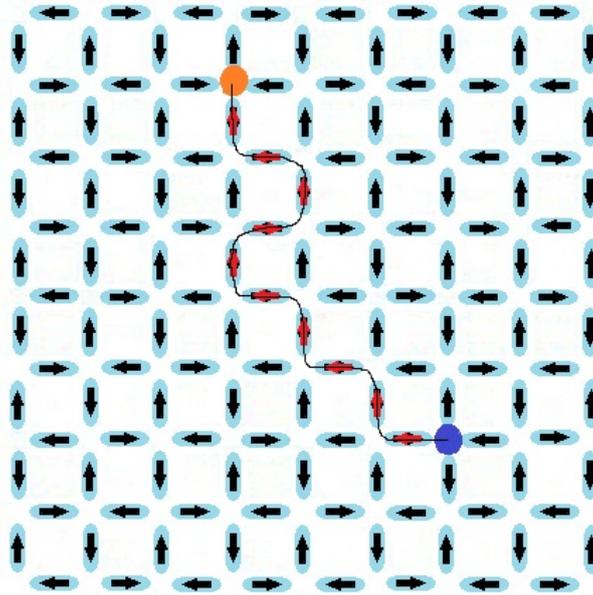


Fig. 1.9: Sequência de spins girados (string) formando uma Caminhada Auto-Excludente com vértices dos extremos obedecendo a topologia T_3 e intermediários obedecendo a topologia T_2 . Os spins girados de um vértice são sempre perpendiculares entre si (formando uma espécie de “escadinha”).

Como a energia cresce com o aumento do string, devido ao termo XN , os monopolos são ditos confinados. Quando $X = 0$ é necessária uma energia finita para distanciar os monopolos a uma distância infinita e neste caso os monopolos são desconfinados.

Apesar de não haver degenerescência do estado fundamental do GSA considerado aqui, é possível, através de métodos desenvolvidos nos últimos anos, degenerar o estado fundamental. Uma possibilidade é introduzir uma pequena diferença de altura entre as ilhas que estão alinhadas nas diferentes direções, conforme feito em [13]. Em [10], a frustração é obtida por um método que dispensa a alteração da dimensão do sistema, o que é mais viável experimentalmente. A degenerescência é obtida através da alteração do parâmetro de rede horizontal (ou vertical) do sistema. Assim, uma configuração de baixa energia que tem todos os seus vértices obedecendo a regra do gelo, segundo a topologia T_2 , assume a mesma energia que a configuração do estado fundamental do sistema, que passa por isso a

ter seu estado fundamental degenerado, o que possibilita que monopolos magnéticos sejam desconfinados, assim como nos materiais GS 3D.

A origem da contribuição linear XN pode ser vista pelo fato de que o interior do string é composto de topologias T_2 que são mais energéticas que as topologias do estado fundamental, T_1 . Assim, à medida que giramos mais spins criamos mais topologias T_2 , que são mais energéticas, o que exige que mais energia seja entregue ao sistema para aumentar o tamanho do string. Por causa da forma com que esses monopolos interagem (um termo tipo Coulomb mais um termo proporcional ao tamanho do string) esses monopolos são ditos monopolos de Nambu em analogia com os monopolos de Nambu da teoria eletrofraca [14].

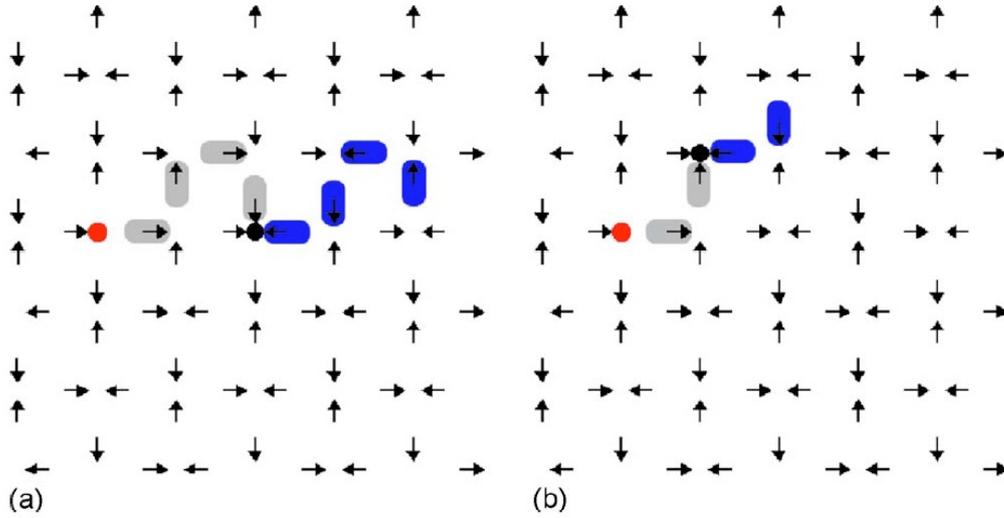


Fig. 1.10: Duas distintas Caminhas Auto-Excludentes. A CAE é formada pela unidade de repetição pintada em cinza. Os spins em cinza já foram girados e os em azul não. Retirado de [15].

Para os strings da classificação acima (vértices intermediários obedecendo a regra do gelo) os de menor energia em geral serão aqueles em formato de circuitos fechados. Nestes circuitos fechados todos os vértices obedecem à regra do gelo de modo que não existem extremos com topologias T_3 (vértices com $3in(out)-1out(in)$). Por isso, estes circuitos não apresentam monopolos magnéticos associados aos seus extremos e não são de interesse aqui.

As constantes q , X e c da eq. 1.3 podem variar com a forma das Caminhas Auto-Excludentes [15] (veja *Fig. 1.10*). Observa-se, contudo, que strings que tem a mesma unidade fundamental de repetição mantém os mesmos valores destas constantes. Aqui estaremos interessados em analisar os strings de forma geral, o que é exclusividade deste trabalho.

Nesta dissertação, resumiremos o estudo dos GSA somente às excitações formadas por giros sequenciais de spins formando uma única Caminhada Auto-Excludente (um único string) aberto (*Figs. 1.9 e 1.10*). Assim, o modelo de estado excitado analisado é mais realista que os tratados em estudos anteriores como em [15], contudo, não representa todas as excitações possíveis. Estaremos interessados em strings com vértices intermediários que obedecem ou não a regra do gelo. O segundo caso é útil para o estudo dos GSA supondo que ele possua estado fundamental degenerado. Detalhes sobre este segundo caso são

dados logo abaixo.

1.3 Considerações Sobre o Formato das Excitações

Partindo do estado fundamental, as excitações de menor energia formadas por CAE's abertas tem spins adjacentes perpendiculares entre si, isto é, a cada novo spin girado a direção da caminhada sobre a rede se altera. Desse modo, os vértices intermediários da sequência de spins girados obedecem a regra do gelo, cuja topologia é de baixa energia. Se gerarmos excitações sem obedecer a condição de alternância da direção dos spins a regra do gelo é violada e a excitação será mais complexa de modo que o ajuste segundo a eq. 1.3 não é válido.

Imaginemos que o estado fundamental seja degenerado, de modo que possamos construir CAE's de forma geral, isto é, de spins adjacentes não necessariamente perpendiculares entre si, mas que todos os vértices intermediários obedecem a regra do gelo de algum modo (2 topologias obedecem a regra do gelo). De fato, o nosso sistema em questão não tem estado fundamental degenerado e as topologias T_1 e T_2 tem contribuições diferentes para a energia mas supomos isto a fim de saber se, caso este sistema existisse, se ele seria de utilidade. Se ele se mostrar interessante, a partir daí, nos preocuparemos com a sua realização experimental.

Vejamus um caso que se assemelha com essa situação. Em [10] é obtida a degenerescência do estado fundamental através da deformação da rede (alteração do parâmetro de rede horizontal). Quando o estado fundamental se torna degenerado outras configurações que obedecem a regra do gelo passam a ter a mesma energia que a do estado fundamental da Fig. 1.7. A Fig. 1.11 mostra um desses outros estados que obedecem a regra do gelo, assim como o estado fundamental.

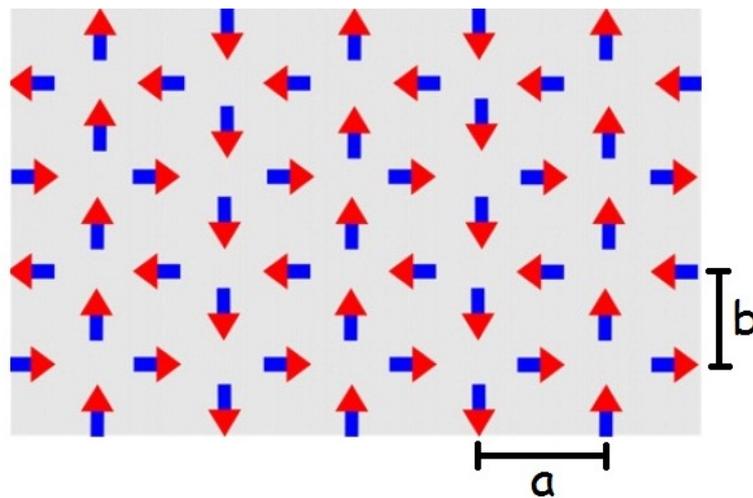


Fig. 1.11: Configuração onde todos os vértices obedecem a regra do gelo. Todos os vértices tem topologia T_2 . Quando o sistema é degenerado, isto é, $a/b \approx \sqrt{3}$, a energia desta configuração é a mesma que a da Fig. 1.7. Retirado de [10].

Para esta situação, podemos gerar excitações pelo giro sequencial de spins formando CAE's abertas com vértices intermediários obedecendo a regra do gelo e a CAE não precisa ter, necessariamente, seus spins adjacentes perpendiculares entre si, conforme ilustrado na

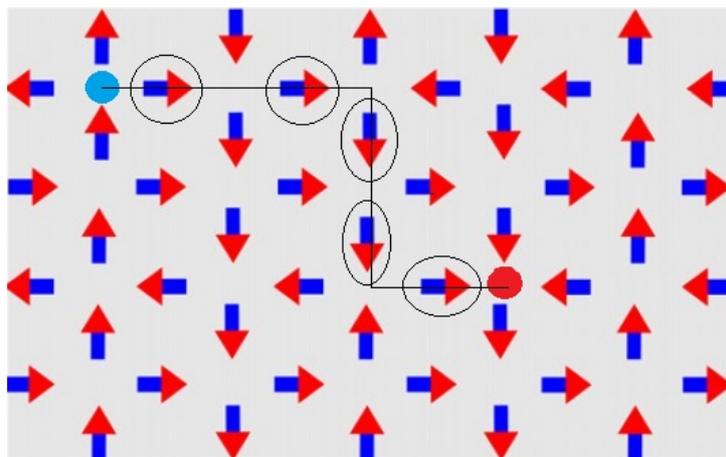
Fig. 1.12.

Fig. 1.12: Excitação com vértices intermediários obedecendo a regra do gelo. Spins adjacentes não são sempre perpendiculares entre si. Retirado e adaptado de [10].

Este tipo de situação pode ser estudada definindo, por exemplo, um modelo de vértices onde os 6 vértices que satisfazem a regra do gelo tenham a mesma contribuição para a energia, enquanto que as demais topologias são mais energéticas. Esse é um caso particular do conhecido modelo dos 16 vértices (sixteen vertex model).

No caso ilustrado na *Fig. 1.12* ainda há restrições sobre a forma da CAE. Pode ser observado na figura que certas direções não são permitidas para manter a regra do gelo sempre válida mas no contexto do modelo dos 16 vértices poderíamos gerar estados fundamentais pela mistura das topologias T_1 e T_2 de modo que seria permitido gerar excitações tipo monopolos de Nambu de qualquer forma.

Por causa destas considerações estudaremos as propriedades termodinâmicas de strings não só de forma restrita mas também de forma qualquer.

1.4 Caminhadas Auto-Excludentes (Self-Avoiding Walks)

Caminhadas Auto-Excludentes (CAE's) [16] são caminhadas aleatórias sobre a rede (quadrada, cúbica, hipercúbica, triangular, hexagonal, ...) só que com uma restrição: um sítio já visitado não pode ser visitado novamente (princípio do volume excludente).

CAE's são muito utilizadas no estudo de proteínas e polímeros porque o modelo de rede já dá informações sobre o sistema real (fora da rede) e, é claro, dois monômeros não podem ocupar o mesmo lugar no espaço. Cada monômero do polímero é representado por um sítio da CAE que tem tamanho finito.

Um problema matemático comum acerca das CAE's é contar o total de conformações para um dado tamanho de caminhada sobre a rede (a CAE da *Fig. 1.9* têm 10 passos). Esse problema é solúvel computacionalmente mas insolúvel analiticamente. Dito isso, a título de curiosidade, o que nos interessa é saber todas as CAE's para um dado tamanho de caminhada (saber o vetor posição de cada monômero, de cada conformação para um dado

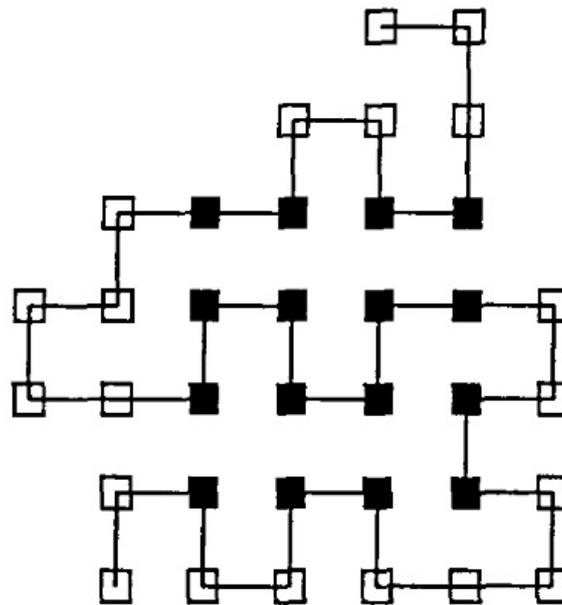


Fig. 1.13: Caminhada Auto-Excludente de tamanho 35 (36 monômeros) utilizada no estudo de proteínas através do modelo HP (hidrofóbico-polar). Este modelo é simples mas já fornece informações acerca das propriedades e enovelamento de proteínas. Nesta figura os quadrados preenchidos representam os monômeros hidrofóbicos.

tamanho de caminhada). Com isso, conseguimos gerar todos os microestados do sistema e determinar o comportamento termodinâmico exato de uma excitação tipo string no GSA usando o ensemble canônico.

Aqui lidaremos com spins localizados no centro de cada elo (conexão entre dois sítios) da CAE, em vez de monômeros localizados nos sítios, para gerar os microestados do sistema, assim como na *Fig. 1.9*. Por causa dos strings serem formados a partir de CAE's o nosso trabalho se assemelha com a ciência dos polímeros e proteínas. Detalhes sobre a geração das CAE's e da obtenção dos microestados são dados no próximo capítulo. Uma vez que nosso interesse sobre este tópico é restrito, não entraremos em detalhes aqui sobre a extensa literatura acerca de CAE's e polímeros em rede.

Capítulo 2

Métodos Computacionais

2.1 Algumas Observações Sobre Programação de Computadores

Além da linguagem de programação Fortran, que é umas das mais utilizadas no meio científico (outra muito utilizada, C++), foi utilizada também a linguagem de programação Visual Basic da Microsoft. Essa é a linguagem de referência para o início dos trabalhos mas foi possível, sem grandes dificuldades, se adaptar a linguagem de programação Fortran (especificadamente Fortran 90). É possível trabalhar com o Fortran tanto pelo Linux quanto pelo Windows, já o Visual Basic é exclusivamente Windows. O Visual Basic permite uma fácil debugação (detecção de erros) dos programas porque permite fazer visualizações do sistema, oferece muitas facilidades no seu editor de texto e possui uma sintaxe de linguagem muito simples. Os programas em geral são criados em VB e depois passados para Fortran, o que é feito sem dificuldade. A visualização do sistema pode ser feita com outras ferramentas como o XMakeMol (Linux) mas o VB é mais familiar e, além disso, possibilita fazer simulações interativas, ou seja, execuções com visualização passo-a-passo. A visualização é um instrumento importante no processo de debugação dos programas. A visualização do sistema não só torna o processo de debugação mais rápido mas as vezes é indispensável.

Apesar das facilidades que o VB oferece ele não é confiável para cálculos matemáticos intensivos e assim a forma final dos programas é dada em Fortran. Para a compilação dos programas em Fortran utilizamos o `gfortran`, para plotagem de dados utilizamos o Gnuplot 4.6 e para edição de textos e programas usamos o Programmer's Notepad e WinEdt 8.1.

Os programas utilizados nesta dissertação foram criados, ou seja, não copiados. Isto é importante para o aprendizado de programação mas não é eficiente recriar programas que já existam.

Como estamos interessados em gerar simulações muito pesadas, envolvendo longos tempos de simulação e muito armazenamento de memória, os programas criados devem ser otimizados. A otimização é uma tarefa corriqueira no trabalho de simulação e gerar ganhos computacionais enormes. Logo abaixo segue alguns exemplos de técnicas básicas de otimização:

- Evitar cálculos repetidos.

- Evitar utilização de matrizes de dimensão alta.
- Multiplicar pelo inverso em vez de dividir.
- etc...

Para que um programa saia do processo de confecção e seja utilizado em uma simulação devemos estar seguros quanto a sua exatidão. Por isso os programas devem ser bem checados antes de serem utilizados. Várias são as formas para checar um programa. A maneira mais comum de detectar erros em um programa é através da execução passo-a-passo com monitoramento de todas as variáveis. Podemos também simular o sistema para situações conhecidas cujo os resultados devem coincidir com os esperados. Simular o mesmo sistema por diferentes caminhos também é outro meio para checar um programa. Aqui não foi viável mas a conservação da energia é outro meio para a checar um programa (talvez o principal). Só depois que estamos seguros quanto a exatidão do nosso programa é que prosseguimos com o aumento da sua complexidade.

A seguir apresentamos os programas criados e seus detalhes, mas evitamos a exposição do código, concentrando mais nas suas ideias.

2.2 Gerador de Caminhadas Auto-Excludentes (CAE's)

No gelo de spin os strings de mais baixa energia não-fechados que conectam dois monopolos são Caminhadas Auto-Excludentes (*Fig. 1.9*). É claro que existem outros tipos de strings na rede (com ramificações, loops, etc) mas aqui estamos focados só nos strings não-fechados, especialmente os que têm spins adjacentes perpendiculares entre si (*Fig. 1.9*) que chamaremos de strings Regra do Gelo, ou simplesmente strings RG, por obedecer a regra do gelo para vértices intermediários.

Um algoritmo computacional simples para gerar todas as CAE's na rede quadrada é um algoritmo baseado numa rotina recursiva. Rotina recursiva significa uma rotina que chama ela própria. Essa ideia foi tirada de [17] e parece ser a mais eficiente para esta tarefa. Através dessa rotina recursiva o algoritmo varre todos os sítios da rede gerando todas as CAE's mas sempre evitando passar por um sítio já visitado. Para isso, é criada uma variável que informa a situação do sítio (já visitado ou não). Se o sítio já foi visitado, a caminhada sobre a rede segue por outra direção ou é interrompida se o caminho é sem saída. Nesse último caso, a CAE é descartada. O processo segue varrendo a rede até o tamanho da caminhada chegar no valor determinado, digamos, N . Daí, todos os sítios visitados são impressos em um arquivo que é a identificação da CAE. Quando uma CAE é gerada, o programa volta ao passo anterior para seguir por uma outra direção e assim varre toda a rede gerando todas as CAE's para um dado N (único parâmetro de entrada). Por exemplo, a CAE da *Fig. 1.9* (considerando que ela partiu da origem, ponto azul, sentido positivo da abscissa para a direita e da ordenada para cima) é identificada por

$$\text{CAE}_i = ((0,0), (-1,0), (-1,1), (-2,1), (-2,2), (-3,2), (-3,3), (-2,3), (-2,4), (-3,4), (-3,5))$$

uma n -upla ordenada de n pares ordenados onde i é o índice da CAE. Para qualquer

CAE o primeiro par ordenado é sempre a origem.

Em [17] o autor fornece o código que enumera a quantidade de CAE's para um dado N . Contudo, estamos interessados em conhecer as CAE's em si e não a quantidade de CAE's de um dado tamanho. Além disso, um princípio utilizado pelo autor do artigo, em seu programa, consiste em desconsiderar a ordem em que os sítios são visitados. Para o nosso objetivo isso não pode ser considerado, pois atribuiremos uma interação à CAE que depende da ordem em que os sítios são visitados. De qualquer maneira, foi preferível criar o gerador de CAE's do zero através da linguagem de programação Fortran 90. No apêndice A apresentamos o algoritmo gerador das CAE's da rede quadrada.

O ideal é que a entrada de parâmetros iniciais do nosso programa seja toda automatizada, o que evita erros devidos a atribuições manuais e também poupa trabalho. Isso foi feito de tal modo que o único parâmetro que temos que introduzir, na sequência de programas executados, é o tamanho da caminhada N , no primeiro programa. Daí são gerados arquivos que guardam os parâmetros iniciais para os próximos programas e estes lê em seus parâmetros iniciais a partir deste. Para executar vários programas em sequência podemos usar *scripts* que executam vários programas, parametrizados, com um único comando [18].

Devido ao interesse especial nas CAE's tipo Regra do Gelo, foi feito um programa a parte para gerar CAE's somente deste tipo. Isso poupa o gasto computacional de filtrar as CAE's RG a partir das CAE's de forma qualquer. As CAE's RG são geradas diretamente, ou seja, sem varredura sobre os caminhos que não tenham seus elos adjacentes perpendiculares entre si. O gerador de CAE RG não é muito diferente do gerador de CAE comum. Criamos duas subrotinas distintas Passo, uma para andar na vertical (PassoV) e outra para andar na horizontal (PassoH), e essas rotinas se chamam alternadamente. Em PassoV em vez de testarmos a ocupação dos 4 sítios vizinhos a um sítio testamos a ocupação só dos dois sítios vizinhos na vertical. Idem PassoH para a direção horizontal.

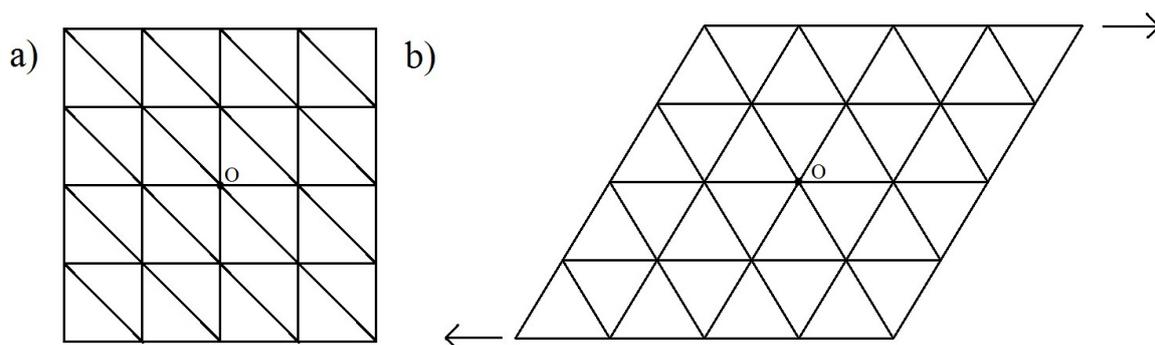


Fig. 2.1: a) Rede quadrada com caminha na diagonal. Origem em "O". b) Rede triangular obtida a partir da rede quadrada em a).

Além desse programa, também fizemos o gerador de CAE's da rede triangular e hexagonal (honeycomb). O gerador de CAE da rede triangular é feito através de um artifício que o torna muito pouco diferente do gerador de CAE da rede quadrada. Partimos do gerador de CAE da rede quadrada, só que permitimos a caminhada na direção diagonal, pra esquerda subindo e pra direita descendo, conforme ilustrado na Fig. 2.1. Gerada a CAE com o tamanho especificado, distorcemos a rede, como ilustrado na Fig. 2.1, "pu-

xando”o canto superior direito para a direita e o canto inferior esquerdo para a esquerda mantendo a origem fixa até obtermos a rede triangular.

A distorção é aplicada na hora da impressão da CAE, quando deslocamos a componente x dos pares ordenados por $y/2$, mantendo o tamanho dos elos igual à unidade. Este artifício nos poupa ter que trabalhar com números reais para localizar os sítios, e a quantidade de memória alocada é menor. O gerador de CAE da rede hexagonal é obtido a partir da rede triangular de maneira parecida com que fizemos para obter o gerador de CAE RG da rede quadrada a partir do gerador de CAE comum. A rede hexagonal é uma derivação da rede triangular. Criamos duas subrotinas, Passo1 e Passo2, que permitem a caminhada em três direções somente, conforme mostrado na *Fig. 2.2*, e essas duas rotinas se chamam alternadamente.

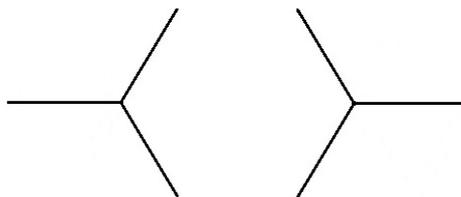


Fig. 2.2: Direções permitidas para cada rotina Passo do gerador de CAE's da rede hexagonal.

Nos nossos geradores de CAE's o gasto de CPU e memória crescem exponencialmente com o tamanho da caminhada. Em relação ao gerador de CAE's da rede quadrada, a medida que o tamanho da CAE aumenta em uma unidade, o tempo de execução é multiplicado aproximadamente por 3, assim como seu gasto de memória. Contudo, espera-se que o gasto de memória de HD não cresça na mesma proporção que o de CPU porque a medida que N aumenta a quantidade de CAE's descartadas aumenta, sendo que estes descartes crescem exponencialmente com o tamanho da caminhada. Usando uma saída de dados do tipo `unformatted` o gasto de memória cai pela metade.

A geração das CAE's da rede triangular é mais demorada, em relação a N , porque nesta rede as direções possíveis para o próximo passo são 6. Já o gerador de CAE RG e da rede hexagonal são mais rápidos (para o próximo passo, 2 direções permitidas para RG e 3 para hexagonal.)

Exploramos também a possibilidade de gerar 1 CAE a partir da união de 2 CAE's menores, no entanto, este método se mostrou menos eficiente.

2.3 Explorando Simetria

Explorando a geometria do sistema [17], uma grande otimização de memória e CPU pode ser alcançada, evitando gerar CAE's idênticas. CAE's idênticas geram energias iguais. Para os fins que nos interessam, basta conhecermos a energia de uma dessas CAE's e a quantidade de vezes que elas se repetem. Na rede quadrada, considere a região do espaço $y \geq 0$ e $y \leq x$ e as CAE's que tem ponto inicial na origem e final nessa região, conforme ilustra a *Fig. 2.3*.

Todas as CAE's dessa rede podem ser obtidas a partir dessas CAE's, digamos suficientes, a partir de operações de troca de sinal e troca de componente de cada uma das

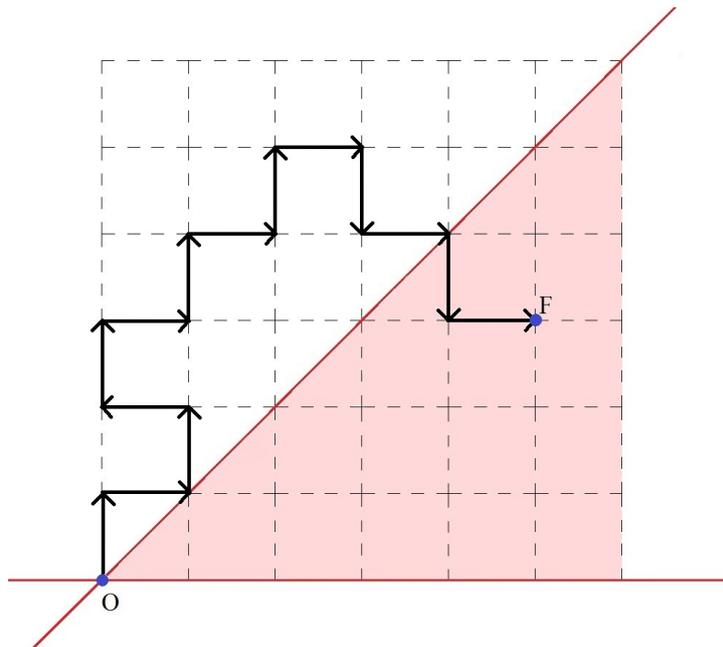


Fig. 2.3: Exemplo de CAE que tem ponto inicial (em "O" origem) e final (em "F") dentro da região delimitada pelas retas $y = x$ e $y = 0$.

CAE's suficientes. As operações de simetria são as seguintes

$$\begin{aligned} (x,y) &\rightarrow (-x,y) \\ &(x,-y) \\ &(-x,-y) \\ &(y,x) \\ &(-y,x) \\ &(y,-x) \\ &(-y,-x) \end{aligned}$$

Com isso, dado uma CAE obtemos outra equivalente a esta aplicando uma dessas operações de simetria a todos os pares ordenados que constituem a CAE. Como exemplo veja a Fig. 2.4. Na Fig. 2.4 temos

$$\text{CAE} = ((0,0), (1,0), (1,1), (2,1)).$$

Obtemos uma CAE equivalente a esta CAE pela troca de sinal das componentes x e y de todos os pares ordenados da CAE seguido pela troca das componentes x e y , isto é,

$$\text{CAE}_{\text{equivalente}} = ((0,0), (0,-1), (-1,-1), (-1,-2)).$$

Cada CAE suficiente gera mais 7 ou 3 outras CAE's, dependendo se o ponto final da CAE está no interior da região delimitada pelas retas $y \leq x$ e $y \geq 0$, degenerescência 8,

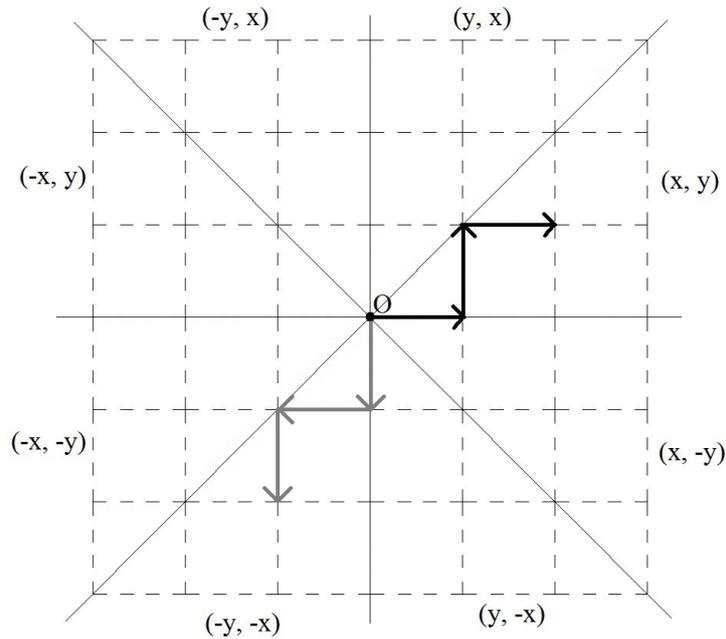


Fig. 2.4: A CAE suficiente é a seqüência de setas no 1º octante do plano cartesiano (em preto) com início na origem e término no ponto (2,1). Geramos uma CAE equivalente (em cinza) pela aplicação da operação de simetria $(-y, -x)$ em todos os pares ordenados que constituem a CAE.

ou na fronteira, degenerescência 4 (fronteira significa pontos sobre as retas $y = x$ e $y = 0$). Para a rede triangular, a degenerescência das CAE's é 12 para CAE's de interior e 6 para CAE's de fronteira. Na rede hexagonal os respectivos valores são 6 e 3. Nestas duas redes as operações de simetria correspondem a uma combinação das operações de simetrias listadas para a rede quadrada mais rotações da CAE como ilustrado nas *Fig. 2.5 e 2.6*. Para estas operações de simetria a energia calculada através da eq. 1.2 é invariante. No caso da rede hexagonal, o ponto final da CAE suficiente deve estar na região delimitada por $y \geq 0$ e $y \leq \tan(60^\circ)x$. Para a rede triangular a região delimitadora é $y \geq 0$ e $y \leq \tan(30^\circ)x$.

Para gerar apenas essas CAE's suficientes colocamos uma restrição em cada passo feito pelo gerador de CAE's para manter o ponto final da CAE na região permitida. Apesar da quantidade de código a mais nesse gerador de CAE's, que é pouca, é observado a diminuição do tempo de execução computacional como mostrado a *Fig. 2.7*.

Depois que geramos todas as CAE's, de interior que tem repetição 8 e de fronteira que tem repetição 4 (rede quadrada), armazenamos a quantidade de CAE's de interior, **TotalSAWVolume**, e fronteira **TotalSAWFronteira**. Sendo o total de CAE's, sem considerar os aspectos de simetria, igual a **TotalSAW**, devemos ter

$$\text{TotalSAW} = \text{TotalSAWVolume} \cdot 8 + \text{TotalSAWSuperficie} \cdot 4$$

Além do ganho computacional devido à exploração da simetria, um ganho computacional ainda maior pode ser obtido pela paralelização do gerador de CAE's. Isso é feito fixando os passos iniciais da CAE e deixando variar só os restantes. Para cada passo inicial fixado é feito um programa a parte que gera um arquivo executável, que é executado em um processador a parte. Digamos que queiramos fixar o primeiro passo da CAE. Como

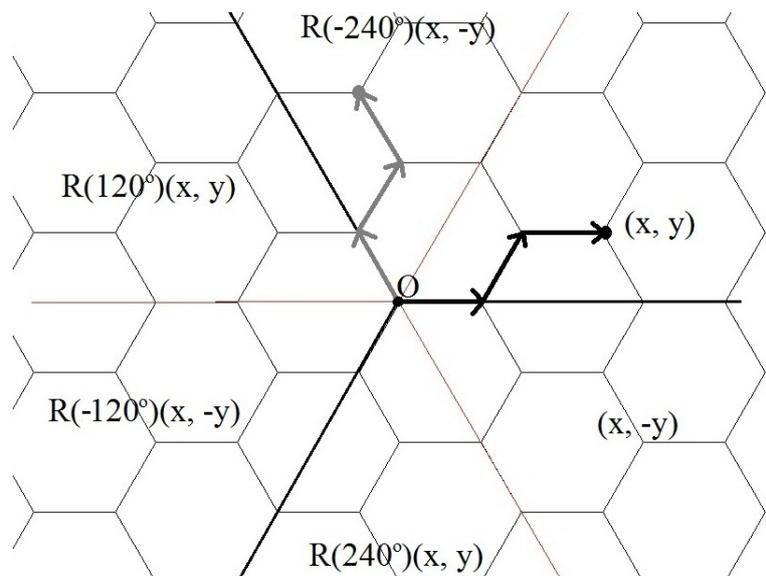


Fig. 2.5: Operações de simetria na rede hexagonal para uma CAE de tamanho 3 indicada por (x, y) . A partir dessa CAE podemos gerar mais 5 outras CAE's idênticas por operações de troca de componentes e troca de sinal seguidas por rotação. Na figura obtemos a CAE em cinza pela operação de simetria $(x, -y)$ seguida de uma rotação de -240 graus.

para o primeiro passo existem 4 possibilidades (rede quadrada) então é necessário gerar 4 programas, cada um gera um grupo de CAE emergindo de um desses passos iniciais. Se quisermos fixar os dois primeiros passos iniciais então serão necessários 12 programas e o

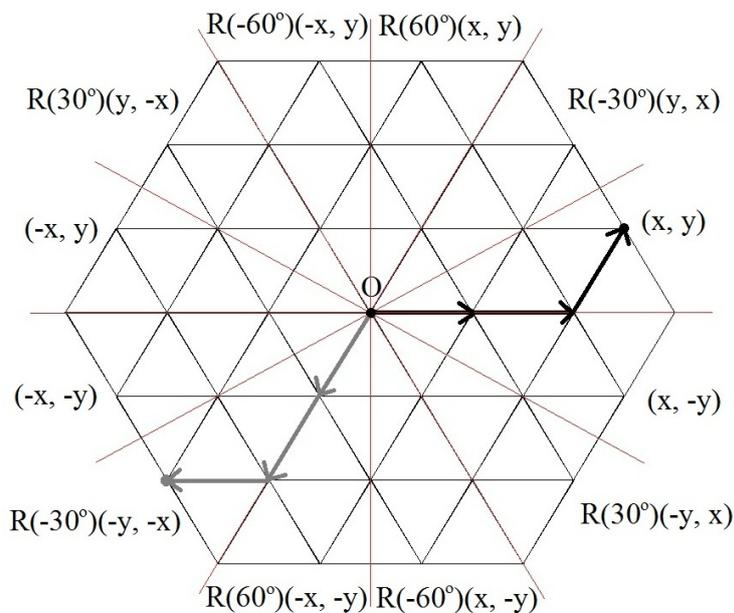


Fig. 2.6: Operações de simetria na rede triangular para uma CAE de tamanho 3 indicada por (x, y) . A partir dessa CAE obtemos a CAE em cinza pela operação de simetria $(-x, -y)$ seguida de uma rotação de -30 graus.

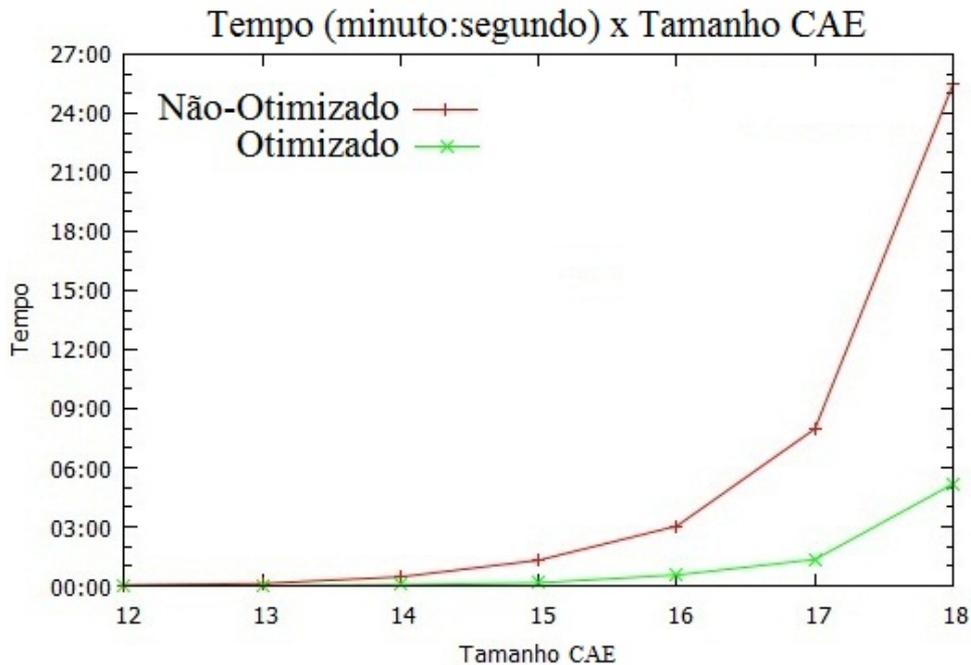


Fig. 2.7: Tempo computacional gasto pelo gerador de CAE da rede quadrada em função do tamanho da CAE. O gráfico Não-Otimizado se refere a geração das CAE's sem explorar simetria e o Otimizado explora simetria. O tempo gasto pelo caso otimizado é, em média, apenas 17% do tempo gasto sem otimizar.

tempo de CPU cai proporcionalmente a quantidade de programas feitos.

Existe um procedimento comumente utilizado em simulações na rede que é localização de um sítio por um único índice em vez de 1 par ordenado. Para isto, é necessário fazer uma operação para levar o par ordenado ao seu índice e a operação inversa para sair do índice e voltar ao par ordenado. O computador demora mais tempo para localizar uma entrada em uma matriz de dimensão 2 do que uma entrada em uma matriz de dimensão 1 e por este motivo, dentre outros, a indexação é interessante. No entanto, quando se precisa ter a todo momento o conhecimento do par ordenado, a indexação é prejudicial porque demanda uma constante operação de ida e volta entre o índice e o par ordenado, o que torna a execução do programa mais demorada. No presente caso, esse método se mostrou prejudicial em vista da simplicidade do gerador de CAE's.

2.4 CAE's com Interação

O nosso objetivo é medir a energia associada a cada CAE via eq. 1.2. Para cada elo que conecta dois sítios adjacentes de uma CAE atribuímos um spin \vec{S}_i , de módulo 1, mais um vetor posição do spin \vec{r}_i que determina a posição do spin na rede. Para a sequência de spins formando uma CAE, conforme mostrado na *Fig. 1.9*, temos um string. No caso da *Fig. 2.4* a CAE em preto é dada por

$$\text{CAE} = ((0,0),(1,0),(1,1),(2,1))$$

Sendo cada par ordenado (x_i, y_i) dado por um índice $i = 0, 1, 2, 3$ tiramos o vetor posição de spin via

$$\vec{r}_i = \frac{(x_{i+1}, y_{i+1}) + (x_i, y_i)}{2}$$

e o vetor de spin por

$$\vec{S}_i = (x_{i+1}, y_{i+1}) - (x_i, y_i).$$

O conjunto dos vetores de spins mais os seus respectivos vetores de posição constituem um string.

$$\text{string} = \left(\begin{array}{c} \vec{S}_1, \dots, \vec{S}_N \\ \vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N \end{array} \right).$$

Cada microestado do sistema (também chamado às vezes de estado), σ_i , é dado por uma configuração de string. Através de

$$E = D \sum_{i < j} \left[\frac{\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j}{|\vec{r}_{ij}|^3} - \frac{3(\vec{S}_i \cdot \vec{r}_{ij})(\vec{S}_j \cdot \vec{r}_{ij})}{|\vec{r}_{ij}|^5} \right] \quad (2.1)$$

obtemos a energia do microestado. Na equação acima $\vec{r}_{ij} = \vec{r}_i - \vec{r}_j$ é o vetor distância relativa. Se transladarmos o sistema, girarmos ele ou invertemos o sinal de todos os vetores de spin, a energia do string não muda. Isto ocorre porque a energia é uma grandeza escalar e depende somente da orientação relativa entre os vetores.

Dado um tamanho N , geramos todas as configurações possíveis de string e calculamos a energia de cada microestado correspondente. Com a energia de cada microestado em mãos obtemos a função de partição $Z(T, N) = \sum_{\sigma_i} e^{-E_{\sigma_i}/(k_B T)}$, onde o somatório é feito sobre todas os microestados do sistema. Podemos também calcular qualquer grandeza termodinâmica, A , fazendo

$$\langle A \rangle_{T, N} = \frac{\sum_{\sigma_i} A_{\sigma_i} e^{-E_{\sigma_i}/(k_B T)}}{Z}. \quad (2.2)$$

Note que como temos acesso a todos os microestados, os resultados obtidos são exatos.

A constante de Boltzmann k_B na equação acima funciona apenas como um fator de estiramento/compressão da escala de temperatura, pois ela aparece multiplicando T em todos os locais. Para evitar cálculos com números muito grandes ou muito pequenos podemos fazer a substituição $k_B T = \tilde{T}$, a temperatura adimensional, e quando quisermos saber a temperatura em unidades internacionais pegamos \tilde{T} e dividimos por k_B . Este procedimento é chamado adimensionalização e é muito utilizado em simulação. A constante D na eq. 2.1 também pode ser adimensionalizada. De modo geral adimensionalizamos as duas constantes, k_B e D , tornando-as iguais a 1. Para isso, na eq. 2.1, evidenciamos a constante D , $E = D\tilde{E}$ e substituímos $\frac{D}{k_B T} = \frac{1}{\tilde{T}}$

$$\langle E \rangle_{T, N} = \langle \tilde{E} \rangle_{\tilde{T}, N} = D \frac{\sum_{\sigma_i} \tilde{E}_{\sigma_i} e^{-\tilde{E}_{\sigma_i}/\tilde{T}}}{\sum_{\sigma_i} e^{-\tilde{E}_{\sigma_i}/\tilde{T}}}$$

$$\frac{\langle E \rangle_{\tilde{T},N}}{D} = \langle \tilde{E} \rangle_{\tilde{T},N} = \frac{\sum_{\sigma_i} \tilde{E}_{\sigma_i} e^{-\tilde{E}_{\sigma_i}/\tilde{T}}}{\sum_{\sigma_i} e^{-\tilde{E}_{\sigma_i}/\tilde{T}}}$$

Que é a energia média adimensional. De maneira análoga procedemos para as outras quantidades termodinâmicas.

Como estamos trabalhando com a função exponencial é fácil ocorrer overflow/underflow nas medidas. Em um computador 32 bits a função exponencial e^x gera um overflow em $x \approx 710$ e um underflow em $x \approx -745$. Podemos contornar este problema observando que uma parcela constante sobre todos os valores de energia, na função exponencial, não faz diferença sobre a média. Fazendo $\tilde{E} = E' + E^0$, onde E^0 é constante

$$\frac{\sum_{\sigma_i} \tilde{E}_{\sigma_i} e^{-(E'_{\sigma_i} + E^0)/\tilde{T}}}{\sum_{\sigma_i} e^{-(E'_{\sigma_i} + E^0)/\tilde{T}}} = \frac{e^{-E^0/\tilde{T}} \sum_{\sigma_i} \tilde{E}_{\sigma_i} e^{-E'_{\sigma_i}/\tilde{T}}}{e^{-E^0/\tilde{T}} \sum_{\sigma_i} e^{-E'_{\sigma_i}/\tilde{T}}} = \frac{\sum_{\sigma_i} \tilde{E}_{\sigma_i} e^{-(\tilde{E}_{\sigma_i} - E^0)/\tilde{T}}}{\sum_{\sigma_i} e^{-(\tilde{E}_{\sigma_i} - E^0)/\tilde{T}}}. \quad (2.3)$$

Para tornar mais rápido o processo de medida da energia podemos colocar um raio de corte na interação entre os spins, uma vez que a interação dipolar cai com a distância. Aqui, faremos medidas com e sem raio de corte a fim de comparar os dois resultados. Para tornar a execução dos programas mais rápida, podemos também calcular a energia dos strings no mesmo programa que gera as CAE's sem a necessidade de armazená-las em um arquivo pra depois lê-las a partir de outro programa.

Além da energia média estamos interessados em conhecer o número de estados com uma dada energia, $\Omega(E)$, para um dado N . Essa quantidade, também conhecida como densidade de estados (DOS), mede quantas conformações tem a mesma energia E . Para calcular $\Omega(E)$, em vez de comparar todas as energias entre si para fazer a contagem da repetição, o que é mais demorado, seguimos o seguinte esquema. Seja uma energia qualquer associada a um string, $E_i = 325,12498$, por exemplo. Arredondamos a energia, na precisão que desejarmos, para tornar o valor da energia um inteiro. Por exemplo, fazemos $AE_i = \text{INT}(E_i \cdot 100) = 32512$, onde $\text{INT}(x)$ representa a parte inteira de x . Agora podemos usar o valor da energia para localizar uma entrada de uma matriz de dimensão 1, $\Omega(E)$. Arredondamos todas as energias e fazemos um loop sobre todas elas. Pra cada AE_i selecionado, fazemos

$$\Omega(AE_i) = \Omega(AE_i) + 1.$$

Na hora de imprimir $\Omega(AE)$ imprimimos $AE/100$, que nos fornece a energia dentro da precisão escolhida.

2.5 Strings na Rede

As medidas da energia que consideramos até o momento se referem a strings fora da rede, isolados. Esse modelo não é tão realístico porque os strings estão na rede (veja *Figs. 1.9, 1.10 e 1.12*).

Para medir a energia do string na rede, primeiro geramos a rede no seu estado fundamental, *Fig. 1.7*. A partir daí giramos os spins formando um string. Gerada a excitação, medimos a energia, que corresponde à interação de todos os spins com todos os outros, exceto pela auto-interação.

Na rede temos spins com direção horizontal e spins na direção vertical. Localizamos

cada spin na rede segundo a sua direção e pelo sítio adjacente a ele mais afastado da origem, como esquematizo na *Fig. 2.8*.

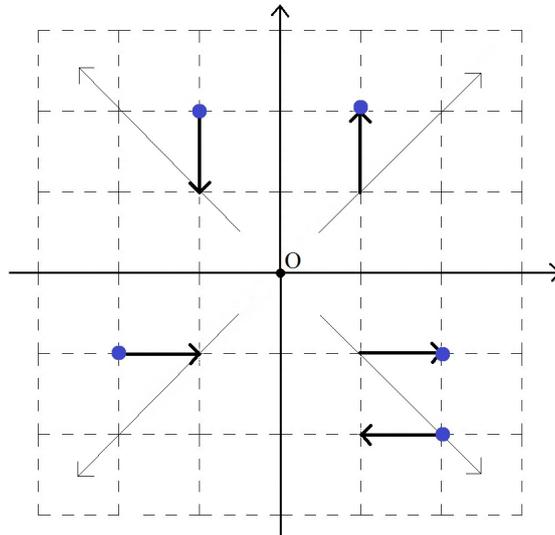


Fig. 2.8: Localização dos spins na rede. O sítio que localiza um spin é aquele adjacente ao spin mais afastado da origem (pontos em azul).

Isto é essencialmente o esquema utilizado para gerar strings na rede a partir de CAE's lidas de um arquivo externo. Cada spin é identificado por dois números inteiros (um sítio da rede) mais a sua direção. Contudo, para a medir a energia é mais conveniente atribuímos um único índice a cada vetor de spin e vetor posição de spin. Feito isto, a energia de interação mútua entre todos os spins é obtida simplesmente por um loop duplo

```
DO i=1, N-1
  DO j=i+1, N
    ...
  END DO
END DO
```

Ao final da medida da energia, desfazemos os giros sobre os spins girados voltando para o estado fundamental. Lemos outra CAE a partir do arquivo externo, geramos outro string, medimos a energia e assim sucessivamente.

Strings que não são do tipo RG não correspondem a excitações tipo Nambu (sequência de spins com monopolos magnéticos associados aos seus extremos), como ilustra a *Fig. 1.9*, e não são de interesse no estudo de strings na rede. Os strings de formato qualquer (Não-RG) são estudados só isoladamente sem nenhuma relação com a rede (background).

Capítulo 3

Análise de Dados

3.1 Energia e Degenerescência da Energia

Começamos a nossa análise de resultados pela degenerescência da energia $\Omega(E)$, também chamada de densidade de estados (DOS). Na rede quadrada diferenciamos entre strings cujos vértices intermediários obedecem a regra do gelo, strings RG, de strings de formato qualquer, strings CAE, sendo que os strings RG são um caso particular dos strings CAE. Para strings de tamanho $N = 11$, CAE, sem raio de corte, sem influência da rede e com 3 casas decimais de precisão na energia a degenerescência da energia se comporta tal como mostrado na *Fig. 3.1*, onde consideramos todas as CAE's geradas pelo gerador de CAE's sem considerar os aspectos de simetria (para $N=11$ são 120292 CAE's, no total). Nesta figura também destacamos os resultados para strings RG.

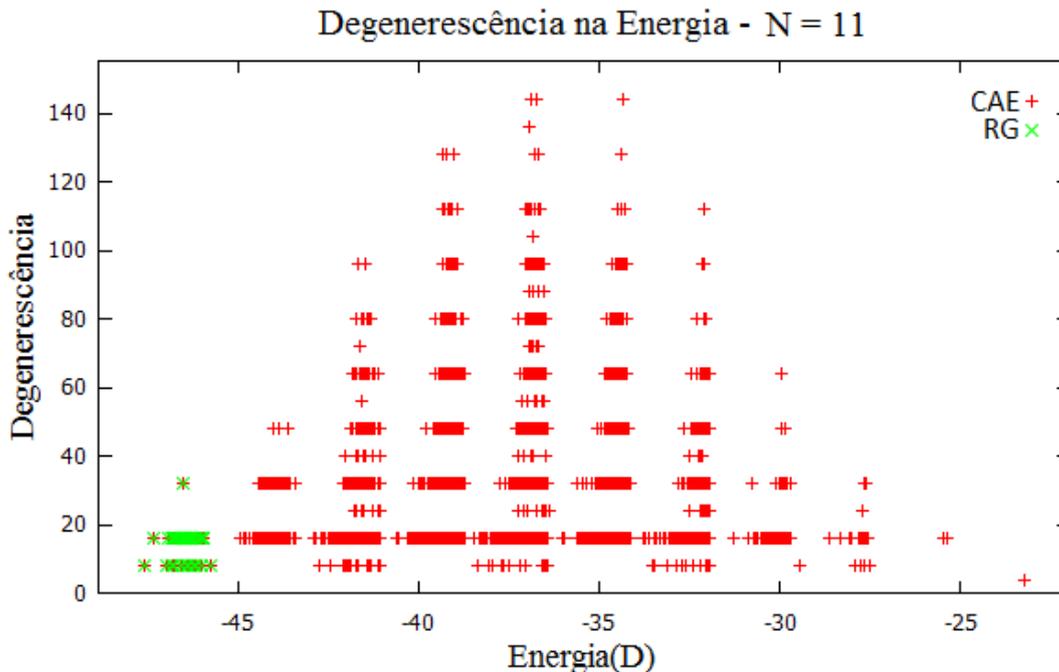


Fig. 3.1: Degenerescência na energia (DOS) para strings CAE de tamanho 11. Em destaque no quanto inferior esquerdo o DOS dos strings RG.

Para strings CAE, a quantidade de repetições na energia chegam até 144. As operações

de simetria já adiantam que todas as CAE's têm degenerescência mínima 4 ou 8. Apenas as conformações correspondentes aos strings totalmente retilíneos têm degenerescência 4 (ponto no canto inferior direito da *Fig. 3.1*). Estas são as conformações de maior energia. Além dos motivos já citados para a repetição na energia existe um outro motivo que não é contabilizado no nosso gerador de CAE's. Existem strings que possuem a mesma energia mas não diferem entre si pelas operações de simetria listadas na seção 2.3. A *Fig. 3.2* ilustra um destes strings.

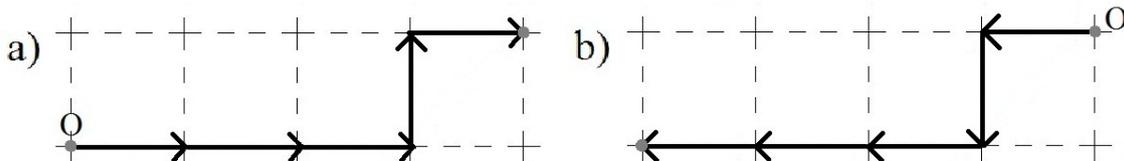


Fig. 3.2: Strings com mesma energia (origem em “O”) mas que não podem ser obtidos um a partir do outro segundo as 8 operações de simetria listadas na *Fig. 2.4*.

Essa nova degenerescência na energia é devido a assimetria dos strings em relação ao seu centro. Essa assimetria não é contabilizada no nosso gerador de CAE's. Com isso, podemos prever uma degenerescência na energia de até 16 para certos strings. Contudo, $\Omega(E)$ para $N = 11$, chega até 144 (*Fig. 3.1*). Se aumentamos a precisão da energia para 6 casas decimais a degenerescência máxima cai para 32. Não desconsideramos outras possibilidades de simetria ou de strings de formas distintas gerarem a mesma energia, mas o motivo da degenerescência maior que 16 na energia parece ser devido a precisão numérica.

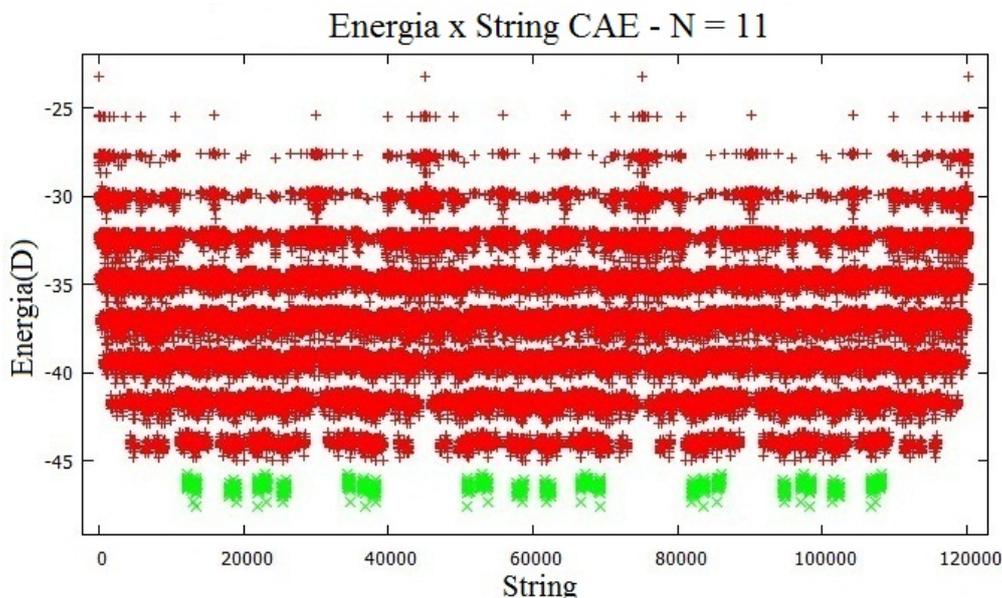


Fig. 3.3: Energia por string gerado. O índice dos strings estão na ordem crescente em que são gerados pelo gerador de CAE's. As energias destacadas na parte inferior do gráfico correspondem ao strings RG.

O gráfico de $\Omega(E)$ é extremamente ruidoso, com um pico mais pronunciado no meio e outros picos intermediários, com regiões vazias entre os picos. De maneira correspon-

dente a energia em função do string gerado pelo gerador de CAE's possui regiões mais concentradas de microestados e regiões mais vazias (*Fig. 3.3*). Os picos do DOS são caracterizados pela quantidade de spins adjacentes perpendiculares entre si (quinas) presentes nos strings. Os strings com mais quinas são os menos energéticos. As quinas geram a maior contribuição, em módulo, para a energia do string. Por isso, os strings RG são os menos energéticos, pois possuem maior quantidade de quinas. A *Fig. 3.12*, no final da seção, mostra algumas energias de interação de pares de spins de mais baixa energia, onde a energia da quina é a mais intensa.

O nosso $\Omega(E)$ cresce e depois decresce com o aumento da energia. Essa característica é devido ao sistema não ter energia cinética (tipo Ising). Para sistemas com energia cinética não-nula espera-se que $\Omega(E)$ cresça com o aumento de E [19].

Se colocarmos um raio de corte $r = \sqrt{1/2}a$ (o menor possível não-trivial) o $\Omega(E)$ fica suave (veja *Fig. 3.4*). Com isso, concluímos que a ruidosidade do $\Omega(E)$ está de certa forma ligada ao longo alcance das interações.

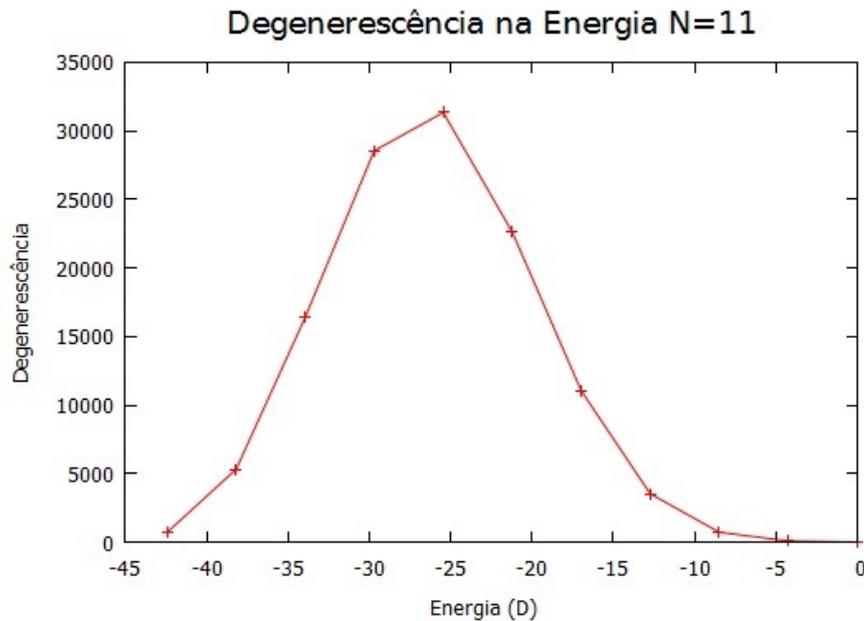


Fig. 3.4: Gráfico de $\Omega(E)$ com raio de corte $r = \sqrt{1/2}a$. (As linhas são utilizadas só para facilitar a visualização).

Apesar de $\Omega(E)$ ser muito ruidoso a função partição $Z(T)$ corresponde a uma transformada de Laplace de $\Omega(E)$ [20] que é suave, não importando o quanto $\Omega(E)$ seja ruidoso. Por isso não temos problema na nossa análise canônica.

Como a entropia microcanônica é obtida a partir de $\Omega(E)$ via $S(E) = k_B \ln(\Omega(E))$ a entropia microcanônica é ruidosa tal como $\Omega(E)$. Como temos interesse num sistema intrinsecamente finito, a análise microcanônica seria a mais indicada, no entanto, como $\Omega(E)$ é muito ruidoso, a entropia microcanônica e grandezas derivadas também o serão de forma que não faremos tal análise aqui.

Fazendo a medida da energia (*Fig. 3.5*) para o string dentro e fora da rede, isto é, considerando e não considerando explicitamente o background, observamos que a rede gera influência não-trivial sobre os valores de energia. No caso da *Fig. 3.5* foram considerados strings RG pois strings CAE não são estudados na rede.

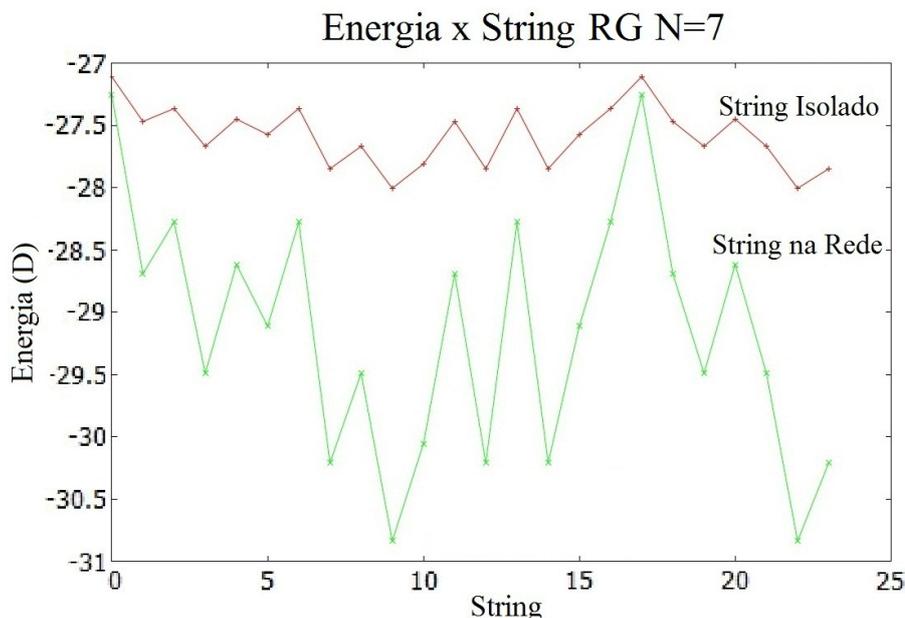


Fig. 3.5: O gráfico acima se refere apenas a alguns strings. Nele podemos ver que, apesar das semelhanças, a energia do string dentro e fora da rede não possuem relação aparente. O gráfico dos strings dentro da rede foi deslocada na vertical em $9033D$ para ficar próximo do gráfico dos strings isolados.

Para strings RG com raio de corte mínimo $r = \sqrt{1/2}a$, a energia é dada pela quantidade de quinas que é sempre a mesma para um mesmo N . Nesse caso, o raio de corte mínimo não-trivial é $r = 1a$ que permite a interação das quinas mais a interação de spins com os seus vizinhos paralelos distanciados da unidade, conforme mostra a *Fig. 3.6*.

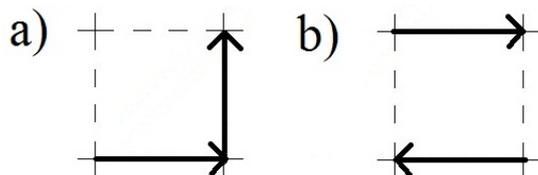


Fig. 3.6: Para raio de corte $r = \sqrt{1/2}a$ somente spins posicionados como em a) interagem. Quando aumentamos o raio de corte para $r = 1a$, nos strings RG, além dessa interação, também ocorrem interações como em b).

Utilizando o mesmo termo utilizado no estudo de proteínas chamaremos de contato os spins paralelos distanciados da unidade (*Fig. 3.6* item b)). Na *Fig. 1.9* o string tem 2 contatos, por exemplo. Quando consideramos o raio de corte $r = 1a$ para strings RG, fora da rede, para cada contato a mais no string a energia diminui em $1D$ enquanto que nos strings sobre a influência da rede a energia diminui em $4D$, como observado na *Fig. 3.7*. Sendo assim, é possível encontrar uma relação entre a energia do string medida fora da rede com a energia do string medida dentro da rede. Sendo a energia fora da rede E_F e dentro E_D , temos que

$$E_D = 4E_F + C$$

onde C é uma constante, para um mesmo N . Essa relação é garantida graças ao princípio

do volume excludente que mantém fixa a vizinhança em torno de um spin.

Essa relação entre a energia do string medida dentro da rede com a energia medida fora da rede não é válida, a princípio, para interação com mais vizinhos (maior raio de corte), contudo, é observada uma boa aproximação, *Fig. 3.8*, que aparentemente melhora com o aumento da rede ao redor do string.

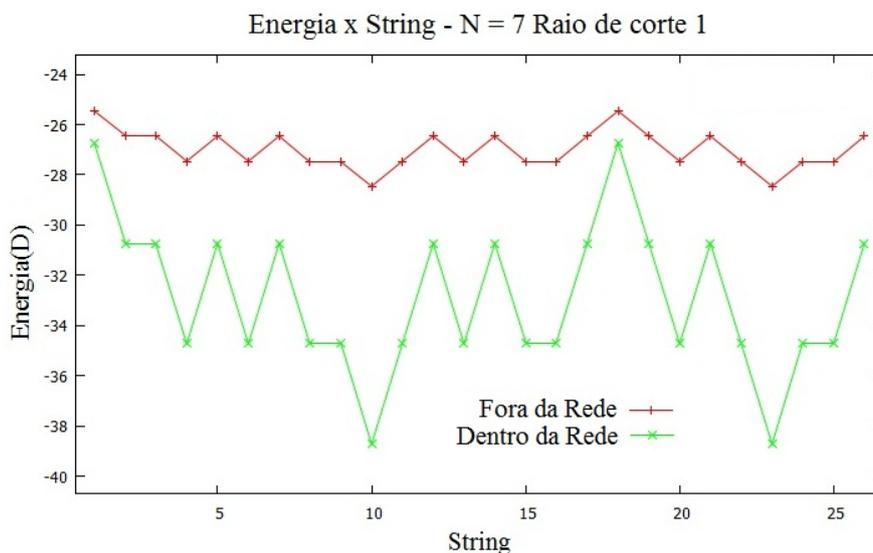


Fig. 3.7: Energia como função do string RG para os primeiros 1/4 de strings gerados para o sistema com raio de corte 1a. A energia Fora da Rede multiplicada por 4 é exatamente igual a energia Dentro da Rede a menos de uma constante. O gráfico Dentro da Rede foi deslocado na vertical em $4190D$ para ficar próximo ao gráfico Fora da Rede.

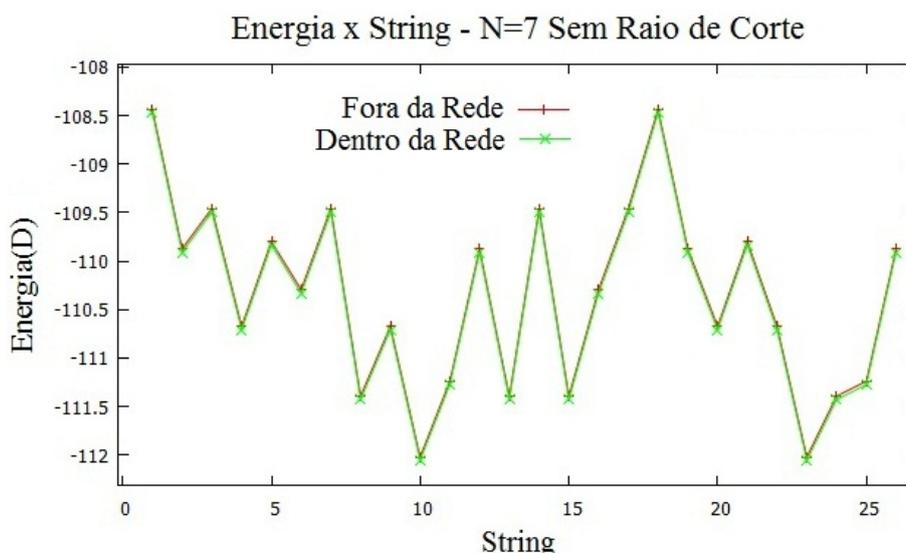


Fig. 3.8: A medida da energia do string sem/com influência da rede para o sistema sem raio de corte. Todos os valores de energia Fora da Rede estão multiplicados por 4. Os dois gráficos apresentam comportamento muito semelhante apesar de não serem exatamente iguais. O gráfico Dentro da Rede foi deslocado na vertical em $3970.02D$ para ficar próximo do gráfico Fora da Rede.

Agora vejamos a distribuição da energia por string e a degenerescência na energia (DOS) para outras redes sem considerar qualquer relação com o background (strings isolados).

A distribuição da energia e DOS da rede triangular é análoga à da rede quadrada. Nela a distribuição de energia possui um pico central com picos intermediários, tal como na rede quadrada. A característica dos picos, desta vez, é a variação na quantidade de spins adjacentes com ângulo de 60° entre eles. A interação entre pares de spins adjacentes com ângulo de 60° é a mais intensa em módulo. O raio de corte mínimo nesta rede é $r = 0.5a$ que gera um DOS suave assim como na rede quadrada.

A rede hexagonal, diferente da rede triangular, é menos similar à rede quadrada. Nesta rede, os spins pertencentes a um mesmo vértice são equidistantes entre si e por isso interagem igualmente. A distribuição de energia por string é mais contínua e apresenta apenas uma região vazia de energia, que é mais nítida para N ímpar, causada pelo aumento da distância ponta-a-ponta dos strings, partindo dos strings de mais baixa energia. Neste sistema, a distância ponta-a-ponta é mínima para conformações de baixa energia e o aumento dela é acompanhado, em geral, por um salto na energia, como mostra as *Figs. 3.9 e 3.10*.

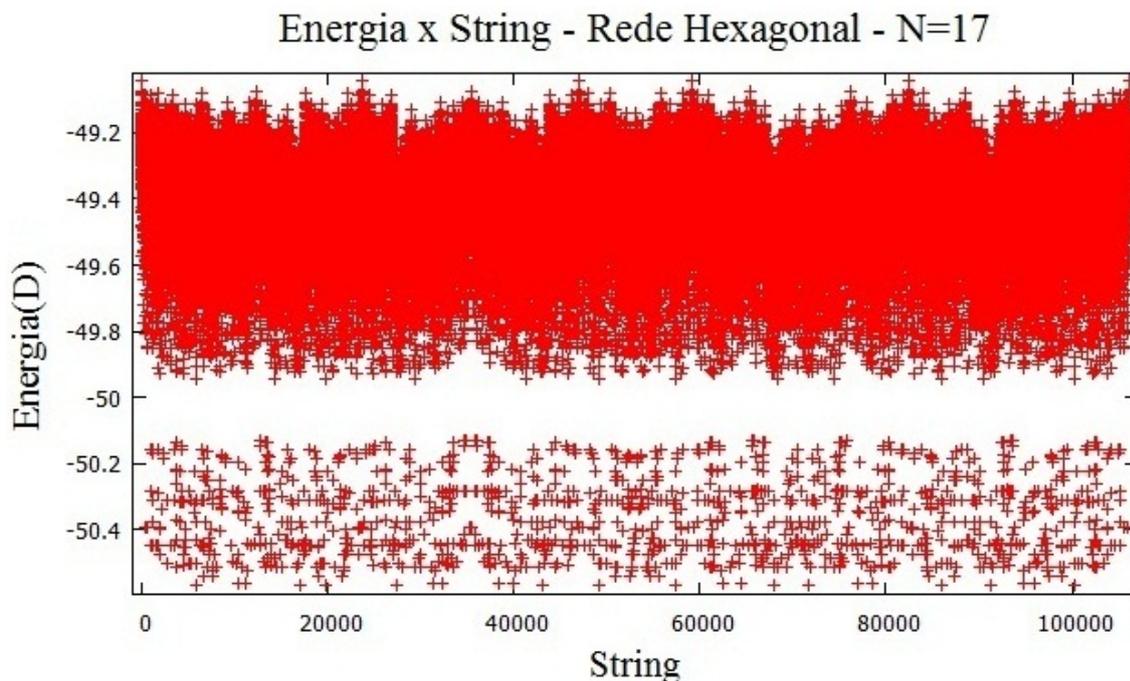


Fig. 3.9: Energia por string da rede hexagonal sem raio de corte. O gráfico apresenta um único salto entre as faixas de energia. O gráfico para outros valores de N são semelhantes.

O DOS suave, obtido com raio de corte mínimo, apresenta uma região convexa próxima ao pico central, *Fig. 3.11*, onde esta região convexa é mais nítida para N pequeno. Nesta rede o raio de corte mínimo que gera o DOS suave é $r = 1.5a$. Tanto para esta rede, como para a rede triangular, se considerarmos raios de corte maiores, possibilitando a interação entre pares de spins mais distanciados, o gráfico do DOS se torna mais ruidoso, como ocorre na rede quadrada.

Na *Fig. 3.12* listamos algumas interações de baixa energia entre pares de spins da rede hexagonal.

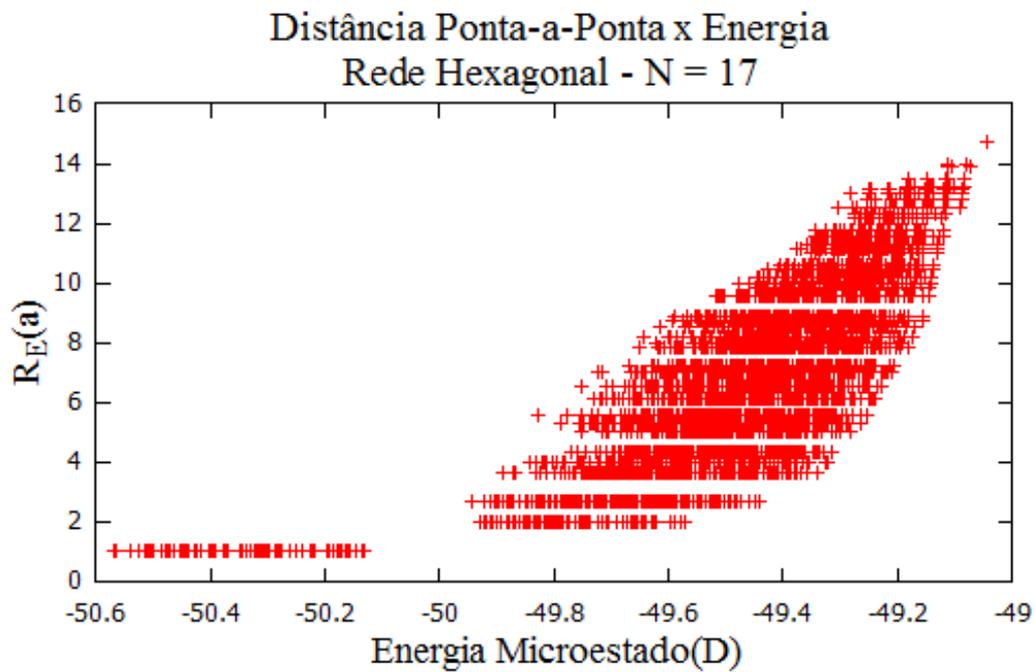


Fig. 3.10: Distância ponta-a-ponta como função da energia do microestado para a rede hexagonal. As conformações de baixa energia tem a distância ponta-a-ponta mínima e o salto na energia é acompanhado pelo aumento da distância ponta-a-ponta.

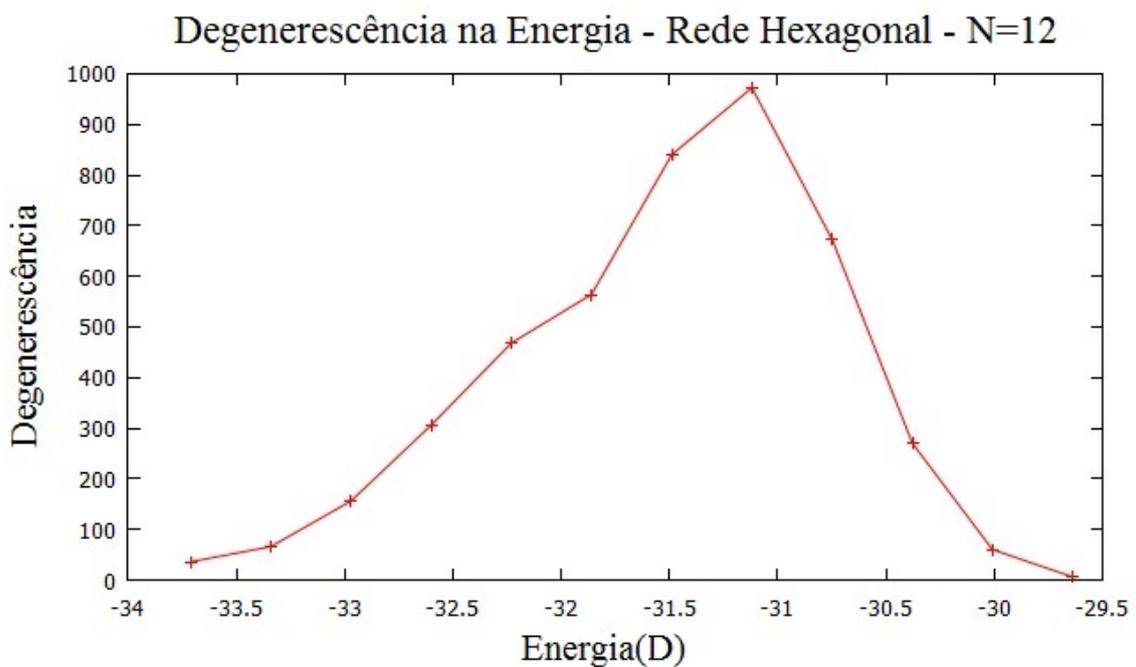


Fig. 3.11: DOS da rede hexagonal com raio de corte $r = 1.5a$.

Energia de Interação de Pares de Spins		
Par de Spins	Conformação	Energia(D)
Rede Quadrada		
Quina		$-3\sqrt{2} \approx -4.24$
Consecutivos e colineares		-2
Contato anti-paralelo		-1
$\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 = 1$ e $r = 2$		$-\frac{1}{4} = -0.25$
$\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 = 0$ e $r = \sqrt{5}/2$		$-9\sqrt{\frac{2}{5^5}} \approx -0.23$
$\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 = 1$ e $r = \sqrt{2}$		$-\frac{1}{\sqrt{2^5}} \approx -0.18$
Rede Hexagonal		
Vértice		≈ -2.694
$\vec{S}_1 = (1,0)$, $\vec{S}_2 = (-0.5, \frac{\sqrt{3}}{2})$ e $r = 1.5$		≈ -0.370
$\vec{S}_1 = (1,0)$, $\vec{S}_2 = (1,0)$ e $r = \sqrt{3}$		≈ -0.241
$\vec{S}_1 = (1,0)$, $\vec{S}_2 = (-1,0)$ e $r = \sqrt{3}$		≈ -0.193

Fig. 3.12: Energias de interação de pares spin-spin de baixa energia, no sentido crescente da energia, de cima para baixo. Invertendo o sentido de um dos spins do par o sinal da energia muda.

3.2 Medidas Termodinâmicas

O nosso sistema é constituído de excitações, geradas a partir do estado fundamental, formando strings de um dado tamanho N . Para cada N medimos a energia de todos os microestados e com isso temos $\Omega(E, N)$, que fornece todas as informações termodinâmicas de interesse.

Aqui, não nos preocuparemos com o limite termodinâmico das CAE's. O motivo para tal restrição na análise se deve ao fato de estarmos interessados nas propriedades das excitações que aparecem nos gelos de spin artificiais. Como a energia de tais excitações cresce linearmente com o número de spins girados, (eq. 1.3), não esperamos encontrar excitações muito grandes, de forma que as informações que mais nos interessam podem ser obtidas ao considerar apenas CAE's relativamente pequenas.

Quando falamos em termodinâmica, estamos nos referindo a médias estatísticas sobre o ensemble canônico [19]. Aqui, as quantidades termodinâmicas de interesse são o calor específico, c , as médias da distância ponta-a-ponta $\langle R_E \rangle$ e do raio de giração $\langle R_G \rangle$ e suas derivadas com relação a temperatura, lembrando que nas simulações não levamos em conta as constantes (adimensionalização). O calor específico é uma quantidade termodinâmica fundamental, e é partir dele que identificamos as possíveis transições de fases do sistema. Ele é a derivada da média da energia em relação a temperatura dividida por N (número de spins). Tais grandezas estão definidas abaixo.

- $c(T, N) = \frac{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2}{Nk_B T^2},$
- $\langle R_E \rangle (T, N) = \frac{\sum_{\sigma_i} R_{E(\sigma_i)} e^{-E_{\sigma_i}/(k_B T)}}{\sum_{\sigma_i} e^{-E_{\sigma_i}/(k_B T)}},$
- $\langle R_G \rangle (T, N) = \frac{\sum_{\sigma_i} R_{G(\sigma_i)} e^{-E_{\sigma_i}/(k_B T)}}{\sum_{\sigma_i} e^{-E_{\sigma_i}/(k_B T)}},$

onde

- $R_E = a\sqrt{\vec{x}_0^2 - \vec{x}_N^2},$

a distância ponta-a-ponta, é o somatório de todas as variáveis de spin, que é diretamente proporcional a magnetização do string, $\vec{M} = \mu\vec{R}_E/a$, onde \vec{x}_0 é sempre a origem.

- $R_G = a\sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (\vec{r}_i - \vec{r}_{CM})^2},$

é o raio de giração que mede a compactação do string, onde $\vec{r}_{CM} = \sum_i \vec{r}_i/N$ é a posição do centro de massa do string. Apesar das semelhanças entre $\langle R_E \rangle$ e $\langle R_G \rangle$, eles são grandezas distintas.

Quando a temperatura tende ao infinito, o peso de Boltzmann $P(E_i) = e^{-E_i/(k_B T)}$ tende a 1, todos os microestados do sistema se tornam equiprováveis e as médias ponderadas tendem a médias aritméticas. Quando a temperatura é pequena, o peso de Boltzmann favorece os microestados de menor energia. Quando a temperatura tende a zero, as médias tendem aos valores correspondentes dos microestados fundamentais.

A transição de fase, que é o objetivo principal da análise canônica, é caracterizada por uma mudança abrupta em uma propriedade física do sistema em função de algum outro parâmetro de controle (no caso aqui, a temperatura). Como estamos lidando com um sistema finito não temos precisamente uma mudança abrupta mas uma mudança mais ou menos acentuada. Nesta mudança acentuada é que identificamos um sinal de transição de fase. Um pico no calor específico, por exemplo, que é perceptível para tamanho finito pode desaparecer no limite termodinâmico, por isso, nem todo pico do calor específico corresponde a uma transição de fase, mas utilizamos aqui o termo transição de fase para estas mudanças mais ou menos acentuadas.

Como consideramos todos os microestados acessíveis ao sistema, para um dado conjunto de parâmetros de controle (número de partículas e temperatura), nossa análise é computacionalmente exata, ou seja, sem aproximações como ocorre nos métodos de Monte Carlo. Por causa disto, os gráficos aqui apresentados não apresentam barras de erro.

3.2.1 Rede Quadrada Strings RG

Os strings RG são os strings, da rede quadrada, de mais baixa energia. Como a medida da energia influenciada pela rede para stings RG pode ser bem aproximada por

$$E_D = 4E_F + C \quad (3.1)$$

lidaremos somente com strings fora da rede, o que corresponde a um gasto computacional bem menor. Assim sendo, usamos E_D em vez de E_F .

Pelo mesmo argumento utilizado na eq. 2.3 para evitar overflow, nas medidas canônicas a constante C é irrelevante. Na medida do calor específico, c , por exemplo, ela não faz diferença pois

$$\begin{aligned} \langle E_D \rangle &= \frac{\sum_{E_D} E_D e^{-E_D/(k_B T)}}{\sum_{E_D} e^{-E_D/(k_B T)}} = \frac{\sum_{E_F} (4E_F + C) e^{-(4E_F + C)/(k_B T)}}{\sum_{E_F} e^{-(4E_F + C)/(k_B T)}} \\ &= \frac{\sum_{E_F} 4E_F e^{-4E_F/(k_B T)}}{\sum_{E_F} e^{-4E_F/(k_B T)}} + C = 4 \langle E_F \rangle + C, \\ \langle E_D \rangle^2 &= 16 \langle E_F \rangle^2 + 8 \langle E_F \rangle C + C^2. \end{aligned}$$

Analogamente

$$\langle E_D^2 \rangle = 16 \langle E_F^2 \rangle + 8 \langle E_F \rangle C + C^2.$$

Portanto

$$c = \frac{\langle E_D^2 \rangle - \langle E_D \rangle^2}{Nk_B T^2} = \frac{16(\langle E_F^2 \rangle - \langle E_F \rangle^2)}{Nk_B T^2}.$$

Observe que o fator 4 nas exponenciais é só um fator de escala. Neste caso, assumimos a temperatura adimensional como $\frac{1}{\tilde{T}} = \frac{4D}{k_B T}$. Neste contexto, o calor específico adimensional \tilde{c} é dado por

$$E_F = D\tilde{E}_F$$

$$c = \frac{16(\langle E_F^2 \rangle - \langle E_F \rangle^2)}{Nk_B T^2} = \frac{16D^2(\langle \tilde{E}_F^2 \rangle - \langle \tilde{E}_F \rangle^2)}{Nk_B(4D\tilde{T}/k_B)^2} = \frac{(\langle \tilde{E}_F^2 \rangle - \langle \tilde{E}_F \rangle^2)}{N\tilde{T}^2} k_B = \tilde{c}k_B.$$

O que medimos é \tilde{c} e quando queremos conhecer o calor específico em unidades internacionais multiplicamos \tilde{c} por k_B .

Nas medidas não focamos em aproximações tipo 1^{os} vizinhos porque estas aproximações geram resultados diferentes dos reais (varia a quantidade de picos dos gráficos e valores de temperaturas críticas). Contudo, o estudos de primeiros vizinhos ainda é interessante pois é simples e já fornece informações sobre o sistema sem raio de corte. A aproximação da eq. 3.1 foi obtida partindo do sistema de 1^{os} vizinhos. Mais ao final do capítulo entramos em mais detalhes sobre este sistema e falaremos das diferenças e semelhanças com o sistema sem raio de corte.

Para strings RG de tamanho 3 até 29 o gráfico do calor específico apresenta até 3 picos: um mais intenso que aparece sempre, um menos intenso, numa região de menor temperatura, que as vezes aparece, as vezes não aparece, e um menos intenso ainda, em baixíssima temperatura, que só aparece para $N = 23$ e 24. As temperaturas dos picos variam de $T \approx 0.002$ até $T \approx 3.5$. O calor específico para alguns tamanhos de string é mostrado na Fig. 3.13. Os dados aqui considerados foram checados de diversas formas.

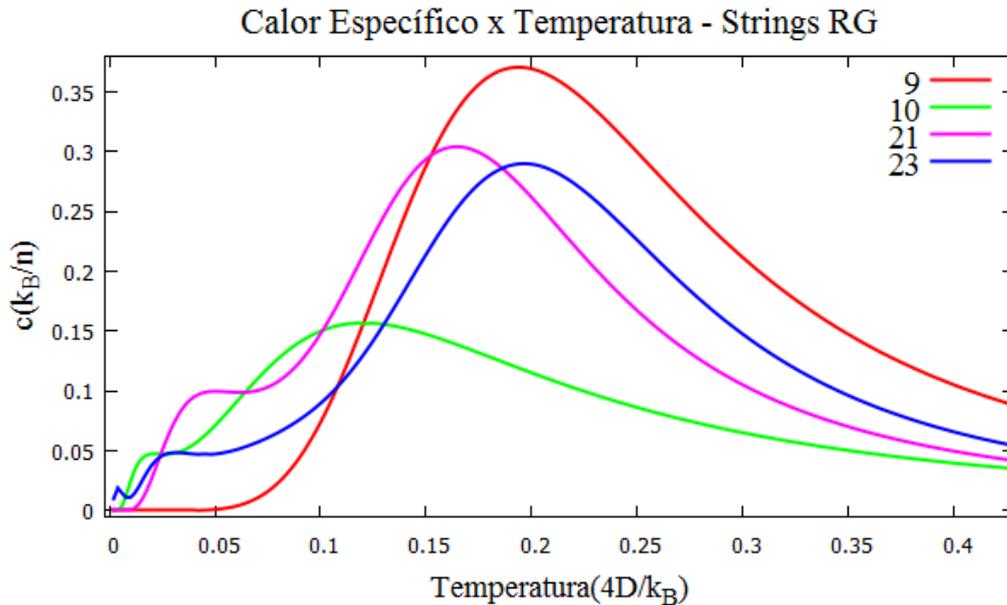


Fig. 3.13: Calor Específico de strings RG de alguns tamanhos.

Como o calor específico é a derivada de $\langle E \rangle$ dividido por N , os picos no calor específico indicam variações acentuadas de $\langle E \rangle$ como função da temperatura. Quanto maior é o pico, em uma determinada temperatura, mais $\langle E \rangle$ se aproxima de uma descontinuidade tipo salto, onde identificamos uma transição de fase. É mais fácil identificar uma transição de fase pelo pico do calor específico do que pela inclinação aparente de $\langle E \rangle$.

O comportamento dos gráficos do calor específico, em relação a temperatura, tem comportamento variado. A intensidade dos picos, assim como as temperaturas deles, oscilam com o aumento do tamanho string. Pela análise de 1^{os} vizinhos vemos que esta oscilação está ligada ao caráter de longo alcance das interações que permite que spins mais distanciados, ao longo da cadeia, interajam mais fortemente do que spins mais próximos, ao longo da cadeia.

Antes de continuar a nossa análise da transição de fase, vejamos o comportamento da conformação dos microestados fundamentais deste sistema. A *Fig. 3.14* mostra algumas conformações de microestados fundamentais para alguns tamanhos de strings. Os microestados fundamentais são em geral mais compactos, com pequena distância ponta-a-ponta e grande quantidade de contatos. Os contatos, no caso dos strings RG, são sempre de spins antiparalelos (energia negativa), que é uma consequência imposta pela geometria do sistema. Este comportamento para os microestados fundamentais é observado em geral, isto é, nem sempre os microestados fundamentais minimizam a distância ponta-a-ponta, maximizam a quantidade de contatos e são os mais compactos. Por exemplo, para $N = 9, 10$ e 11 as conformações de menor energia não maximizam a quantidade de contatos, mas minimizam a distância ponta-a-ponta. Para $N = 7$ temos o contrário. Contudo, a maximização da quantidade de contatos dos microestados fundamentais é a característica mais bem observada. As conformações de maior energia são sempre os strings em formato de escada, mais esticados, que é a forma mais simples de string.

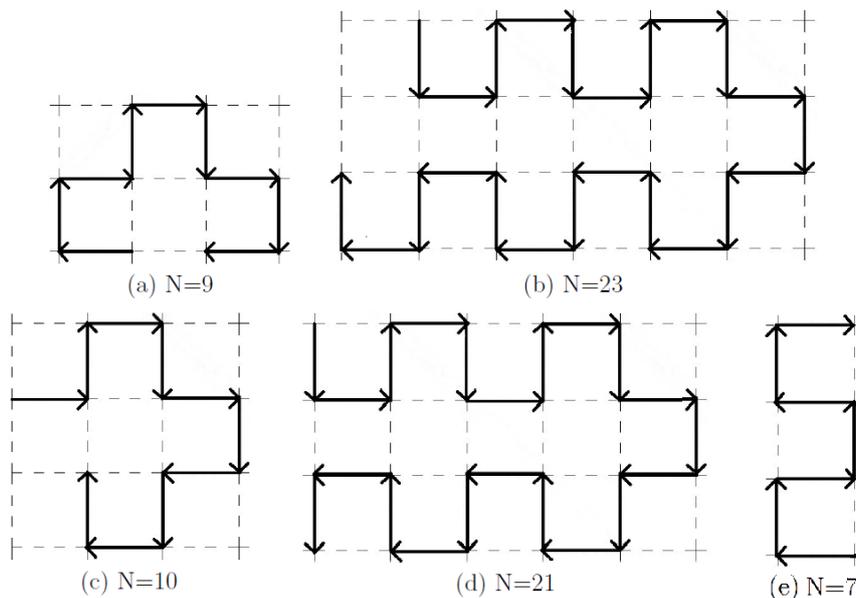


Fig. 3.14: Conformações de menor energia para alguns tamanhos de strings RG. Para outros tamanhos o comportamento é similar.

Voltando à nossa análise sobre as transições de fase, vejamos o comportamento da média da distância ponta-a-ponta, $\langle R_E \rangle$, e média do raio de giração, $\langle R_G \rangle$, como função da temperatura (*Fig. 3.15*). Os gráficos de $d \langle R_E \rangle / dT$ e de $d \langle R_G \rangle / dT$ como função da temperatura, como mostrado nas *Figs. 3.16* e *3.17*, apresentam até 3 picos e oscilam assim como no calor específico. Observamos que estas quantidades indicam as mesmas temperaturas de transição de fase (temperatura dos picos) do calor específico, para um mesmo N .

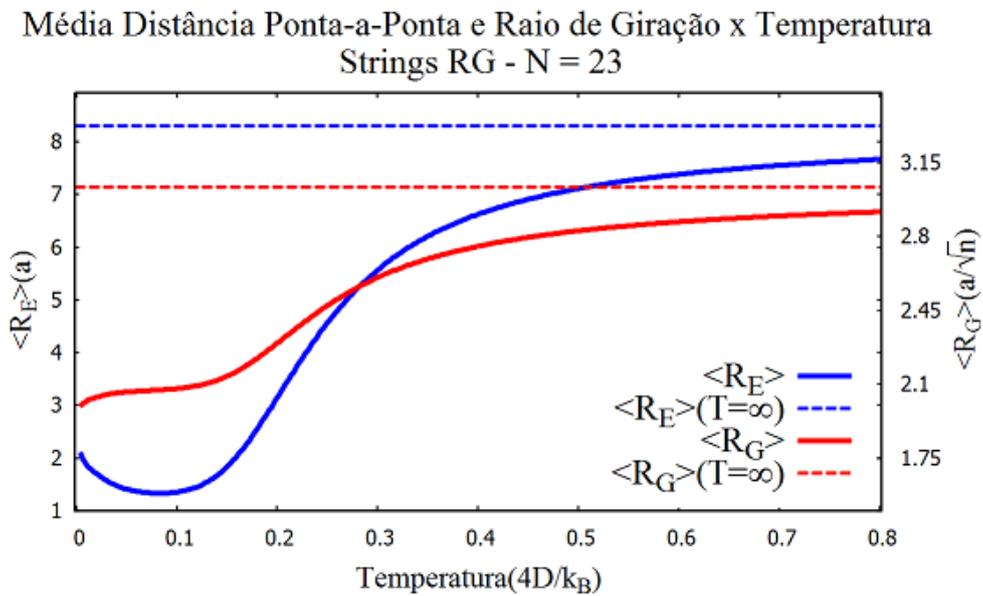


Fig. 3.15: Média de $R_E(R_G)$ para $N = 23$. Em $T = 0$ a média tende ao $R_E(R_G)$ do microestado fundamental e $T \rightarrow \infty$ a média tende a média aritmética dos $R_E(R_G)$ de todos os microestados.

Estas derivadas são obtidas simplesmente derivando os gráficos das suas respectivas quantidades. Assim como no calor específico o pico de maior temperatura aparece sempre e é mais intenso. Em casos raros os picos de menor temperatura são mais intensos (por exemplo, $N = 10$). Os picos em baixa temperatura as vezes são pra cima (crescimento de $\langle R_E \rangle$ ou $\langle R_G \rangle$ com a temperatura) e as vezes são para baixo, enquanto que o pico em alta temperatura, que sempre aparece, é sempre pra cima tanto em $d \langle R_E \rangle / dT$ quanto em $d \langle R_G \rangle / dT$. Por isso o pico em alta temperatura é mais bem comportado e sempre indica um estiramento do string. Picos que aparecem, por exemplo, no calor

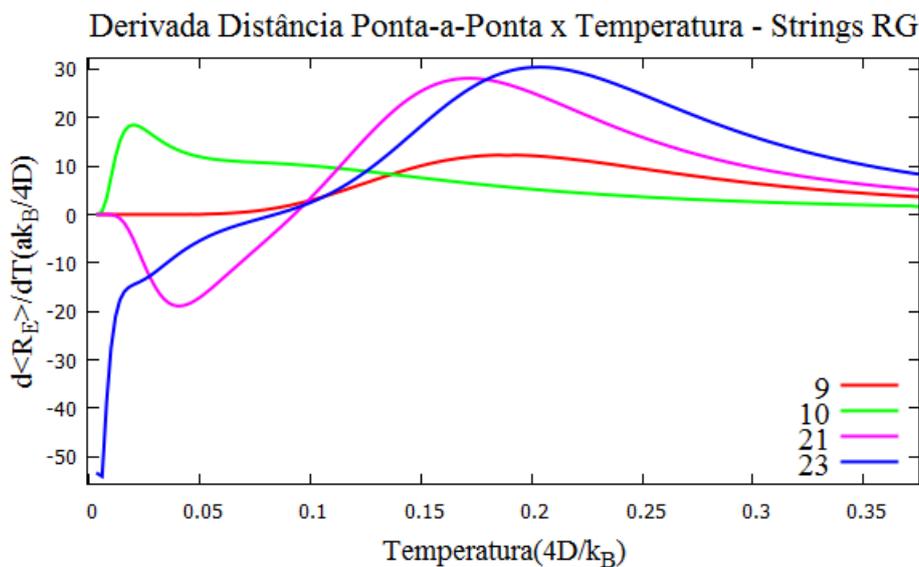


Fig. 3.16: $d \langle R_E \rangle / dT$ para alguns tamanhos de strings RG. Os picos estão associados às transições de fase indicadas pelo calor específico.

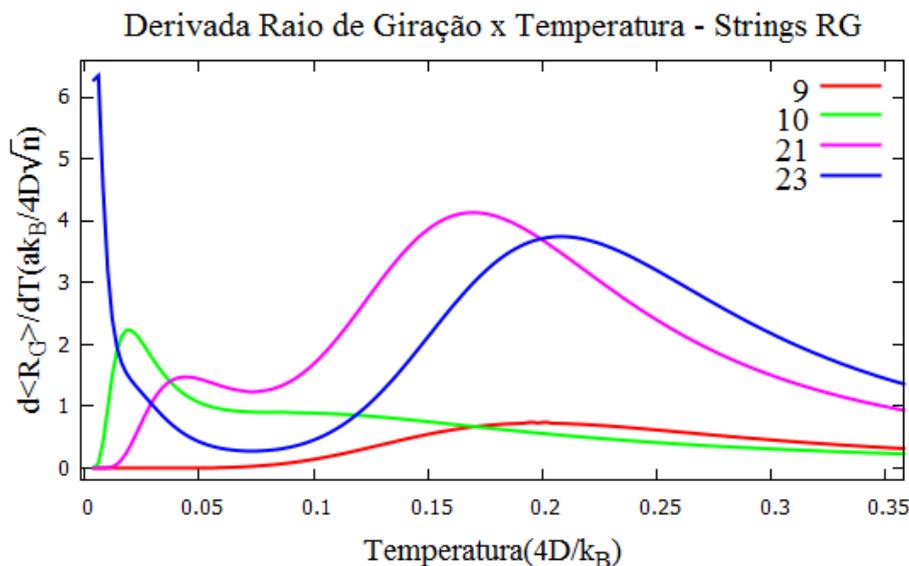


Fig. 3.17: $d \langle R_G \rangle / dT$ para $N = 9, 10, 21$ e 23 . Para $N = 21$ e 23 a fase de mais baixa temperatura é caracterizada pela minimização de R_G (pico pra cima) mas não pela minimização de R_E (pico pra baixo).

específico para um determinado N podem não aparecer no gráfico de $d \langle R_E \rangle / dT$ ou de $d \langle R_G \rangle / dT$, e vice-versa. Uma transição de fase bem refletida em $\langle R_G \rangle$ pode ser imperceptível em termos de $\langle R_E \rangle$.

Em baixa temperatura sempre que $d \langle R_E \rangle / dT$ tem um pico pra baixo, correspondentemente, $d \langle R_G \rangle / dT$ tem um pico pra cima, e vice versa, mas podendo ambos, em uma mesma transição de fase, ter um pico pra cima. Isto indica um comportamento competitivo do sistema em minimizar R_E e R_G . Por exemplo, para $N = 21$ e 23 a fase de mais baixa temperatura é caracterizada pela minimização de R_G (pico pra cima) mas não pela minimização de R_E (pico pra baixo).

Para podermos especificar mais as características das fases deste sistema vejamos o comportamento da quantidade de contatos antiparalelos, N_{AP} , que representa a segunda contribuição na energia mais intensa, depois das quinas. Para um dado N a quantidade de quinas nos strings RG é constante, por isto a sua análise é trivial. A Fig. 3.18 mostra o comportamento de $d \langle N_{AP} \rangle / dT$ para $N = 9, 10, 21$ e 23 . Para um dado N a média de N_{AP} é dada por

$$\langle N_{AP} \rangle (T, N) = \frac{\sum_{\sigma_i} N_{AP}(\sigma_i) e^{-E_{\sigma_i}/(k_B T)}}{Z}$$

de onde tiramos a derivada em relação a temperatura, $d \langle N_{AP} \rangle / dT$. Para esta quantidade vemos que a transição de fase em temperatura mais alta é sempre acompanhada por uma queda na quantidade de contatos, assim como $\langle R_E \rangle$ e $\langle R_G \rangle$ são acompanhados por um crescimento. $\langle N_{AP} \rangle$ tem comportamento variado nas transições de baixa temperatura, assim como $\langle R_E \rangle$ e $\langle R_G \rangle$, mas na maioria das vezes as transições de baixa temperatura são acompanhadas por uma queda nesta quantidade. Enquanto que para $N = 10$ a fase de mais baixa temperatura, que inclui o microestado fundamental, minimiza R_E e R_G , não maximiza N_{AP} , o que indica também um comportamento competitivo do sistema, para esta quantidade, em baixa temperatura.

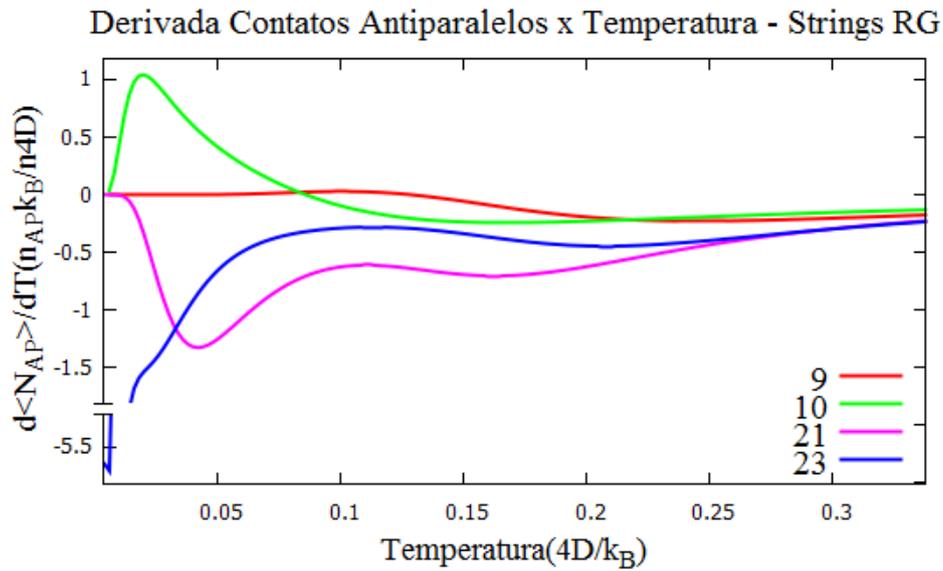


Fig. 3.18: $d \langle N_{AP} \rangle / dT$. Para $N = 10$ a fase de mais baixa temperatura minimiza R_E e R_G mas não maximiza N_{AP} .

Os picos em $d \langle R_E \rangle / dT$ ou $d \langle R_G \rangle / dT$ com ordenada negativa indicam que a distância ponta-a-ponta, ou o raio de giração, diminuem com o aumento da temperatura. Em contrapartida as conformações de maior energia são mais esticadas (em média), o que implica em maiores R_E e R_G . Observamos que esses picos, de baixa temperatura, estão ligados a uma queda imediata de R_E e R_G com o aumento da energia dos microestados, partido do microestado de menor energia. A Fig. 3.19 ilustra esta queda imediata em R_E para $N = 15$.

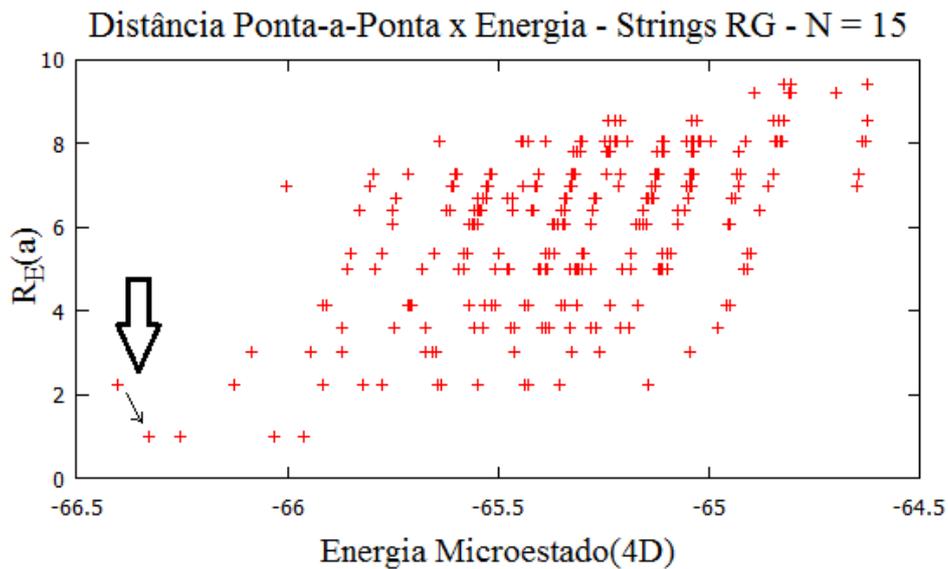


Fig. 3.19: Quando partimos do microestado de menor energia, no sentido crescente da energia, o microestado imediatamente seguinte tem R_E menor. Correspondentemente, a derivada de R_E como função da temperatura tem um pico em baixa temperatura para baixo, como mostrado na Fig. 3.20.

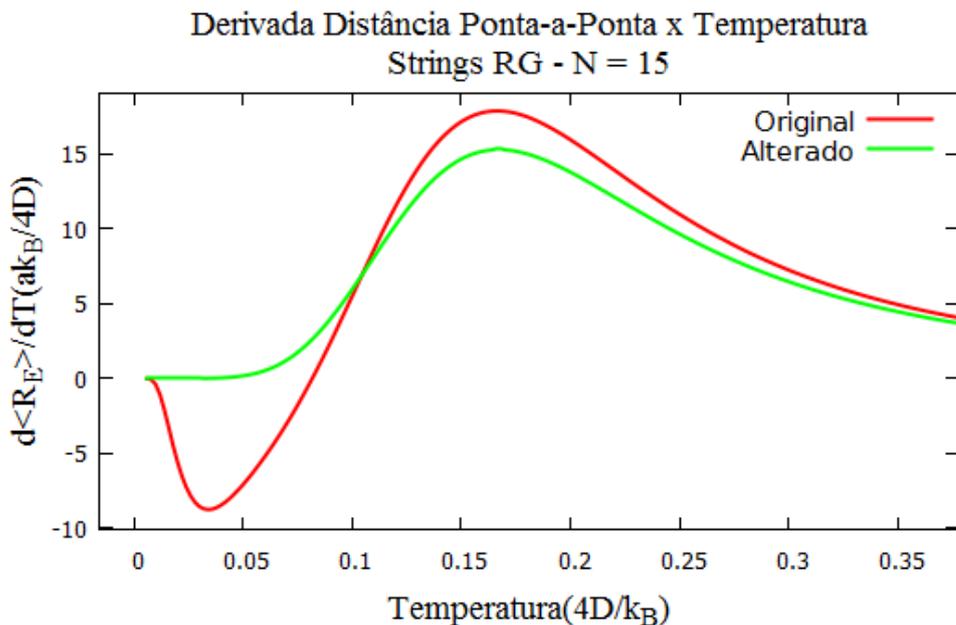


Fig. 3.20: Acima mostramos $d \langle R_E \rangle / dT$ para $N = 15$ sem alterações (Original). Quando aumentamos o valor de R_E do segundo e terceiro microestados de menor energia para o valor de R_E do microestado fundamental, 2.23a, (ver *Fig. 3.19*) o pico de baixa temperatura desaparece (Alterado).

Quando eliminamos estas quedas imediatas em R_E o pico de menor temperatura em $d \langle R_E \rangle / dT$ desaparece. Isso mostra que os picos em baixa temperatura estão relacionados a estas quedas imediatas de R_E e R_G . Todos os gráficos com picos em baixa temperatura são acompanhados por estas quedas, que podem não ser muito acentuadas mas ocorrem em um curto intervalo de energia. A *Fig. 3.20* mostra o desaparecimento do pico em baixa temperatura com a eliminação da queda imediata em R_E . O mesmo vale para picos de baixa temperatura com ordenada positiva. Podemos entender essa sensibilidade de $d \langle R_E \rangle / dT$ com os R_E 's de baixa energia observando que a probabilidade utilizada nas nossas médias é a função exponencial, que favorece exponencialmente os R_E 's de conformações de mais baixa energia. O gráfico de R_G como função da energia do microestado, $R_G(E)$, é parecido com o de $R_E(E)$ só que os valores de R_G são mais uniformemente distribuídos. A origem dos picos em mais baixa temperatura de $d \langle R_G \rangle / dT$ é a mesma de $d \langle R_E \rangle / dT$.

Dos resultados obtidos, o comportamento de $d \langle R_G \rangle / dT$ se assemelha mais ao comportamento do calor específico. Todos os picos do calor específico tem um pico correspondente em $d \langle R_G \rangle / dT$. Assim, as transição de fase indicadas pelo calor específico se refletem mais sobre $\langle R_G \rangle$ do que sobre $\langle R_E \rangle$ e $\langle N_{AP} \rangle$.

Com isso, podemos concluir que as fases tem comportamento variado em baixa temperatura, indicando uma competição na minimização de R_E e R_G e uma maximização de N_{AP} , mas as transição de fase em alta temperatura ($T \approx 0.15 - 0.20$) sempre corresponde a um estiramento do string, porque os picos de $d \langle R_E \rangle / dT$ e $d \langle R_G \rangle / dT$, que sempre aparecem, são sempre pra cima, enquanto que em $d \langle N_{AP} \rangle / dT$ são sempre pra baixo. Não conseguimos maiores especificações sobre as transições de fase em baixa temperatura mas percebemos que dessas, a de mais baixa temperatura pode ser caracteriza por uma

quantidade muito pequena de microestados, os microestados de mais baixa energia.

Uma observação interessante sobre os strings RG é que eles podem ser também as excitações de mais baixa energia do sistema degenerado, isto é, um sistema onde todas as topologias que satisfaçam a regra do gelo tenham a mesma energia. Assim, a fase de baixa temperatura seria a mesma dos strings RG. É claro, no entanto, que modificações na geometria da rede podem mudar este cenário por mudar as interações entre os spins que compõem o string.

3.2.2 Rede Quadrada Strings CAE

Para strings CAE não estabelecemos uma relação entre a energia medida fora da rede com a energia medida dentro da rede porque estes não se comportam tipo monopolos de Nambu quando estão sobre a influência da rede. Os strings são considerados só isoladamente, sem relação com a rede. Fazemos o seu estudo idealizando a situação em que o estado fundamental do sistema seja degenerado de tal modo que seja possível que todos os vértices intermediários de um string obedeçam a regra do gelo. Com isso poderíamos associar quase-partículas tipo monopolos magnéticos aos extremos do string.

Para os strings CAE as conformações possíveis são todas as conformações dos strings RG mais as conformações que não obedecem a regra de alternância de direção. As conformações de menor energia dos strings CAE são justamente as conformações dos strings RG. As conformações mais energéticas dos strings CAE são os strings totalmente retilíneos.

Para este sistema estudamos strings de tamanho $N = 2, \dots, 14$. O calor específico dos strings CAE são, todos, muito parecidos com o calor específico dos strings RG, com a diferença da existência de mais um pico em um intervalo de temperatura mais alto, como mostra as *Figs. 3.22 e 3.21*.

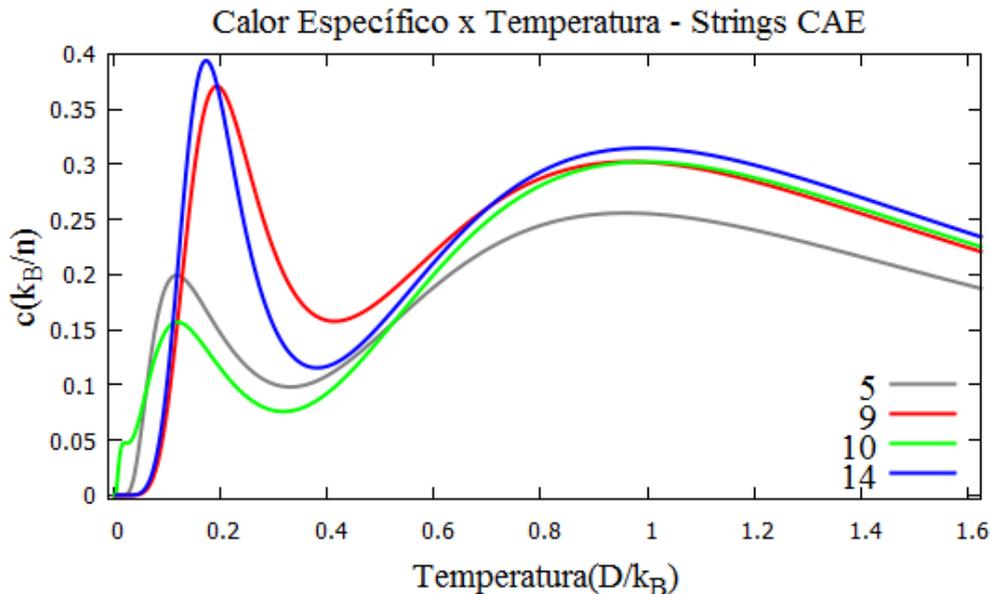


Fig. 3.21: Calor específico para alguns tamanhos de string. Os gráficos são semelhantes aos dos strings-RG com a inclusão de mais um pico próximo em $T \approx 1$.

Estes picos em temperatura mais alta são em torno de $T \approx 1$ e são mais bem compor-

tados do que aqueles observados nos strings RG. As ordenadas e abscissas dos picos quase não oscilam, com o aumento de N , e o calor específico se comporta, aproximadamente, como uma envoltória para N 's menores, sem acusar uma divergência.

Os gráficos de $d \langle R_E \rangle / dT$ e $d \langle R_G \rangle / dT$ são igualmente semelhantes aos dos

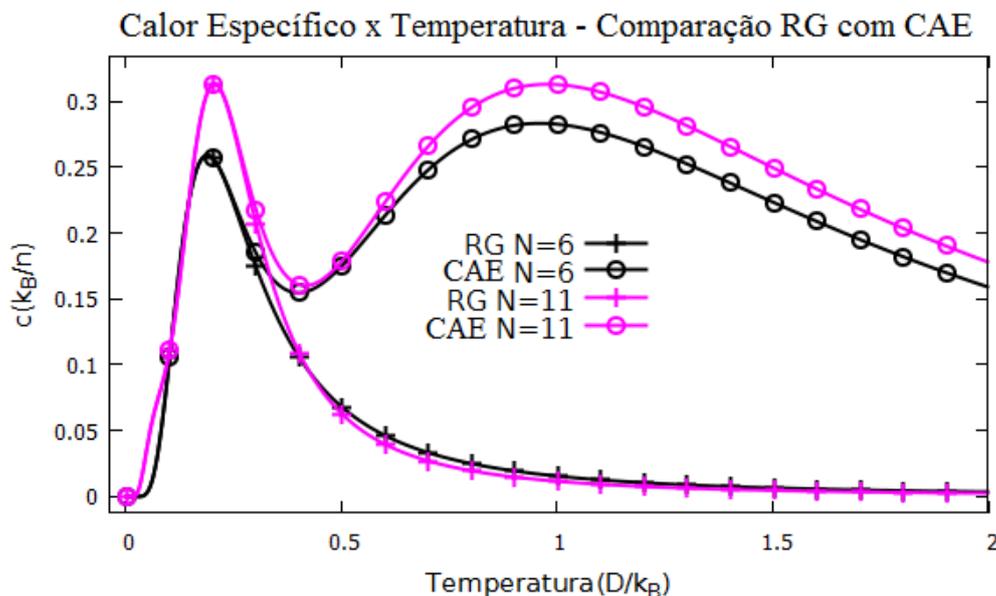


Fig. 3.22: Calor específico para alguns tamanhos de string. Os gráficos são semelhantes aos dos strings-RG com a diferença da existência de mais um pico próximo a $T = 1$.

strings RG mas o pico em $T = 1$ neles é quase imperceptível, como mostra a *Fig. 3.23*. Sendo assim estes gráficos não nos fornecem informações complementares sobre o comportamento da transição de fase em $T = 1$. A variação acentuada destas quantidades se dá nas transições correspondentes aos strings RG.

Para compor uma análise complementar a transição de fase em $T = 1$ analisamos a média da quantidade de quinas $\langle N_Q \rangle$ dos strings. As quinas representam a contribuição na energia mais intensa e a sua quantidade é variável para strings CAE. As conformações que possuem maior quantidade de quinas possuem energias maiores, em módulo. $\langle N_Q \rangle$, diferente $\langle R_E \rangle$ e $\langle R_G \rangle$, apresenta uma queda acentuada em $T = 1$, conforme mostra a *Fig. 3.24*. As temperaturas dos picos são idênticas as temperaturas dos picos do calor específico.

Com isso, podemos dizer que a transição de fase em $T = 1$ do calor específico é acompanhado por uma queda acentuada na quantidade de quinas. Na análise de 1^{os} vizinhos vemos que, de fato, esta transição de fase esta ligada a interação das quinas. No sistema de 1^{os} vizinhos a transição de fase parece ser bem comportada porque corresponde a interação de vizinhos só ao longo da cadeia do string, não permitindo que um spin do começo do string interaja com um spin do final do string ($N \geq 3$). A interação das quinas é, absolutamente falando, de 1^{os} vizinhos.

A segunda interação par spin-spin mais forte do sistema é a interação entre spins conectados e colineares. A análise desta quantidade não é interessante porque é o caso completar das quinas. Partindo para a terceira interação par spin-spin mais favorável

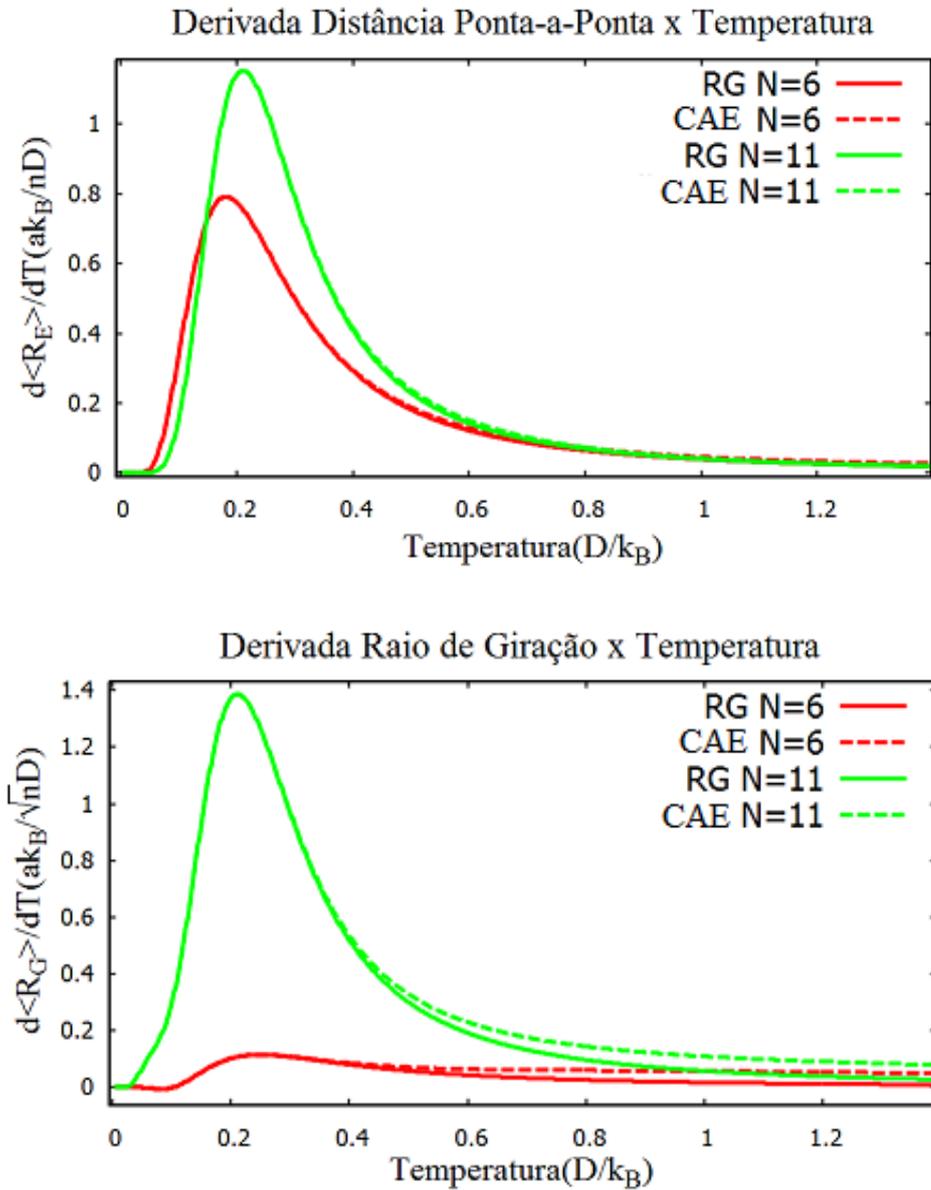


Fig. 3.23: Comparação de $d\langle R_G \rangle / dT$ e $d\langle R_E \rangle / dT$ entre strings RG e CAE. Pico em $T = 1$ é pouco perceptível, especialmente para $d\langle R_E \rangle / dT$.

temos a interação de spins antiparalelos distanciados pela unidade. A análise da quantidade de contatos antiparalelos N_{AP} , tal como feita para N_Q , mostra que a transição de fase em $T = 1$ não é acompanhada por uma mudança acentuada nesta quantidade. A mudança mais acentuada nesta quantidade se dá nas transições de fase correspondentes aos strings RG. A Fig. 3.25 mostra o comportamento desta quantidade para os strings CAE. Investimos nesta quantidade imaginando uma possível fase de faixas (stripes).

Não podemos dizer com precisão as características geométricas da transição de fase em $T = 1$, mas podemos dizer que ela é acompanhada por uma queda acentuada na quantidade de quinas. Como a quantidade variável de quinas é uma característica própria dos strings CAE esta transição de fase, em $T = 1$, é uma transição de fase característica dos strings CAE.

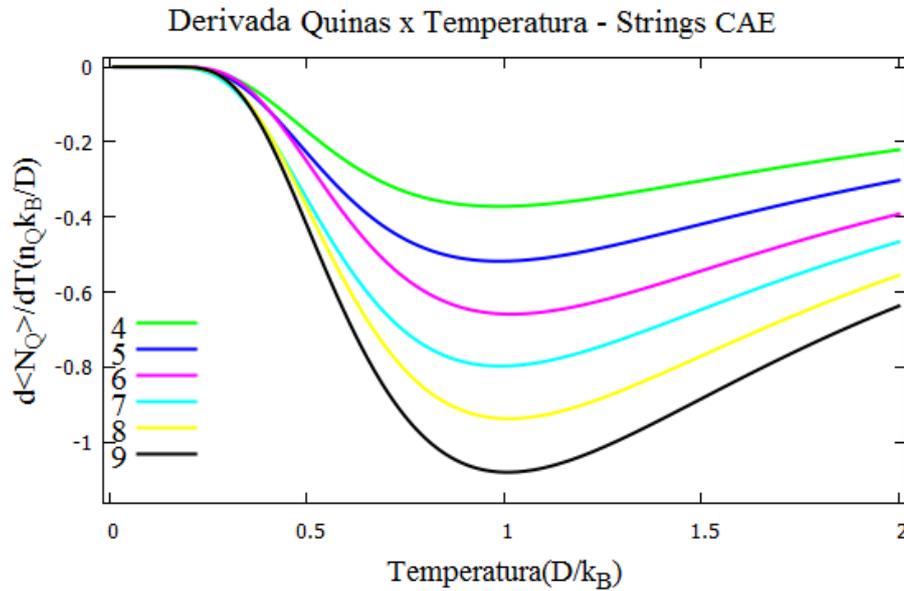


Fig. 3.24: Derivada de $\langle N_Q \rangle$. A transição de fase em $T = 1$ é acompanhada por uma queda acentuada na quantidade de quinas dos strings.

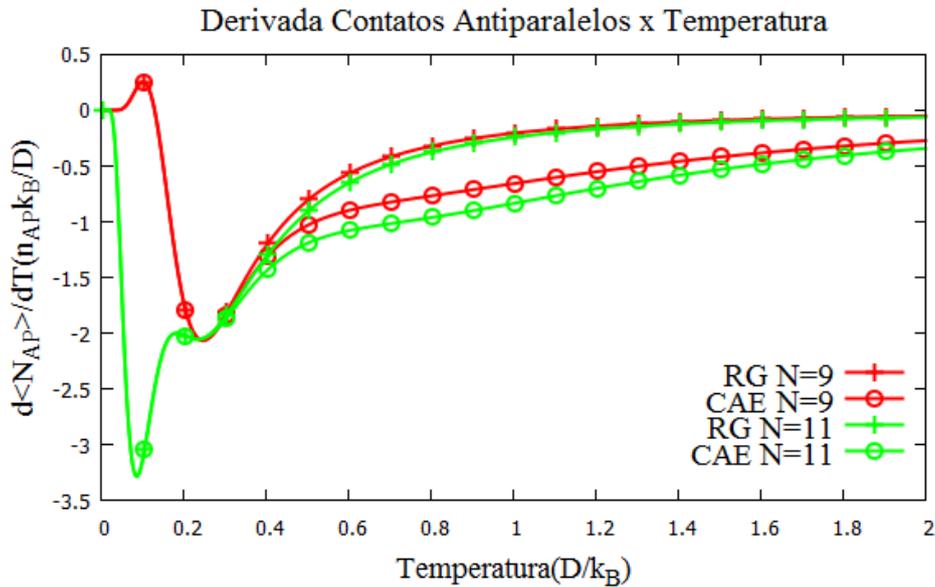


Fig. 3.25: Derivada do número de contatos antiparalelos, N_{AP} , como função da temperatura.

3.2.3 Strings de 1^{os} Vizinhos Na Rede Quadrada

Designamos por 1^{os} vizinhos o sistema com menor raio de corte possível com interação não-trivial. Para strings RG esse raio de corte é $r = 1a$ e permite apenas a interação das quinas e a dos contatos.

A primeira observação que fazemos sobre os strings RG de 1^{os} vizinhos é que eles são parecidos com os homopolímeros dispersos em solvente ruim [21]. Este modelo é baseado em CAE's, assim como o nosso, e só existe interação dos monômeros distanciados da unidade, em um valor constante negativo, como ilustrado na *Fig. 3.26*.

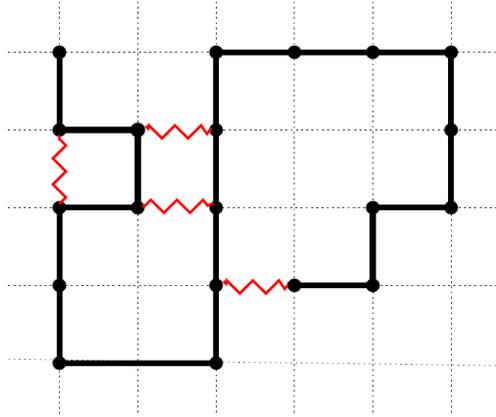


Fig. 3.26: Modelo dos homopolímeros. Somente os monômeros distanciados da unidade interagem. O valor da energia associada a esta interação é constante e negativa. Retirado de [21].

Nos strings RG, para todos os tamanhos estudados, a energia de interação dos contatos é sempre negativa, isto é, só de spins antiparalelos. A geometria do sistema é tal que proíbe a interação de contatos de spins de mesmo sentido. O modelo dos strings RG de 1^{os} vizinhos só não é exatamente igual ao modelo dos homopolímeros porque as interações deles são atribuídas aos elos e nos homopolímeros elas são atribuídas aos sítios, e além disso, o modelo dos homopolímeros é definido para CAE's de formato qualquer enquanto que nos strings RG as CAE's são restringidas a regra do gelo. Isso gera diferenças entre os modelos.

O calor específico dos strings RG de 1^{os} vizinhos apresenta apenas um pico para qualquer N , cuja temperatura não se aproxima dos valores correspondentes dos strings RG sem raio de corte, como mostra as *Figs. 3.27* e *3.28*. Também é observada uma mudança no comportamento relativo do calor específico para diferentes N 's e o calor específico oscila assim como no sistema sem raio de corte. O sistema de 1^{os} vizinhos detecta essencialmente só uma transição de fase com precisão ruim.

Neste sistema todos os valores de energia acessíveis são igualmente separados por $-1D$. Não tem como haver uma queda imediata em R_E , por exemplo, como função da energia, assim como foi observado no sistema sem raio de corte, o que pode ser a causa do desaparecimento dos picos de baixa temperatura do calor específico.

Para $d < R_G > /dT$ e $d < R_E > /dT$ o resultado é similar ao do calor específico quando feita a comparação com o sistema sem raio de corte. O porém é que estas quantidades as vezes apresentam mais picos que o calor específico, para o mesmo N . Apesar das discordâncias com o sistema sem raio de corte, as temperaturas das transições indicadas por $d < R_G > /dT$ e $d < R_E > /dT$ são próximas daquelas indicadas pelo calor específico. Não entraremos em mais detalhes sobre $< R_E >$ e $< R_G >$ porque estamos apenas procurando uma relação deste sistema com o sistema sem raio de corte e observando as características gerais do modelo.

Para os strings CAE de 1^{os} vizinhos as interações permitidas são só entre os spins

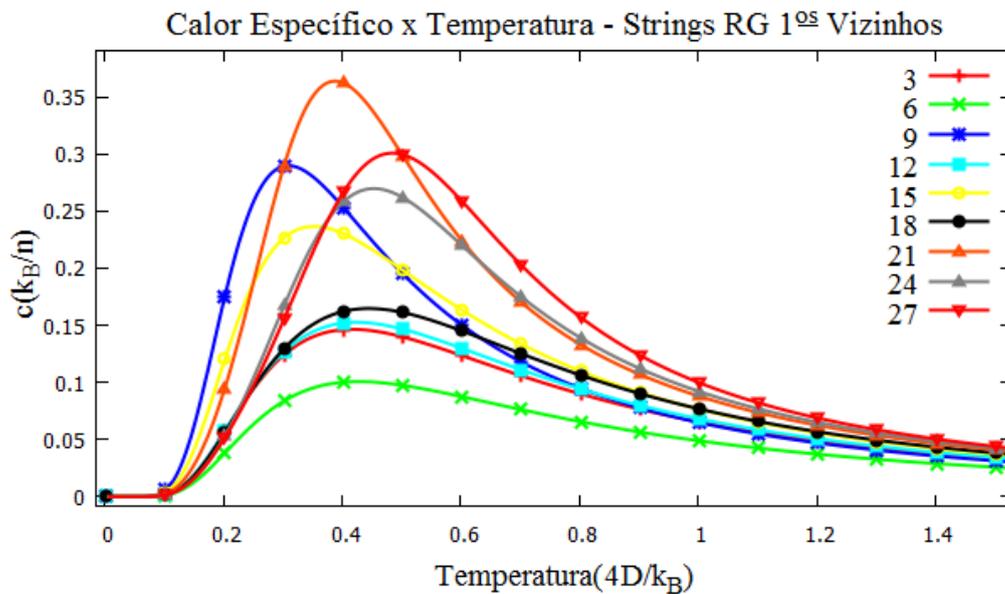


Fig. 3.27: Calor específico dos strings RG de 1^{os} vizinhos. Os gráficos apresentam um único pico para qualquer N .

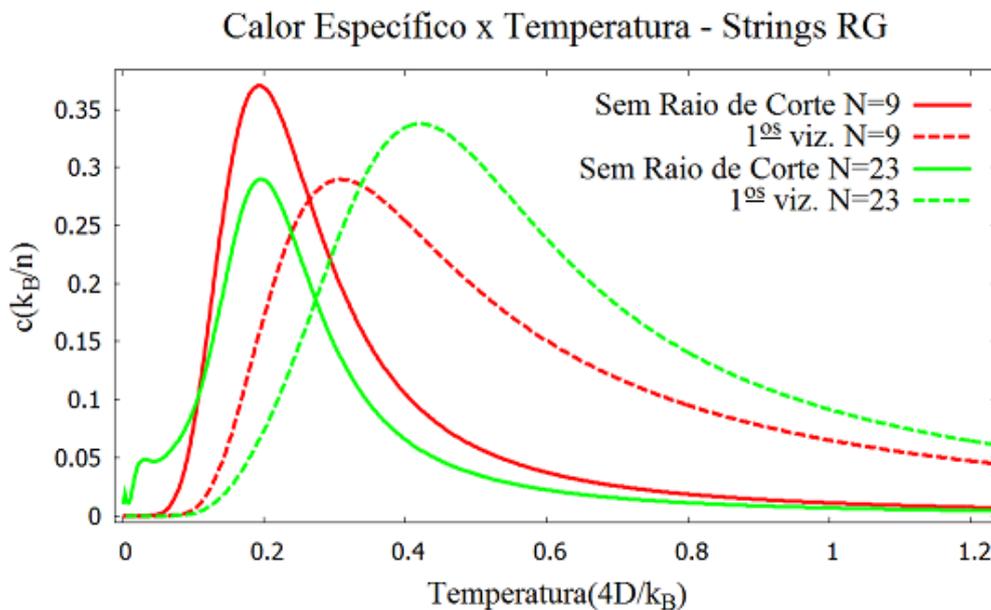


Fig. 3.28: Comparação do calor específico dos strings RG de 1^{os} vizinhos com o mesmo sistema sem raio de corte.

adjacentes perpendiculares entre si (quinas) que no caso corresponde ao raio de corte $r = \sqrt{0.5}a$.

O calor específico dos strings CAE de 1^{os} vizinhos apresenta 1 pico apenas, bem comportado, onde as ordenadas e abscissas dos gráficos não oscilam com o aumento de N e o calor específico funciona como uma espécie de envoltória para N menores, sem acusar divergência. A Fig. 3.29 mostra isso. Este pico corresponde a transição de fase em $T = 1$ para o sistema sem raio de corte. Entendemos que este bom comportamento do calor específico está ligado ao curto alcance das interações, não só espacialmente mas ao

longo da cadeia, que proíbe que spins mais distanciados ao longo da cadeia interajam mais fortemente do que spins mais próximos ao longo da cadeia.

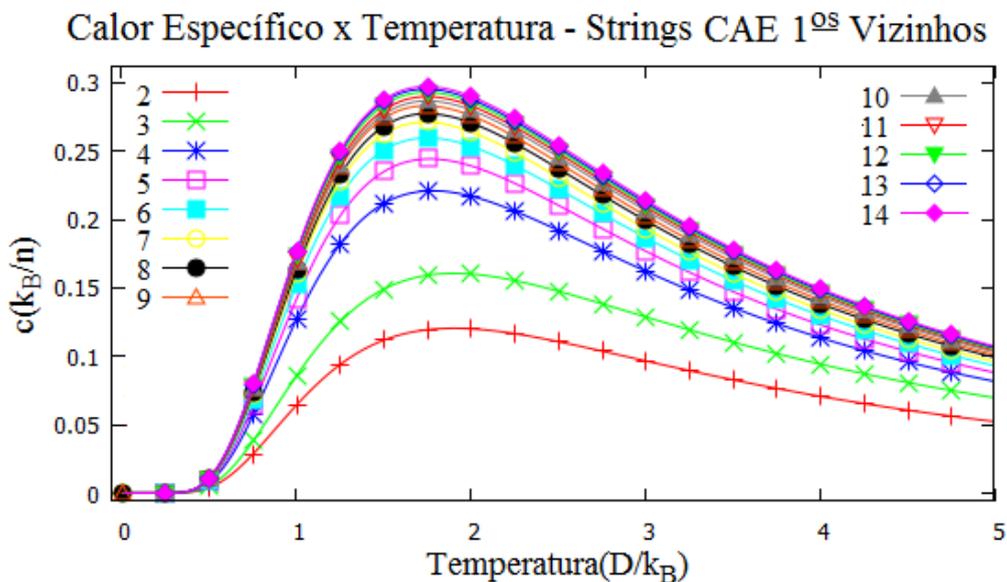


Fig. 3.29: Calor específico dos strings CAE de 1ºs vizinhos. Os gráficos são bem comportados.

Naturalmente, quando aumentamos o raio de corte os resultados se aproximam dos resultados do sistema sem raio de corte. A Fig. 3.30 ilustra o comportamento do calor específico com o aumento do raio de corte. Para 2ºs vizinhos vemos uma melhor aproximação do calor específico deste sistema com o sistema sem raio de corte. Mesmo assim esta aproximação ainda não é razoável.

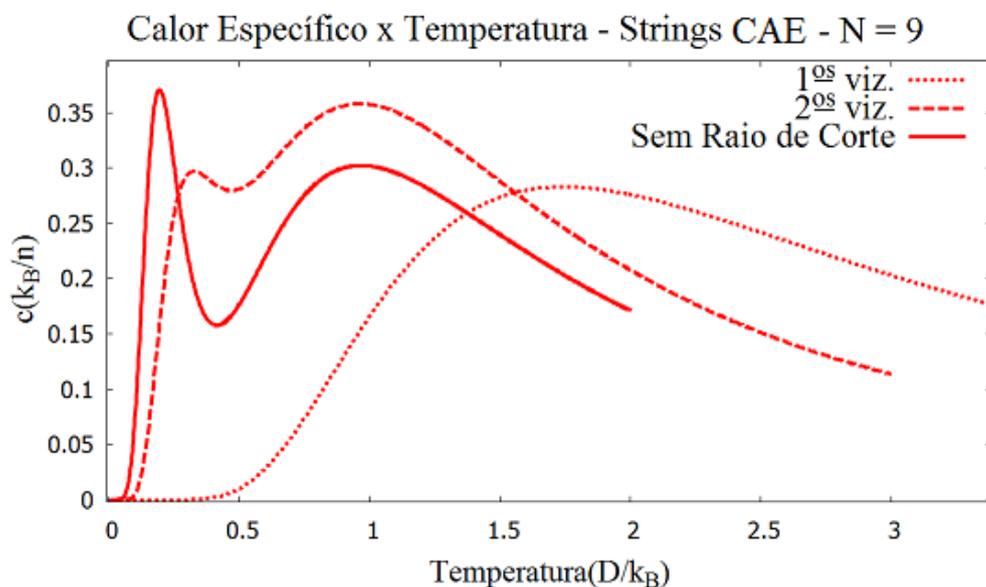


Fig. 3.30: Comparação do calor específico dos strings RG de 1ºs e 2ºs vizinhos com o sistema sem raio de corte.

3.2.4 Rede Hexagonal

Explorando outras redes optamos por estudar a rede hexagonal. Nesta rede, ao contrário do que ocorre nas outras redes estudadas, os spins pertencentes a um mesmo vértice são equidistantes entre si e interagem igualmente. Por causa disto, e do comportamento da energia mostrado na *Fig. 3.9*, esperamos uma física diferente para esta rede do que para as outras. Nesta rede é observada a ocorrência de excitações com quase partículas tipo monopolos magnéticos associados aos extremos dos strings [22] mas não entraremos em detalhes sobre a sua estrutura. Por isto, simplesmente consideramos os strings isoladamente sem nenhuma restrição sobre a forma das CAE's que os constituem.

Como mostrado na *Fig. 3.9*, a energia como função dos strings desta rede apresenta um único salto na energia, diferente da rede quadrada de strings CAE que apresenta vários saltos (*Fig. 3.3*). Na rede quadrada os saltos na energia são devidos a variação na quantidade de quinas, já na rede hexagonal o salto na energia, que é mais nítido para N ímpar, é devido ao aumento da distância ponta-a-ponta.

Para esta rede estudamos strings de tamanho $N = 3, \dots, 18$. O calor específico deste sistema apresenta até 3 picos de maneira análoga ao dos strings RG, só que os picos em baixa temperatura já são nítidos para N pequeno. Para $N = 7$ já é possível ver 2 picos e para $N = 9$ já é possível ver 3 picos. A *Fig. 3.31* mostra o calor específico para strings hexagonais de tamanhos 9, 12 e 17.

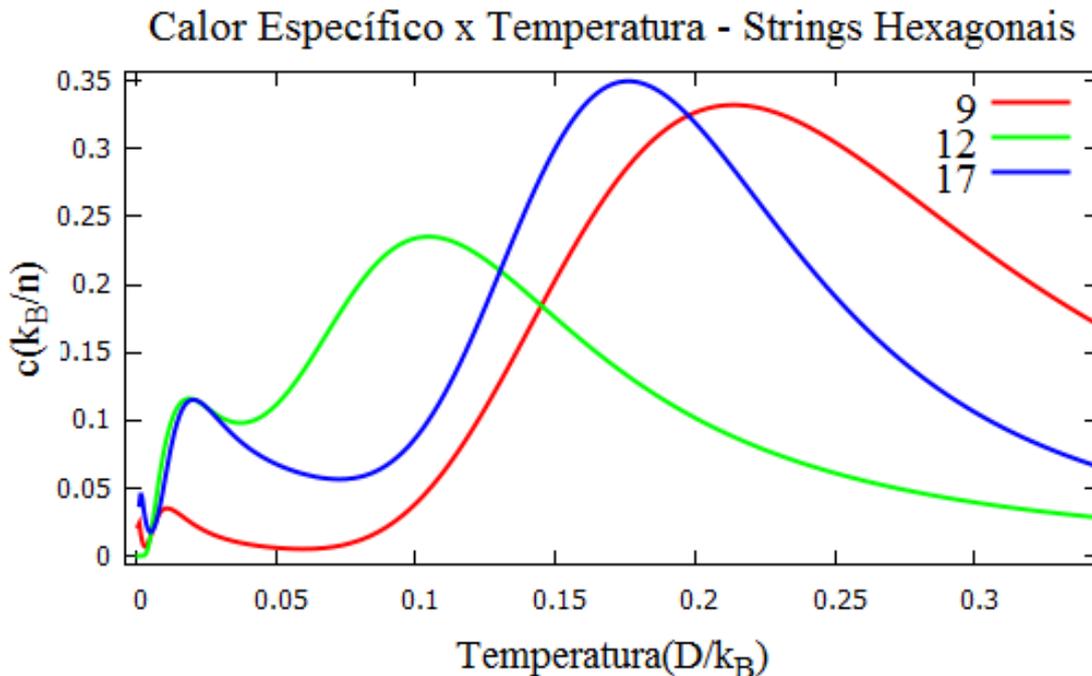


Fig. 3.31: Calor específico dos strings na rede hexagonal.

Neste sistema, a transição em alta temperatura é bem refletida em $d \langle R_E \rangle / dT$ enquanto que as duas outras transições de baixa temperatura quase não aparecem. Apenas para $N = 7$ aparece, muito sutilmente, mais um pico em baixa temperatura. Em geral $d \langle R_E \rangle / dT$ tem um único pico. Já $d \langle R_G \rangle / dT$ exibe bem as transições em baixa temperatura, complementando a análise de $d \langle R_E \rangle / dT$. A *Fig. 3.32* mostra o comportamento destas quantidade para $N = 9, 12$ e 17 .

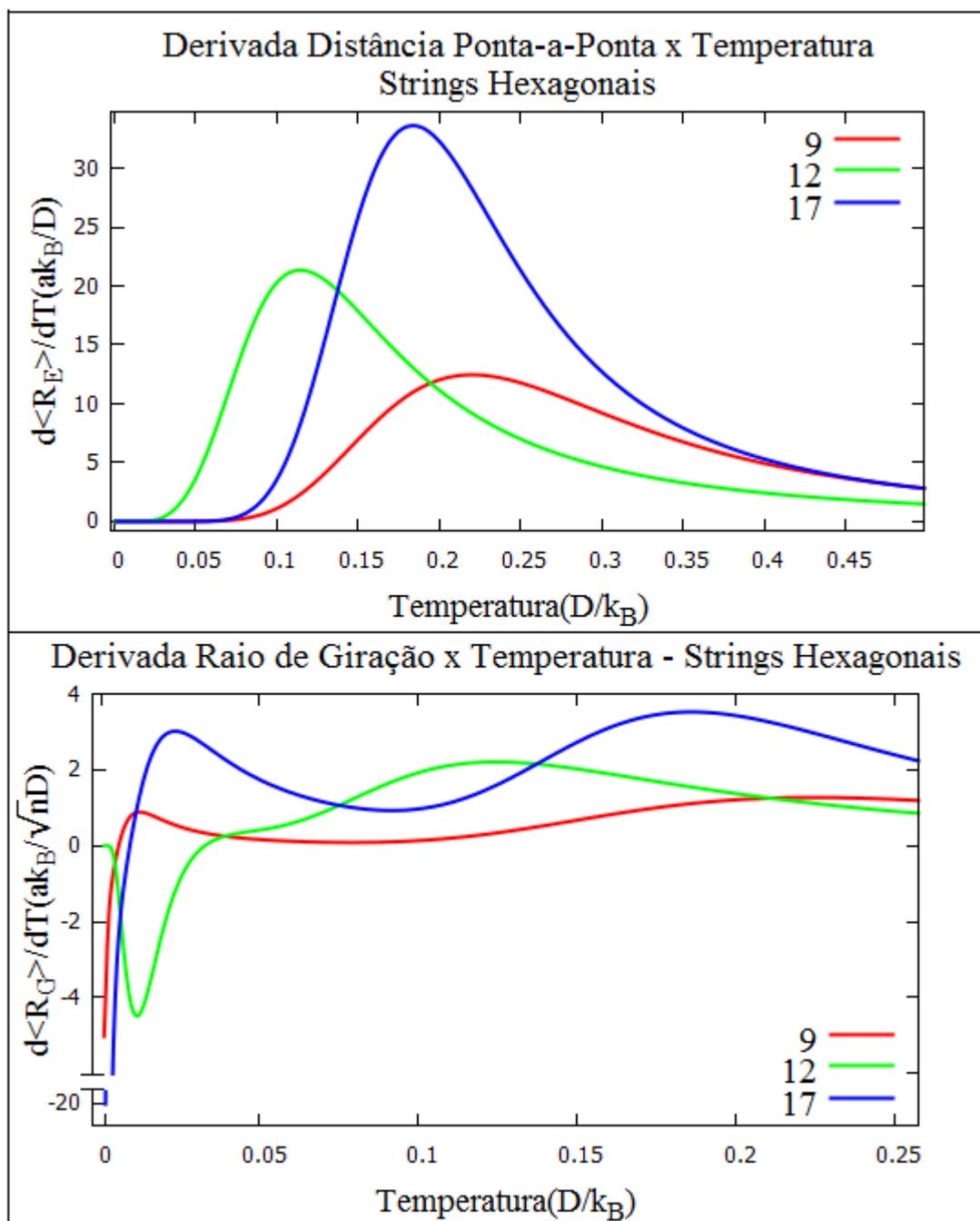


Fig. 3.32: $\langle R_E \rangle$ tem uma variação acentuada na transição de alta temperatura mas nenhuma variação apreciável para as transições de baixa temperatura. Já em $d\langle R_G \rangle / dT$ é bem visível as transições de baixa temperatura.

A Fig. 3.33 mostra o calor específico para $N = 17$ quando restringimos a distância ponta-a-ponta dos strings em $1a$ (mínima) e compara com o calor específico sem fazer restrição sobre a distância ponta-a-ponta. Claramente as duas transições de baixa temperatura ocorrem nas conformações de menor energia onde a distância ponta-a-ponta é $1a$.

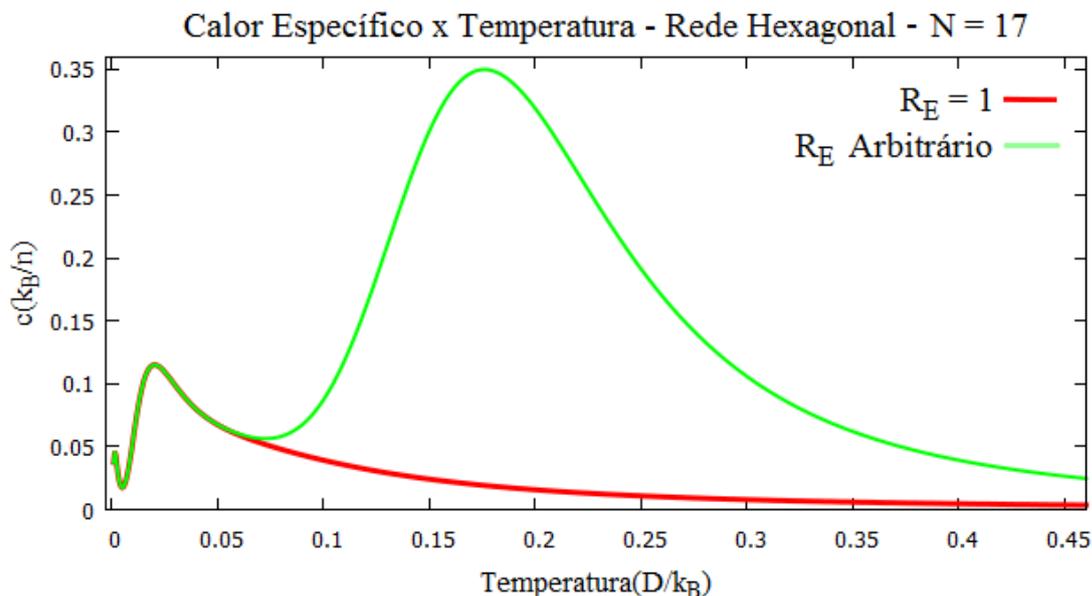


Fig. 3.33: Calor específico com distância ponta-a-ponta mínima e sem restrição sobre a distância ponta-a-ponta.

As conformações de menor energia são sempre caracterizadas pela minimização da distância ponta-a-ponta, até onde foi estudado. A *Fig. 3.34* mostra as conformações dos microestados fundamentais para $N = 9, 12$ e 17 . Para os microestados fundamentais observamos que, exceto para $N = 11$, ocorre uma maximização de hexágonos que identificamos por $|\vec{r}_i - \vec{r}_{i+4}| = 1.5$. Para as conformações dos microestados fundamentais listadas na *Fig. 3.34*, $N = 9$ possui 1 hexágono, $N = 12$ possui 2 e $N = 17$ possui 3. Para um dado N , a conformação de maior energia é aquela com maior distância ponta-a-ponta, em formato de escada, a forma mais simples de string.

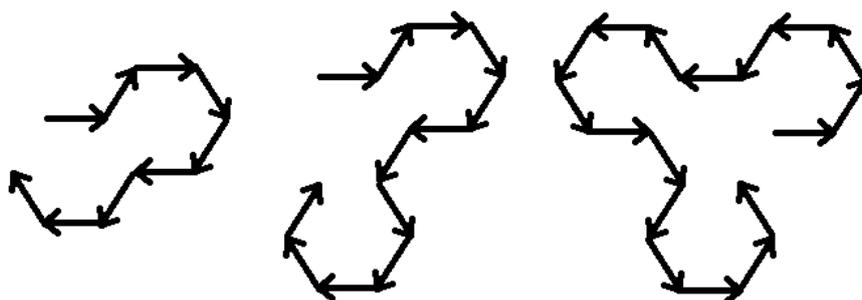


Fig. 3.34: Conformações de menor energia da rede hexagonal $N = 9, 12$ e 17 . Para outros tamanhos o comportamento é similar.

Com isso, concluímos que a transição em alta temperatura é bem caracterizada pelo aumento da distância ponta-a-ponta dos strings enquanto que as transições em baixa temperatura são caracterizadas por variações mais ou menos acentuadas do raio de giração acompanhado da minimização da distância ponta-a-ponta.

De maneira análoga ao feito para a rede quadrada, o pico de mais baixa temperatura

em $d \langle R_G \rangle / dT$, de $N = 17$, pode ser eliminado se alterarmos os R_G 's de alguns microestados, de baixa energia. Para isto, mudamos o R_G do segundo, terceiro e quarto microestados de mais baixa energia para o mesmo R_G do microestado fundamental. Veja a Fig. 3.35. Com isso o pico em baixa temperatura de $d \langle R_G \rangle / dT$ desaparece, como mostra a Fig. 3.36. Imaginamos que os 4 primeiros microestados de mais baixa energia, incluindo o microestado fundamental, são fundamentais para caracterizar a primeira transição de fase do sistema.

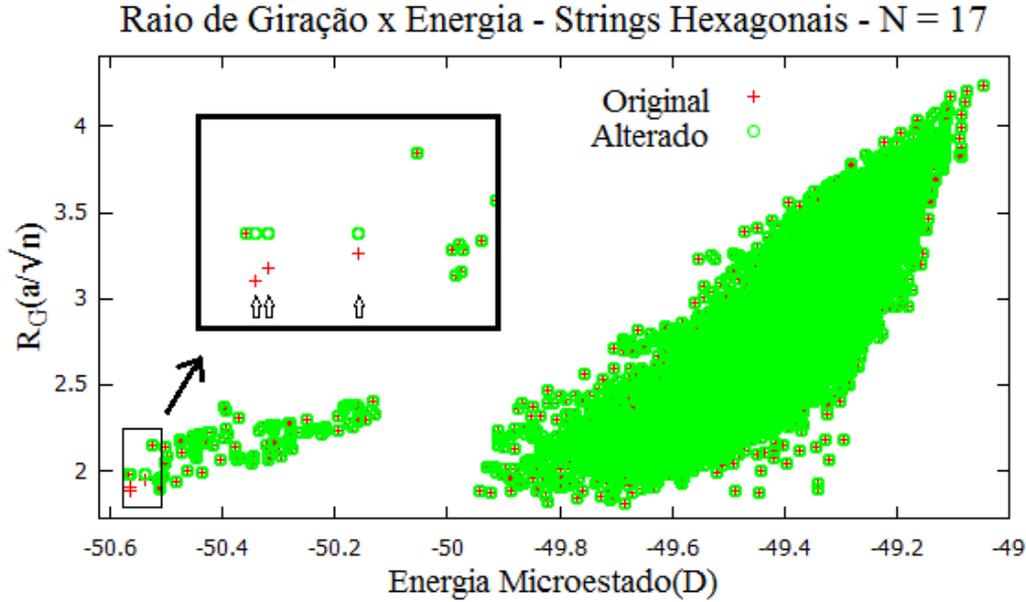


Fig. 3.35: R_G como função da energia dos strings na rede hexagonal. Fazendo o $R_G(E)$ do segundo, terceiro e quarto microestados de menor energia ficarem iguais ao $R_G(E)$ do microestado fundamental o pico em mais baixa temperatura de $d \langle R_G \rangle / dT$ desaparece, como mostrado na Fig. 3.36

Geramos a visualização do sistema a fim de encontrar mais especificações sobre as fases do sistema. A visualização é feita gerando as conformações no sentido crescente da energia. Conseguimos ver certos padrões associados as conformações com distância ponta-a-ponta mínima, para $N = 17$, mas estes padrões não são tão fáceis de serem identificados quantitativamente, como é o caso R_E . Por exemplo, conseguimos identificar que a maioria dos tamanhos de strings possuem muitos hexágonos nos seus microestados de menor energia. A variação acentuada na quantidade dos hexágonos se dá em transições de fases diferentes, para diferentes N . O que conseguimos especificar é que a queda acentuada nesta quantidade se dá nas transições de baixa temperaturas para $12 \leq N \leq 18$. Poderíamos utilizar a distribuição de probabilidade $P(E) = c\Omega(E) \exp(-E/(k_B T))$ para selecionar conformações representativas das fases (que é caracterizada por uma temperatura) mas o resultado depende da precisão na energia adotada e isto se torna uma tarefa difícil. Apesar de não termos mais especificações sobre as fases envolvidas no sistema a distância ponta-a-ponta e o raio de giração, grandezas aqui consideradas, são observáveis fundamentais nesta ciência baseada em CAE's.

Não achamos interessante explorar o sistema de 1^{os} vizinhos da rede hexagonal pois o calor específico desta rede apresenta 1 único pico, basicamente, e a sua consideração pode demandar uma atenção que pode desviar o foco do presente estudo. Contudo, o sistema

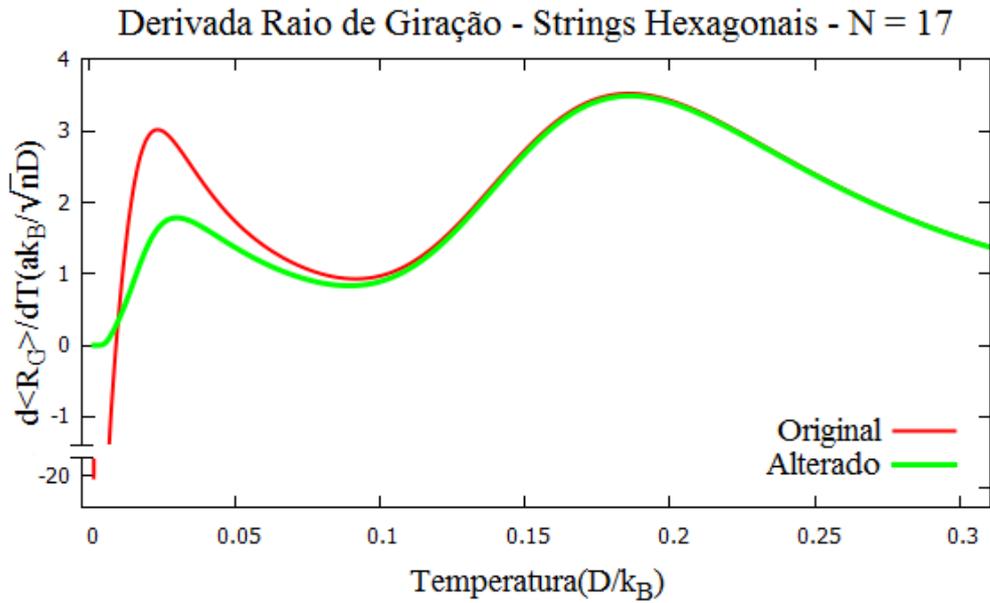


Fig. 3.36: $d \langle R_G \rangle / dT$ para $R_G(E)$ sem alterações (Original) e $R_G(E)$ alterado, como esquematizado na *Fig. 3.35*.

de 1^{os} vizinhos é interessante porque é simples e pode já fornecer resultados acerca do sistema sem raio de corte. Além disso, o $\Omega(E)$ de 1^{os} vizinhos é suave e permite, com mais facilidade, fazer a análise microcanônica.

Uma observação importante é que na rede hexagonal a fase de baixa temperatura é caracterizada por mudanças na estrutura que não implicam em variações na distância ponta-a-ponta. Isto implicaria numa dinâmica interna do string não relacionada ao movimento dos monopolos magnéticos (que estariam nas extremidades do string). Este comportamento se assemelha mais ao comportamento esperado para os monopolos de Dirac [23], o que provavelmente implicaria numa tensão de string nula ou muito pequena.

Capítulo 4

Conclusões

Estudamos através de enumerações computacionais exatas as propriedades termodinâmicas de estruturas magnéticas tipo string. Tais estruturas são formadas ao atribuímos momentos magnéticos aos deslocamentos de uma caminhada auto-excludente (CAE), formando uma cadeia de spins. A motivação para tal estudo reside na semelhança que estas estruturas tem com as excitações que aparecem nos gelos de spin artificiais (GSA). Por este motivo, exploramos o comportamento destas excitações em redes bidimensionais de várias geometrias. Estudamos as propriedades físicas deste sistema e o comportamento dele através do ensemble canônico, identificando suas possíveis transições de fase. A análise feita, através do ensemble canônico de strings em formato de CAE's, é semelhante as análises feitas sobre proteínas e polímeros. Por isto, este trabalho se assemelha bem a esta ciência.

Começamos a análise das possíveis transições de fase por strings que satisfazem uma regra de alternância na direção da caminhada (strings RG) e vimos que eles identificam as possíveis transições de fase de mais baixa temperatura dos strings que não estão sujeitos a esta restrição (strings CAE). No que segue, nos referiremos às possíveis transições de fase, que correspondem de fato a picos no calor específico, como sendo transições de fase, mas ressaltamos que estas só podem ser definidas no limite termodinâmico, o que não consideramos aqui. Para os strings RG as transições de fase foram especificadas pelo comportamento da distância ponta-a-ponta e do raio de giração. Não conseguimos eleger uma quantidade característica para uma transição de fase mas observamos o comportamento das diferentes quantidades para cada transição. Os strings CAE se diferenciam dos strings RG apenas por uma transição de fase a mais, em temperatura maior, que é caracterizada pela violação da regra de alternância na direção da caminhada. Esta nova transição tem comportamento diferente das demais e conseguimos supor a origem desta diferença. Para o sistema de 1^{os} vizinhos vimos que ele não gera boa aproximação do sistema sem raio de corte mas ele, de modo geral, é interessante pois é de mais fácil análise e já fornece informações sobre o sistema sem raio de corte. Para a rede hexagonal, encontramos uma física diferente. A minimização da distância ponta-a-ponta desempenha um papel análogo ao da regra da alternância de direção na rede quadrada, selecionando conformações de menor energia e identificando transições de fase de baixa temperatura. Conseguimos ver que a transição em alta temperatura é bem identificada pela distância ponta-a-ponta enquanto que o raio de giração gera uma análise complementar para as outras fases. Não exploramos strings de tamanhos muito grandes porque os tamanhos já considerados foram suficientes para explorar a física do sistema, mas reafirmamos a utilidade das técnicas de otimização

computacional aqui consideradas pelo papel corriqueiro que elas representam na física computacional.

Como o sistema em questão é particularmente finito, tentamos fazer uma análise microcanônica dele, pois neste caso a análise microcanônica é a mais sugerida. Partimos do $\Omega(E)$, que por infelicidade, era muito ruidoso. Tentamos suavizar $\Omega(E)$ através de técnicas estatísticas baseadas em gaussianas mas estas tentativas foram decepcionantes porque o parâmetro de suavização era arbitrário e mudava completamente as propriedades físicas do sistema.

O modelo em questão é bem simplificado se considerarmos que queremos descrever de maneira fiel um GSA. Quando excitamos os GSA's aparecem excitações de várias formas, não só aquelas em forma de CAE's. Contudo, excitações em forma de CAE's são de baixa energia, e apresentam nos seus extremos quase-partículas tipo monopolos magnéticos, que é uma das características mais interessante deste sistema.

Tentamos manter o nível técnico necessário na exposição do conteúdo, mas, ao mesmo tempo, manter a didática na explicação, o que foi motivo de inclusão de várias figuras. Evitamos fazer o aprofundamento em conhecimentos de Termodinâmica e Mecânica Estatística de nível graduação, considerando que o leitor já está familiarizado com estes assuntos.

De fato, este estudo traz importantes contribuições na compreensão e no desenvolvimento de estudos relacionados às excitações tipo strings e monopolos magnéticos em gelos de spins artificiais. O aprofundamento das análises com um olhar mais pormenorizado nas configurações assim como uma análise microcanônica podem trazer novos resultados e uma compreensão mais profunda do sistema. Além disso, uma análise mais profunda de outras redes também seria interessante, assim como efeito de campos externos. Outra opção bem mais complicada, mas não menos interessante, seria o estudo de CAE's ramificadas com circuitos fechados.

Apêndice A

Algoritmo Gerador de Caminhas Auto-Excludentes

Algoritmo Gerador de CAE's da rede quadrada

Declaração de variáveis, especialmente a constante N, único parâmetro de entrada

PARAMETER (N = 7)

PROGRAM SAWSquare

Abre arquivos para saída de dados

Declaração de valores iniciais

Chama rotina recursiva Passo

CALL Passo

END PROGRAM SAWSquare

Declara subrotina recursiva Passo

SUBROUTINE Passo

A rotina é constituída por um bloco IF. Se a CAE atingiu seu tamanho máximo ela imprime a CAE e encerra a rotina. Se não ela continua varrendo a rede através da rotina Direction

IF (Tamanho .EQ. N) THEN

Imprime CAE

ELSE

A rotina Direction abaixo chama Passo, o que torna Passo recursiva

CALL Direction(1, 0)

CALL Direction(0, 1)

CALL Direction(-1, 0)

CALL Direction(0, -1)

END IF

END SUBROUTINE Passo

SUBROUTINE Direction

Seleciona o próximo sítio a direita, acima, a esquerda ou abaixo de acordo com o parâmetro de entrada da rotina e testa se esse sítio já foi visitado ou não. Se já a rotina termina. Se não o novo sítio é acrescentado a CAE e Direction chama Passo para continuar a caminhada.

IF (Visitado(VizX, VizY) .EQV. .FALSE.) THEN

```
Visitado(VizX, VizY) = .TRUE.  
Acrecenta (VizX, VizY) a CAE  
CALL Passo  
  Volta um passo para seguir por outro caminho  
END IF  
END SUBROUTINE Direction
```

Referências Bibliográficas

- [1] Rafael Sá de Freitas. *Gelos de Spins - Da Frustração aos Monopólos Magnéticos*. Vídeo da Videoteca da USP.
- [2] C. Castelnovo, R. Moessner, S. L. Sondhi. *Magnetic monopoles in spin ice*. Nature **451**, 42 (2008).
- [3] Cristiano Nisoli, Roderich Moessner and Peter Schiffer. *Colloquium: Artificial spin ice: Designing and imaging magnetic frustration*. arXiv:1306.0825.
- [4] João Henrique Rodrigues. *Processo de Desmagnetização e Histerese de um Gelo de Spin Artificial em uma Geometria Triangular*. Dissertação de Mestrado, UFV, 2013.
- [5] Rodrigo da Costa Silva. *Investigações de Excitações Magnéticas em Gelos de Spin Bidimensionais*. Dissertação de Mestrado, UFV, 2012.
- [6] Peter Schiffer. *Artificial spin ice: Frustration by design*. Pennsylvania State University.
- [7] M. J. P. Gingras. *Observing Monopoles in a Magnetic Analog of Ice*. SCIENCE **326**, 375-376 (2009).
- [8] R. F. Wang, C. Nisoli, R. S. Freitas, J. Li, W. MacConville, B. J. Cooley, M. S. Lund, N. Samarth, C. Leighton, V. H. Crespi and P. Schiffer. *Artificial spin ice in a geometrically frustrated lattice of nanoscale ferromagnetic islands*. Nature **439**, 303 (2006).
- [9] Sheng Zhang, Ian Gilbert, Cristiano Nisoli, Gia-Wei Chern, Michael J. Erickson, Liam O'Brien, Chris Leighton, Paul E. Lammert, Vincent H. Crespi and Peter Schiffer. *Crystallites of magnetic charges in artificial spin ice*. Nature **500**, 553-557 (2013).
- [10] F. S. Nascimento, L. A. S. Mól, W. A. Moura-Melo e A. R. Pereira. *From confinement to deconfinement of magnetic monopoles in artificial rectangular spin ices*. New Journal of Physics 14 (2012) 115019 (13pp).
- [11] R. C. Silva, R. J. C. Lopes, L. A. S. Mól, W. A. Moura-Melo, G. M. Wysin, e A. R. Pereira. *Nambu monopoles interacting with lattice defects in a two-dimensional artificial square spin ice*. PHYSICAL REVIEW B 87, 014414 (2013).
- [12] R. C. Silva, F. S. Nascimento, L. A. S. Mól, W. A. Moura-Melo e A. R. Pereira. *Thermodynamics of elementary excitations in artificial magnetic square ice*. New Journal of Physics 14 (2012) 015008 (14pp).

- [13] L. A. S. Mól, W. A. Moura-Melo, e A. R. Pereira. *Conditions for free magnetic monopoles in nanoscale square arrays of dipolar spin ice*. PHYSICAL REVIEW B 82, 054434 (2010).
- [14] Y. Nambu. *Strings, monopoles, and gauge fields*. Physical Review D 10, 4262 (1974).
- [15] L. A. Mól, R. L. Silva, R. C. Silva, A. R. Pereira, W. A. Moura-Melo e B. V. Costa. *Magnetic monopole and string excitations in two-dimensional spin ice*. JOURNAL OF APPLIED PHYSICS 106, 063913 (2009).
- [16] Gordon Slade. *Self-Avoiding Walks*. The Mathematical Intelligencer Vol. 16, No. 1 (1994).
- [17] Raoul D. Schram, Gerard T. Barkema, Rob H. Bisseling. *SAWdoubler: A program for counting self-avoiding walks*. Computer Physics Communications 184 (2013) 891–898.
- [18] Premkumar. S. *Batch File Programming*. First Edition May 2009.
- [19] Salinas, Silvio R. A.. *Introdução a física estatística*. São Paulo: EDUSP, 1997.
- [20] Markus Deserno. *Microcanonical and canonical two-dimensional Ising model: An example*. UCLA, USA. 2004.
- [21] A. G. Cunha Netto, C. J. Silva, A. A. Caparica, and R. Dickman. *Wang-Landau Sampling in Three-Dimensional Polymers*. Brazilian Journal of Physics, vol. 36, no. 3A, September, 2006.
- [22] S. Ladak, D. E. Read, G. K. Perkins, L. F. Cohen e W. R. Branford. *Direct observation of magnetic monopole defects in an artificial spin-ice system*. NATURE PHYSICS LETTERS, VOL 6, p. 359-363, MAY 2010.
- [23] P.A.M. Dirac. *Quantised Singularities in the Electromagnetic Field*. Proc. Roy. Soc. A 133, 60.
- [24] M. Knobel. *Nanomagnetismo: Conceitos Básico e Aplicações*. Vídeo da Videoteca da USP.
- [25] Grupo TCFMC. *Sistemas Frustrados: Líquidos e Gelos de Spin*. Site da UFV disponível em <https://sites.google.com/site/grupotcfmc/home/linhas-de-pesquisa/sistemas-frustrados-liquidos-e-gelos-de-spin>.
- [26] Afranio R. Pereira, G.M. Wysin, Rodrigo C. Silva, F.S. Nascimento, Lucas A. S. Mól, Winder A. Moura-Melo. *(Nambu) Monopoles and their "Dirac strings." in thermal artificial magnetic square ices*. (Slide). Apresentação feita na Conferência: Frustrated Magnets: FROM SPIN ICE TO KAGOME PLANES.
- [27] Freddy Bouchet, Shamik Guptac, David Mukamel. *Thermodynamics and dynamics of systems with long-range interactions*. Physica A 389 (2010) 4389-4405.
- [28] Rob Bisseling. *Self-avoiding walks*. (Slide). Mathematics colloquium, Utrecht April 19, 2012. Disponível em <http://www.staff.science.uu.nl/~bisse101/Slides/utrecht12.pdf>

- [29] Iwan Jensen. *Series for Self Avoiding Walks*. Site disponível em http://www.ms.unimelb.edu.au/~iwan/saw/SAW_ser.html.
- [30] M. Bachmann. *Thermodynamics and Statistical Mechanics of Macromolecular Systems*. Cambridge University Press, New York, 2014.
- [31] M. Bachmann e W. Janke. *Thermodynamics of Protein Folding from Coarse-Grained Models' Perspectives*, Lect. Notes Phys. **736**, 203–246 (2008).
- [32] Alexandre de Aquino Soares. *Estudo computacional estático e dinâmico do modelo clássico de Heisenberg ferromagnético isotrópico*. Dissertação de Mestrado, UFMG, 2011.
- [33] Armando Prestes de Menezes Filho. *Cap. 3: Não-extensividade termodinâmica*. Tese de Doutorado. PUC-RIO. 2003.
- [34] Hans Christian Öttinger. *Thermodynamics of Small Systems*. 2001. Resumo do livro de Terrell L. Hill's (Dover, 1994) intitulado Thermodynamics of Small Systems. Polymer Physics Systems, Department of Materials, ETH Zürich.
- [35] Reginaldo J. Santos. *Introdução ao Latex*. Departamento de Matemática, ICEX, UFMG, 2011. Livro disponível em <http://www.mat.ufmg.br/~regi/topicos/intlat.pdf>.
- [36] Philipp K. Janert. *Gnuplot in Action Understanding data with graphs*. 2010.
- [37] The Portland Group. *PGI Fortran Reference*. Release 2013.
- [38] Till Tantau. *User's Guide to the Beamer Class, Version 3.01*. 2004.
- [39] Furio Ercolessi. *Molecular dynamics example programs in Fortran 90*. SISSA, Trieste, revised May 1997.
- [40] Mestre em Latex. <https://code.google.com/p/mestre-em-latex/>.
- [41] Tobias Oetiker, Hubert Partl, Irene Hyna e Elisabeth Schlegl. *The Not So Short Introduction to LATEX2 ϵ* . 2011.