

Trabajo Especial de Licenciatura en Física

Metaestabilidad en el modelo de Potts de q estados

Ezequiel Ferrero

Director: Sergio A. Cannas

Facultad de Matemática, Astronomía y Física
Universidad Nacional de Córdoba

a Vero

Agradecimientos

Este trabajo fue apoyado por la Agencia Córdoba Ciencia a través de su programa ConCiencias (becas de apoyo para trabajos finales y tesinas de grado).

Agradecimientos Personales

A Sergio por su confianza y por su constante atención y dedicación.

A Pancho y a todo el GTMC, por abrirme sus puertas, atender mis inquietudes y hacerme sentir como en casa desde el primer momento.

A mis compañeros, muy especialmente, sin ellos nada hubiera sido posible.

A mis amigos y familiares, por el aguante y el apoyo.

A Vero por su amor, que en definitiva es el motor de todo esto.

Resumen

En este trabajo estudiamos la posible existencia de estados desordenados metaestables (sobre-enfriados) en el modelo de Potts de q estados bidimensional con $q = 9$ en ausencia de campo magnético externo. Mediante simulaciones de Monte Carlo analizamos ciclos de histéresis de la energía y parámetro de orden con la temperatura y comportamientos de relajación de la energía luego de un enfriamiento controlado desde altas temperaturas a temperaturas inferiores a la crítica. Estas últimas se realizan a tasas de enfriamiento finitas e infinitas (quench), observándose que el tiempo de relajación al estado metaestable resulta independiente de las mismas.

Los resultados obtenidos se aparecen consistentes con la existencia de estados metaestables en el límite termodinámico, de acuerdo con uno de los dos posibles escenarios predichos por K. Binder (*J. Stat. Phys.*, vol. 24, No. 1, p. 69 – 86, 1981). Analizamos también el comportamiento del tiempo de vida media del estado metaestable, para diferentes temperaturas y diferentes tamaños del sistema. Si bien los resultados obtenidos resultan consistentes con la Teoría de Nucleación Clásica (TCN) para tamaños relativamente pequeños, observamos ciertas anomalías en la relajación para tamaños grandes que muestran un desvío del predicho por la TCN indicando, o bien que la TCN no describe adecuadamente el proceso de nucleación en este caso, o bien que este sistema presenta un proceso de relajación más complejo que la nucleación.

Abstract

In this work we analyze the possible existence of disordered metastable states (supercooled) in the two-dimensional q -states Potts model with $q = 9$ without external magnetic field. Using Monte Carlo numerical simulations we analyze temperature histeresys cycles of the energy and the order parameter, as well as out of equilibrium relaxation of the energy after a controled cooling from high temperature to temperatures below the critical one. The coolings are performed both with finite and infinite cooling rates (quench), showing that the relaxation time to the metastable state does not depended on the cooling rate.

Our results appear to be consistent with the existence of metastable states in the thermodynamic limit, in agreement with one of the two possible scenarios predicted by K. Binder (*J. Stat. Phys.*, vol. 24, No. 1, p. 69 – 86, 1981). We also analyzed the the life time in the metastable state for different temperatures and different system sizes. Although the results appear to be consistent with the Classical Nucleation Theory (CNT) for relatively small system sizes, we found some anomalies in the relaxation of larger systems that disagree with the expected one.

Índice general

Dedicatoria	I
Agradecimientos	II
Agradecimientos	II
Resumen en Castellano	III
Resumen en Inglés	IV
Índice	VI
Lista de figuras	X
Introducción	1
I Marco teórico	3
1. El Modelo de Potts	4
1.1. Introducción	4
1.2. El modelo	4
Propuesta original	4
Nuestra notación	6
1.3. Propiedades	7
1.4. Aplicaciones	8
2. Transiciones de fase de 1^{er} orden y metaestabilidad	9
2.1. Generalidades	9
2.2. Estados metaestables cerca de una transición de fase de primer orden	10
2.3. Teoría de Nucleación Clásica	14
2.4. Crecimiento de dominios y coarsening	16
3. Simulaciones numéricas	18
3.1. Métodos de Monte Carlo	19
3.2. Dinámica de Metrópolis	22

4. Descripción del sistema	23
5. Resultados previos	26
 II Resultados	 30
6. Estadística de equilibrio	31
6.1. Magnitudes termodinámicas	31
6.2. Ciclos de histéresis	35
7. Relajación	40
7.1. Sobre-enfriamiento y metaestabilidad	40
Modelo de dos estados	49
7.2. Quench desde $T = \infty$	55
7.3. Realizaciones individuales y configuraciones típicas	67
7.4. Tiempos de relajación	76
8. Conclusiones y posibles direcciones	84
Bibliografía	88

Índice de figuras

2.1.	Gráfico esquemático de la densidad de energía de grano grueso $f_{cg}(\phi)$ como función del parámetro de orden ϕ en una transición de fase de primer orden de ϕ_1^{coex} a ϕ_2^{coex} . Los valores espinodales $\phi_s^{(1,2)}(L)$ definidos de los puntos de inflexión de $f_{cg}(\phi)$ dependen del tamaño de grano L . . .	12
2.2.	Función de relajación de no-equilibrio $\mathcal{L}^{\Delta H}(t)$ graficada versus tiempo para diferentes elecciones de $H_s \equiv H/k_B T$, de ([1]).	14
5.1.	Esquema de la variación de la energía con la temperatura para el caso de singularidades espinodales (A) y para el caso de una verdadera divergencia del calor específico en una transición de fase de 1 ^{er} orden (B). 27	
6.1.	Energía por espín para una red $N = 150 \times 150$, para $T \ll 1$ tiende a la energía del estado fundamental $E(T = 0) = -2$, para $T \gg 1$ crece tendiendo hacia la energía de un estado completamente desordenado (en el infinito $E_\infty = -0,222$), presenta un claro salto en las proximidades de la temperatura crítica $T_c = 0,7213$. Comparamos el salto de E_N , correspondiente al <i>calor latente</i> de la transición T_c , con el valor exacto de [2].	32
6.2.	Parámetro de orden para una red $N = 150 \times 150$, es casi 0 por encima de T_c y su valor se acerca a 1 al ordenarse el sistema a bajas temperaturas; muestra claramente la transición de fase orden-desorden a una temperatura muy bien definida	32
6.3.	Calor específico por espín para una red $N = 150 \times 150$, presenta un marcado pico alrededor de T_c y es casi cero en el resto del rango	33
6.4.	Suceptibilidad por espín para una red $N = 150 \times 150$, presenta un marcado pico alrededor de T_c y es casi cero en el resto del rango	33
6.5.	Calor específico y susceptibilidad magnética por espín para una red $N = 85 \times 85$. Presentan un pico marcado a $T'_c = 0,725$	34
6.6.	Ciclo de histéresis alrededor de T_c para una red $N = 60 \times 60$ y una tasa de enfriamiento y calentamiento $r = 10^{-6}$	35

6.7.	Ciclos de histéresis para una red $N = 150 \times 150$ y distintas tasas. Notar cómo nos acercamos a la curva de equilibrio (curva obtenida con el método de la sección anterior) a medida que “enlenteceemos” el proceso.	36
6.8.	Ciclos de histéresis para distintos tamaños de red y una tasa $r = 10^{-5}$. Para los dos tamaños más grandes las curvas son casi idénticas.	37
6.9.	Curvas de enfriamiento y ciclos de histéresis para distintas tasas y un tamaño de red $N = 40 \times 40$, correspondientes al Modelo de Potts con $q = 7$	39
7.1.	Realizaciones independientes y promedio sobre ~ 150 muestras (curva amarilla), de la energía de un sistema $N = 60 \times 60$ después de ser sobre-enfriado con una tasa de enfriamiento $r = 10^{-3}$ hasta una temperatura $T_o = 0,719$	41
7.2.	Comportamiento de E_N con el tiempo, para un sistema de tamaño $N = 100 \times 100$ después de ser sobre-enfriado hasta una temperatura $T_o = 0,719$ con distintas tasas de enfriamiento; las curvas son el resultado de promediar sobre ~ 150 realizaciones independientes.	42
7.3.	Muestra de lo que ocurre con E_N en función de la temperatura en el proceso de relajación de la figura anterior. A partir de un estado de equilibrio enfriamos con tasa r hasta T_o y después de esperar cierto tiempo el sistema cae a su estado de equilibrio para esa temperatura.	43
7.4.	Idem (Fig. 7.2) pero para una red $N = 80 \times 80$ y $T_o = 0,717$	44
7.5.	Dependencia con la temperatura T_o a la cual dejamos al sistema relajarse libremente, para una red 60×60 después de un cooling con $r = 10^{-5}$. Notamos que a medida que nos acercamos a T_c la permanencia en el estado metaestable aumenta.	45
7.6.	Relajación del sistema (sobre-enfriado a una tasa $r = 10^{-4}$ hasta $T_o = 0,719$) al estado de equilibrio; representada por el comportamiento de E_N en función del tiempo, para distintos tamaños de red.	47
7.7.	Comportamiento de E_N con el tiempo, para un sistema de tamaño $N = 100 \times 100$ después de ser sobre-enfriado hasta una temperatura $T_o = 0,719$: con tasas lentas a partir de un estado de equilibrio a temperaturas bajas y bruscamente a partir de un estado completamente desordenado a temperaturas infinitas	48
7.8.	Esquema de variación de la variable aleatoria $O(t, \tau)$	49
7.9.	Histograma de tiempos de relajación para un sistema 60×60 sobre-enfriado a una tasa $r = 10^{-4}$ hasta $T_o = 0,719$; sobre 19485 realizaciones individuales distribuidas en 45 intervalos.	50

7.10. Ajuste de acuerdo a (7.7) de $\phi_E(t)$ para un tamaño de red $N = 100 \times 100$ después de un cooling con tasa $r = 10^{-4}$ hasta $T_o = 0,719$. En este caso el ajuste es sobre los datos a partir de $t = 6000$, y estimamos un error definiendo distintos valores para el plateau, como los dos mostrados en la figura (línea sólida y línea punteada).	52
7.11. Valor medio del tiempo de nucleación en función de L en escala log-lineal. En el gráfico interior, en escala log-log.	54
7.12. Relajación de la energía por espín para redes de lado $L = 60$ (A) y $L = 100$ (B), graficada versus tiempo para distintos valores de T_o después de un quench desde temperatura infinita	56
7.13. Relajación de la energía por espín para redes de lado $L = 150$ (A) y $L = 300$ (B), plotada versus tiempo para distintos valores de T_o después de un quench desde temperatura infinita	57
7.14. Función de relajación no lineal de la energía vs. tiempo para una red de tamaño $N = 100 \times 100$ en escala lineal-logarítmica (A) y doble logarítmica (B); para distintas temperaturas T_o	58
7.15. Función de relajación no lineal de la energía vs. tiempo para una red de tamaño $N = 150 \times 150$ en escala lineal-logarítmica (A) y doble logarítmica (B); para distintas temperaturas T_o	59
7.16. Función de relajación no lineal de la energía vs. tiempo para una red de tamaño $N = 300 \times 300$ en escala lineal-logarítmica (A) y doble logarítmica (B); para distintas temperaturas T_o . La línea recta ilustra un comportamiento tipo ley de potencia $\phi_E \propto t^{1/2}$	60
7.17. Dependencia con el número de muestras de la relajación de la energía por espín de una red 300×300 después de un quench desde $T = \infty$ a $T_o = 0,719$	63
7.18. Energía por espín vs. tiempo para temperatura $T_o = 0,719$ (A) y $T_o = 0,72$ (B) y distintos tamaños de red	65
7.19. Energía por espín vs. tiempo para temperatura $T_o = 0,5$ (A) y $T_o = 0,7$ (B) y distintos tamaños de red	66
7.20. Relajación de la energía por espín con el tiempo, para una realización individual de una red 150×150 después de un quench desde temperatura infinita hasta $T_o = 0,72 < T_c$. En los recuadros se muestra las configuraciones de red que dan lugar a los puntos señalados por las flechas.	68
7.21. Idem fig. 7.20 para una red 150×150 y $T_o = 0,4$	69

7.22. Idem fig. 7.20 para una red 100×100 y $T_o = 0,1$. Notar que el sistema no alcanza su estado de equilibrio (para esta temperatura $E_N = -2$), y el estacionamiento del valor de energía y de la configuración de red es notable.	71
7.23. Idem fig. 7.20 para una red 150×150 y $T_o = 0,7$	72
7.24. Idem 7.20 para una red 150×150 y $T_o = 0,715$. De a pares se presentan configuraciones que a distintos tiempos muestran un valor de energía similar.	73
7.25. Configuraciones a distintos tiempos para la relajación de un sistema 300×300 después de un quench hasta $T_o = 0,719$. . .	74
7.26. Idem 7.20 para una red 300×300 y $T_o = 0,719$	75
7.27. Histogramas de tiempo de relajación τ para tamaños de red 15×15 (A) y 30×30 (B) y distintas temperaturas	77
7.28. Histogramas de tiempo de relajación τ para tamaños de red 60×60 (A) y 100×100 (B) y distintas temperaturas	78
7.29. Histogramas de tiempo de relajación τ para distintos tamaños de red a temperaturas $T = 0,6$ (A) y $T = 0,7$ (B).	79
7.30. Histogramas de tiempo de relajación τ para distintos tamaños de red a temperaturas $T = 0,715$ (A) y $T = 0,719$ (B).	80
7.31. Escaleo de $\langle \tau \rangle$ vs. L , obtenido con ajustes gaussianos (círculos) y de un promedio directo (cuadrados).	82
7.32. Escaleo de $\langle \tau \rangle$ vs. L , comparación de los resultados de la sección 7.1 con los obtenidos a partir de los histogramas. En este caso los puntos señalados con cuadrados corresponden a los resultados de la sección 7.1, los triángulos a los puntos obtenidos con ajustes gaussianos y los círculos a los valores obtenidos de un promedio directo de los datos.	83

Introducción

El modelo de Potts de q estados bidimensional es uno de los prototipos para el estudio de la Mecánica Estadística de Fenómenos Críticos y Transiciones de Fase [3, 4]. Aparte de sus múltiples aplicaciones para el modelado de diversos sistemas en Materia Condensada [3, 4], el mismo reviste un gran interés teórico, ya que variando el número de estados q , presenta transiciones de fase magnéticas de primer ($q \geq 4$) y segundo orden ($q < 4$).

Por otra parte, un problema de gran interés actual en la física de la materia condensada es el de los fenómenos dinámicos asociados con la existencia de estados desordenados metaestables (líquidos sobre-enfriados) por debajo de la temperatura de fusión en transiciones de fase de primer orden. Este fenómeno se encuentra directamente relacionado con la fenomenología de la transición vítrea, proceso cuya física se encuentra aún en estudio en la actualidad [5]. En particular, los procesos mediante los cuales un estado metaestable de este tipo relaja al equilibrio (fase ordenada de bajas temperaturas) resultan de fundamental importancia para la comprensión de este fenómeno. Estos procesos se pueden describir en muchos casos mediante la teoría fenomenológica conocida como Nucleación Clásica (TNC). No obstante, no existe hasta el presente una caracterización general de los mecanismos microscópicos asociados y los límites de aplicabilidad de dicha teoría no están claros. En particular, resultados de Monte Carlo (MC) en el modelo de Ising con campo externo muestran considerables desvíos de los resultados predichos por la TNC [6]. En este contexto, el modelo de Potts bidimensional con $q > 4$ se presenta como un candidato ideal para el análisis de este problema, ya que el mismo presenta una transición de fase de primer orden en ausencia de campo externo a una temperatura finita T_c , con un estado paramagnético sobre-enfriado para $T < T_c$ [7]. Mas aún, se ha conjeturado recientemente que este modelo presenta una fase vítrea a bajas temperaturas, con una fenomenología asociada análoga a la que se observa en líquidos moleculares viscosos sobre-enfriados formadores de vidrios [8].

No obstante, la propia existencia de estados metaestables por debajo de T_c para $q > 4$ es aún un problema abierto. En 1981, K. Binder [9] estudió este problema para $q = 6$ mediante simulaciones de MC en redes de tamaños $L \leq 200$. Binder planteó la posibilidad de que la temperatura spinodal T_{sp} para la fase ordenada fuera $T_{sp} = T_c$ en el límite termodinámico, lo cuál implicaría una transición de 1^{er} orden sin metaestabilidad. Sin embargo, para los tamaños utilizados los efectos de tamaño finito no le permitieron arribar a ninguna conclusión. Desde entonces, esta pregunta es objeto de debate [10, 11, 12, 7].

A fin de intentar aportar a esta discusión nuevos elementos de juicio, en el presente trabajo estudiamos la existencia de estados metaestables y los mecanismos de relajación de un sistema colocado fuera del equilibrio para el modelo de Potts de 9 estados utilizando simulaciones numéricas de MC.

Separamos el contenido del trabajo en dos Partes, para mayor claridad. Comenzamos presentando el modelo de Potts, sus propiedades y aplicaciones en el Capítulo 1. En el Capítulo 2 resumimos las propiedades hasta ahora conocidas sobre transiciones de fase de 1^{er} orden y estados metaestables cerca de la transición, y caracterizamos los procesos conocidos como *nucleación clásica* y *coarsening*¹. Aspectos generales de métodos numéricos son presentados en el tercer capítulo. El Capítulo 4 está destinado a describir el sistema físico sobre el cual trabajamos. Algunos resultados previos a nuestro trabajo de distintos autores son referenciados en el Capítulo 5. Ya en la Segunda Parte presentamos nuestros resultados, comenzando por propiedades de la mecánica estadística de equilibrio del sistema (Capítulo 6). Un análisis detallado con resultados originales acerca de la existencia de metaestabilidad y los mecanismos de relajación es brindado en el Capítulo 7. Finalmente, presentamos un capítulo de conclusiones y posibles direcciones a seguir en el estudio de este modelo.

¹Es tan usual como triste, en física, “castellanizar” palabras inglesas a cambio de desarrollar un vocabulario científico acorde a nuestro idioma.

Parte I

Marco teórico

Capítulo 1

El Modelo de Potts

1.1. Introducción

El *modelo* de Potts [13] es una generalización del modelo de Ising [14] a más de dos componentes. Históricamente una versión del sistema de cuatro componentes fue estudiada por primera vez por Ashkin y Teller [15] en 1943. Pero el modelo general de q componentes lleva su actual nombre desde que fué propuesto por Domb a su entonces estudiante Potts como tema de tesis en 1951. El problema fué considerado también dos años después en un estudio independiente por Kihara et *al.* [16].

Es conocido que el Modelo de Potts está relacionado a varios problemas en estadística de redes; su comportamiento crítico también ha demostrado ser rico y más general que el del modelo de Ising. Gracias a los insistentes esfuerzos por explorar sus propiedades, el Modelo de Potts se ha convertido en una importante base de prueba para diferentes métodos y aproximaciones en el estudio de la teoría de fenómenos críticos.

1.2. El modelo

Propuesta original

El problema original propuesto por Domb partía de la base de considerar al modelo de Ising como un sistema de espines interactuantes que podían ser: paralelos o antiparalelos. Por lo tanto, una apropiada generalización podría ser considerar un sistema de espines confinados en un plano, con cada uno

de ellos apuntando a una de las q igualmente espaciadas direcciones dadas por los ángulos:

$$\Theta_n = \frac{2\pi n}{q}, \quad n = 0, 1, \dots, q-1 \quad (1.1)$$

En su forma más general la interacción entre vecinos cercanos depende solo del ángulo relativo entre los dos vectores. Esto es generalmente conocido como un sistema de simetría $Z(q)$ cuyo hamiltoniano se expresa:

$$H = - \sum_{\langle ij \rangle} (J(\Theta_{ij})) \quad (1.2)$$

donde la función $J(\Theta)$ es 2π periódica y $\Theta_{ij} = \Theta_{ni} - \Theta_{nj}$ es el ángulo entre dos espines en los sitios vecinos i y j .

El modelo sugerido por Domb es elegir:

$$J(\Theta) = -\epsilon_1 \cos(\Theta) \quad (1.3)$$

Usando un análisis de Kramer-Wannier(1941), Potts logró determinar el punto crítico de este modelo en la red cuadrada para $q = 2, 3, 4$. Al no poder extender este logro a $q > 4$, Potts reportó como nota final de su publicación el punto crítico para todo q del siguiente modelo:

$$J(\Theta_{ij}) = \epsilon_2 \delta(n_i, n_j) \quad (1.4)$$

donde $\delta = \begin{cases} 1 & \text{si } n_i = n_j \\ 0 & \text{cualquier otro caso} \end{cases}$ es la "función" delta de Kroneker usual.

Esta versión del modelo es la que ha atraído mayor atención y por eso se la conoce como *Modelo de Potts estándar* o simplemente *Modelo de Potts*; también ha recibido el nombre de *Modelo de Ashkin-Teller-Potts*. La versión (1.3) es llamada *Modelo de Potts planar* o *Modelo del Reloj*.

El modelo de Potts es ferromagnético si $\epsilon_2 > 0$ y antiferromagnético si $\epsilon_2 < 0$. En adición a interacciones entre dos sitios, puede haber en general interacciones entre varios sitios y también campos externos. Para el modelo de Potts en una red $\mathbf{G}$ (en principio arbitraria) de N sitios el Hamiltoniano general toma la forma:

$$-\beta H = L \sum_i (\delta(\sigma_i, 0)) + K \sum_{(i,j)} (\delta(\sigma_i, \sigma_j)) + K_3 \sum_{(i,j,k)} (\delta(\sigma_i, \sigma_j, \sigma_k)) + \dots \quad (1.5)$$

donde $\beta = \frac{1}{kT}$ y $\sigma_i = 0, 1, \dots, q-1$ especifica el estado del espín en el sitio i -ésimo; y $\delta(\sigma_i, \dots, \sigma_k) = \begin{cases} 1 & \text{si } \sigma_i = \dots = \sigma_k \\ 0 & \text{cualquier otro caso} \end{cases}$

$K = \beta\epsilon_2$ y K_n con $n \geq 3$ mide la intensidad de las interacciones de n -sitios y L es un campo externo aplicado al estado 0 de espín.

La función partición es

$$Z_{\mathbf{G}}(q; L, K, K_n) = \sum_{\sigma_1=0}^{q-1} \dots \sum_{\sigma_N=0}^{q-1} e^{-\beta H} \quad (1.6)$$

A partir de ella las propiedades físicas del sistema se derivan de la manera usual tomando el límite termodinámico.

$$f(q; L, K, K_n) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \log Z_G(q; L, K, K_n) \quad (1.7)$$

“energía libre” por sitio

$$E(q; L, K, K_n) = -\frac{\partial}{\partial \beta} f(q; L, K, K_n) \quad (1.8)$$

energía interna por sitio

$$M(q; L, K, K_n) = -\frac{\partial}{\partial L} f(q; L, K, K_n) \quad (1.9)$$

“magnetización” por sitio

Nuestra notación

En el presente trabajo analizamos el caso simple dónde $\mathbf{G}$ es una red cuadrada bidimensional de N sitios (que pueden numerarse $1, \dots, N$) con cada sitio i asociado a una cantidad s_i que puede tomar q valores diferentes, $s_i = 1, 2, \dots, q$. Como en el modelo de Ising llamaremos a s_i “espín”. Dos espines adyacentes s_i y s_j interactúan con una energía $-J \delta(s_i, s_j)$ (la constante J reemplazó a ϵ_2 en (1.4)). La energía total es entonces:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} \delta_{s_i s_j}, \quad s_i = 1, 2, \dots, q \quad (1.10)$$

donde la suma se extiende sobre todos los pares de primeros vecinos en la red. A diferencia de (1.5) hemos elegido que cada s_i tome los valores $1, \dots, q$, pero cualesquiera q distintos números hubieran sido igualmente buenos. En particular, para $q = 2$ podemos permitir a cada s_i tomar los valores $+1$ o -1 ; con lo que tenemos $\delta(s, s') = \frac{1}{2}(1 + ss')$; substituyendo esta expresión en (1.10) concluimos, como sabemos, que el modelo de Potts con $q = 2$ (con J

reemplazada por $2J$) es equivalente al modelo de Ising con campo nulo.

Por simplicidad trabajamos en unidades donde $J = k_B = 1$. Definimos la energía interna como:

$$E = \langle \mathcal{H} \rangle \quad (1.11)$$

y el parámetro de orden [17]:

$$M = \frac{q^{\frac{\max(N_\mu)}{N}} - 1}{q - 1} \quad (1.12)$$

donde N_μ es el número de sitios i con $s_i = \mu$, $\mu = 1, \dots, q$. M toma el valor 1 cuando el sistema se ordena completamente ($\max(N_\mu) = N$), es decir, cuando alcanza uno de sus q estados fundamentales; por el contrario para un sistema completamente desordenado (todos los estados de espín son poblados por igual y de manera aleatoria), $\max(N_\mu) = N/q$ y $M = 0$. Volveremos sobre el parámetro de orden en el Capítulo 4.

1.3. Propiedades

El modelo de Potts bidimensional fue resuelto exactamente en la criticalidad por Baxter [2, 18] utilizando teoría de grafos, para valores de q arbitrarios. Hay otros pocos casos resueltos exactamente: $q = 1$ (que es equivalente a un problema de percolación de ligaduras [19, 20]), $q = 2$ (modelo de Ising); la red cuadrada con $q = 3$ y $K = -\infty$ ($K = \frac{J}{kT}$) (problema de tri-coloreo); y la red triangular con $q = 4$ y $K = -\infty$ (problema de tetra-coloreo) [21]. Las soluciones de estos problemas y de muchos otros problemas con solución exacta en física estadística pueden encontrarse en [22].

La Teoría de Landau [23], así como la Aproximación de Campo-Medio [16], predicen que la transición es de 1^{er} orden para todo $q \geq 3$ independientemente de la dimensionalidad d . Las expansiones- ϵ del Grupo de Renormalización [24, 25, 26, 27] muestran que esto es correcto suficientemente cerca de la dimensionalidad marginal $d^* = 6$; mientras que es sabido exactamente [2] que en dos dimensiones la transición es de segundo orden para $q \leq 4$ y de 1^{er} orden para $q > 4$. Expansiones en series para altas temperaturas muestran que la transición es de 1^{er} orden para $q = 4$ y $d = 4$ [28], pero no pueden dar una respuesta clara a lo que ocurre para menores q y menores d . La sugerencia [29] de que para $d = 3$, $q = 3$ ocurre una transición débil de 1^{er} orden ha sido respaldada por trabajos de simulación con métodos de

Monte Carlo.

Una revisión de muchas de las propiedades conocidas del *Modelo de Potts* pueden ser encontradas en [4].

1.4. Aplicaciones

Por muchos años el modelo de Potts fue considerado como un sistema que exhibía una transición de fase orden-desorden, primariamente de interés teórico. Pero luego se reconoció que era posible el desarrollo experimental del modelo.

El principio subyacente en la realización experimental de un sistema de espines es el principio de universalidad; por el cual somos guiados a buscar sistemas reales pertenecientes a la misma clase de universalidad (i.e., que posean el mismo conjunto de exponentes críticos) que el modelo teórico de espines en cuestión.

Para el modelo de Potts un ejemplo es la transición que ocurre en monocapas y substratos absorbidos en superficies cristalinas [30, 31, 32] (para $d = 2$); o la que ocurre en ferromagnetos cúbicos inmersos en un campo magnético diagonal (i.e., aplicado en la dirección [111]) [33, 34] (para $d = 3$, $q = 3$); así como también ciertas transiciones estructurales [35].

En los últimos años, investigadores en el área de física nuclear han incurrido en la utilización del modelos de Potts para el estudio del deconfinamiento y/o transición quiral en QCD para valores físicos de la masa de los quarks, asociándola al quiebre de la simetría $Z(3)$ en la transición débil de 1^{er} orden correspondiente a $q = 3$, $d = 3$ [36].

Como complemento, este modelo constituye una efectiva base de prueba para teorías aproximadas de transiciones de fase, ya que el orden de la transición depende tanto de q como de d . Y existen numerosos trabajos en simulaciones de Monte Carlo en esa dirección.

Capítulo 2

Transiciones de fase de 1^{er} orden y metaestabilidad

2.1. Generalidades

Las transiciones de fase (como la condensación del agua, el derretimiento del hielo, etc.), son fenómenos muy familiares; sin embargo algunos de sus aspectos físicos básicos aún no son entendidos en absoluto. La mecánica estadística intenta realizar una conexión entre las fases macroscópicas del sistema y sus propiedades microscópicas (cómo las fuerzas entre los átomos, etc.). A nivel cuantitativo esto es aún en gran parte imposible: incluso si son conocidas las interacciones atómicas efectivas, es difícilmente posible predecir teóricamente bajo qué condiciones termodinámicas (temperatura, presión, etc.) ocurre una transición de fase. Algunos métodos analíticos son útiles para predecir diagramas de fase en problemas de red (por ejemplo, transición orden-desorden en la aleación FCC Cu_3Au). Para otros problemas, como las transiciones sólido-líquido, líquido-gas del Ar , tenemos que basarnos completamente en aproximaciones de simulaciones numéricas realizadas en computadoras.

Las transiciones de fase se clasifican según el “orden” de la transición. Ésta clasificación considera el potencial termodinámico (por ejemplo la energía libre de Helmholtz F) y sus derivadas, en la transición. Si una o más de las derivadas primeras de F sufren un cambio discontinuo, la transición se denomina “de primer orden” o *discontinua*. Si las primeras derivadas son continuas pero las segundas presentan singularidades (al menos una de ellas diverge), tenemos una transición de fase “de segundo orden” o *continua*, i.e. un punto

crítico en el diagrama de fases. A pesar de ser los fenómenos críticos mucho más especiales (ocurren sólo en algunos puntos, o líneas en el diagrama de fases) que las transiciones de fase de 1^{er} orden, son mucho mejor entendidos teóricamente. Esto es porque un fenómeno crítico se presenta debido a divergencias en las longitudes de correlación de las fluctuaciones del “parámetro de orden” u otra variable termodinámica que distinga las fases. Cerca del punto crítico esta longitud es muy grande, y sólo la estructura de las configuraciones del sistema en esta gran escala es importante. En una transición de 1^{er} orden, en cambio, no hay longitudes de correlación divergentes y en general no podemos restringir la atención a fenómenos de longitudes de correlación grandes; y no podemos esperar universalidad para el comportamiento de las funciones termodinámicas cerca de la transición, como en los fenómenos críticos. Sin embargo, algunas aproximaciones basadas en fenómenos críticos, como la teoría del Grupo de Renormalización, han contribuido al entendimiento de transiciones de primer orden.

Es usual mezclar terminologías y referirnos, por ejemplo, a la temperatura de transición en una transición de fase de 1^{er} orden cómo “temperatura crítica”.

Un problema también familiar es el fenómeno de metaestabilidad, por ejemplo en la condensación gas-líquido: podemos sobre-enfriar la transición y obtener un gas supersaturado metaestable. Esto nos lleva a varios desafíos de la mecánica estadística. ¿Cómo definimos un estado metaestable termodinámicamente? ¿Hay un significado para el concepto de límite de metaestabilidad? ¿Existe un efecto precursor debido a gotas de la otra fase anunciando la llegada de una transición de 1^{er} orden?

2.2. Estados metaestables cerca de una transición de fase de primer orden

Las fases metaestables son muy comunes en la naturaleza, y para muchos propósitos prácticos en nada diferentes a las fases estables (por ejemplo, el diamante es sólo una modificación metaestable del grafito). Incluso, teorías aproximadas de transiciones de fase de 1^{er} orden dan cómo resultados ramas de energía libre que no corresponden a estados térmicos de equilibrio (de mínima energía libre) y son comunmente interpretados cómo estados me-

taestables o inestables.

Desafortunadamente, mientras la descripción de la metaestabilidad parece tan directa en aproximaciones como la de Campo Medio, no lo es si uno trata con aproximaciones más rigurosas. La mecánica estadística está construida para dar como resultado estados de equilibrio y la función partición está dominada por las configuraciones del sistema que poseen la menor energía libre. Por ejemplo, en un magneto sometido a un campo $H < 0$, los estados con magnetización negativa tienen menor energía libre que aquellos con magnetización positiva; luego los últimos no resultan de la función partición en el límite termodinámico.

La idea que se origina es que para definir un estado metaestable en el marco de la mecánica estadística uno tiene que comprimir el espacio de las fases convenientemente: calculando “funciones partición restringidas” se prohíben configuraciones de sólo dos fases (ordenada y desordenada, por ejemplo) y se consigue definir estados metaestables. La pregunta es, ¿Cómo debe ser hecho esto en la práctica?. Varias aproximaciones de este tipo han sido sugeridas [37]:

En un ferromagneto de Ising a bajas temperaturas podemos, para el estado con magnetización positiva en un campo magnético negativo, prohibir todas las configuraciones que contengan grupos homogéneos (clusters) que excedan cierto tamaño, de espines “hacia abajo” [38]. Por supuesto, la propiedad de estados metaestables definida de esta manera dependerá en alguna medida del tamaño de cluster que elijamos como cota. Necesitamos argumentos físicos para optimizar la elección de este tamaño de corte. Una recomendación de cómo hacer esto viene de la teoría de nucleación, en el marco del modelo de gotas, que veremos más adelante.

Otra aproximación para suprimir la separación en las dos fases -con parámetros de orden ϕ_1^{coex} y ϕ_2^{coex} - coexistiendo en una transición de fase de primer orden, consiste en restringir al sistema dividiéndolo en celdas de tamaño L^d (L algún tamaño, d dimensionalidad) y requiriendo que el parámetro de orden ϕ con $\phi_1^{coex} < \phi < \phi_2^{coex}$ sea fijo, no sólo globalmente, sino dentro de cada celda. Si L es lo suficientemente pequeño, la separación de fase dentro de una celda no puede ocurrir y entonces obtenemos una densidad de energía de grano grueso $f_{cg}(\phi)$ de estados con parámetro de orden uniforme ϕ . Sin embargo, identificar $f_{cg}(\phi)$ con la densidad de energía de estados metaestables no es

totalmente satisfactorio ya que muestra cierta dependencia con el tamaño de grano L (Figura 2.1). En la región de una fase, si permitimos $L \rightarrow \infty$, $f_{cg}(\phi)$ tiende a $f(\phi)$, la verdadera densidad de energía libre. Sin embargo, si permitimos $L \rightarrow \infty$ en la región de coexistencia, permitimos separación de fase incluso dentro de cada celda.

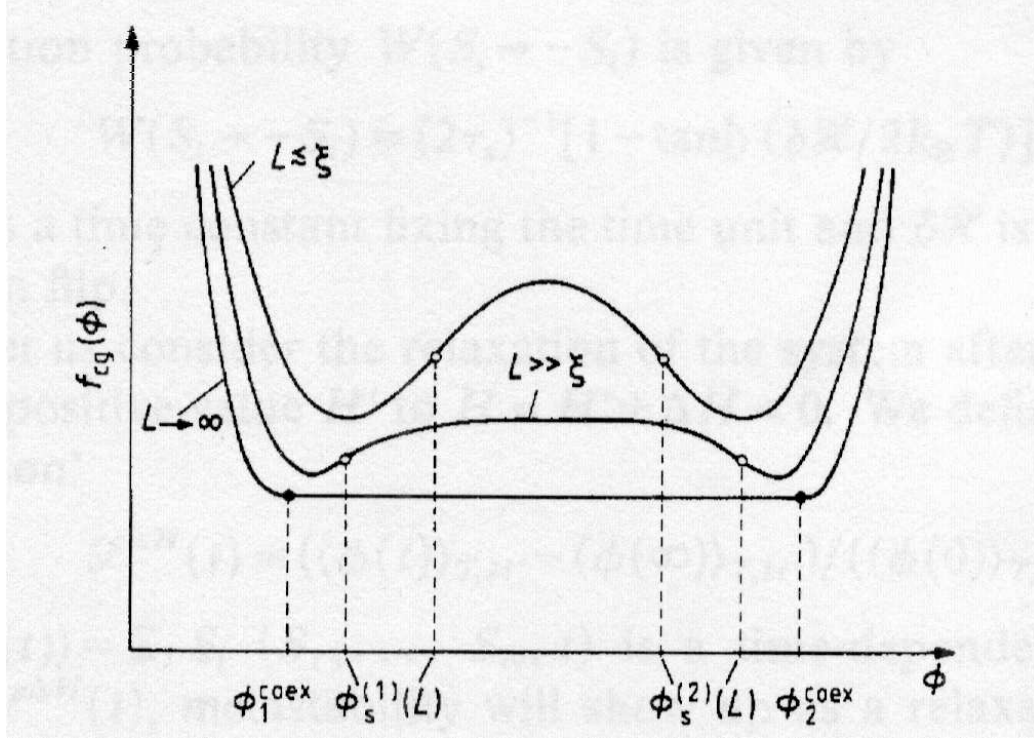


Figura 2.1: Gráfico esquemático de la densidad de energía de grano grueso $f_{cg}(\phi)$ como función del parámetro de orden ϕ en una transición de fase de primer orden de ϕ_1^{coex} a ϕ_2^{coex} . Los valores espinoles $\phi_s^{(1,2)}(L)$ definidos de los puntos de inflexión de $f_{cg}(\phi)$ dependen del tamaño de grano L .

Una aproximación completamente diferente surge del echo de que experimentalmente observamos promedios temporales que sólo son equivalentes a promedios sobre ensambles en el equilibrio térmico si el sistema es ergódico; pero un estado metaestable es una situación fuera del equilibrio y por ende resulta mucho más natural definirlo considerando la relajación dinámica del sistema [1]. Si consideramos nuevamente el modelo de Ising como ejemplo, podemos asociar una dinámica al sistema asumiendo una ecuación maestra markoviana para la probabilidad $P(S_1, \dots, S_N, t)$ de que una configuración

de espines $\{S_1, \dots, S_N\}$ ocurra al tiempo t :

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}P(S_1, \dots, S_N, t) &= - \sum_{i=1}^N W(S_i \rightarrow -S_i)P(S_1, \dots, S_i, \dots, S_N, t) + \\ &+ \sum_{i=1}^N W(-S_i \rightarrow S_i)P(S_1, \dots, -S_i, \dots, S_N, t) \quad (2.1) \end{aligned}$$

con una probabilidad de transición $W(S_i \rightarrow -S_i)$ adecuadamente elegida, como veremos en el próximo capítulo.

Consideramos la relajación del sistema después de un cambio repentino en el campo H de un valor positivo H' a $H' + \Delta H < 0$ (Un cálculo exacto de la ecuación de estado produce el salto de magnetización de ϕ_0 a $-\phi_0$ cuando H cambia de 0^+ a 0^-). Definimos una “función de relajación de no-equilibrio”

$$\mathcal{L}^{\Delta H}(t) = (\langle \phi(t) \rangle_{T, H'} - \langle \phi(\infty) \rangle_{T, H'}) / (\langle \phi(0) \rangle_{T, H'} - \langle \phi(\infty) \rangle_{T, H'}) \quad (2.2)$$

donde $\langle \phi(t) \rangle = \sum_i S_i(S_1, \dots, S_N, t)$ es un parámetro de orden dependiente del tiempo. En la función de relajación $\mathcal{L}^{\Delta H}(t)$, la metaestabilidad se manifiesta por una relajación que ocurre en dos etapas. Después de un tiempo corto (que es a menudo del orden del tiempo de relajación del parámetro de orden en equilibrio τ_ϕ^{eq} , si H' y ΔH son pequeños) el sistema se ubicará en $\langle \phi(t) \rangle_{T, H'} \approx \phi_{ms}$, el valor del parámetro de orden del estado metaestable. Como consecuencia, esperamos un *plateau* en el gráfico de $\mathcal{L}^{\Delta H}(t)$ versus tiempo, como se ejemplifica en la Fig. 2.2. Sólo en una escala de tiempo mucho más grande τ_ϕ^{ms} (el “tiempo de vida” del estado metaestable), podemos ver que el “equilibrio” metaestable de echo no es estacionario sino de relajación lenta. La condición para que la metaestabilidad ocurra es entonces simplemente que las dos escalas temporales sean claramente diferentes: por ejemplo [1], $\tau_\phi^{ms} \geq 10^2 \tau_\phi^{eq}$ (la igualdad definiría un “límite de metaestabilidad”, en un sentido completamente cinético). Cabe aclarar que este es sólo un posible criterio, en general la condición es¹ $\tau_\phi^{ms} \gg \tau_\phi^{eq}$.

Concluimos esta discusión sobre estados metaestables remarcando que $\mathcal{L}^{\Delta H}(t)$ puede ser definida precisamente, pero las propiedades del “estado” metaestable mismo sólo pueden ser definidas con cierta incerteza intrínseca.

¹Conviene para ser rigurosos incluir un tercer tiempo, un tiempo característico de medición τ_{med} y completar la condición para la existencia de metaestabilidad pidiendo $\tau_\phi^{ms} \gg \tau_{med} \gg \tau_\phi^{eq}$

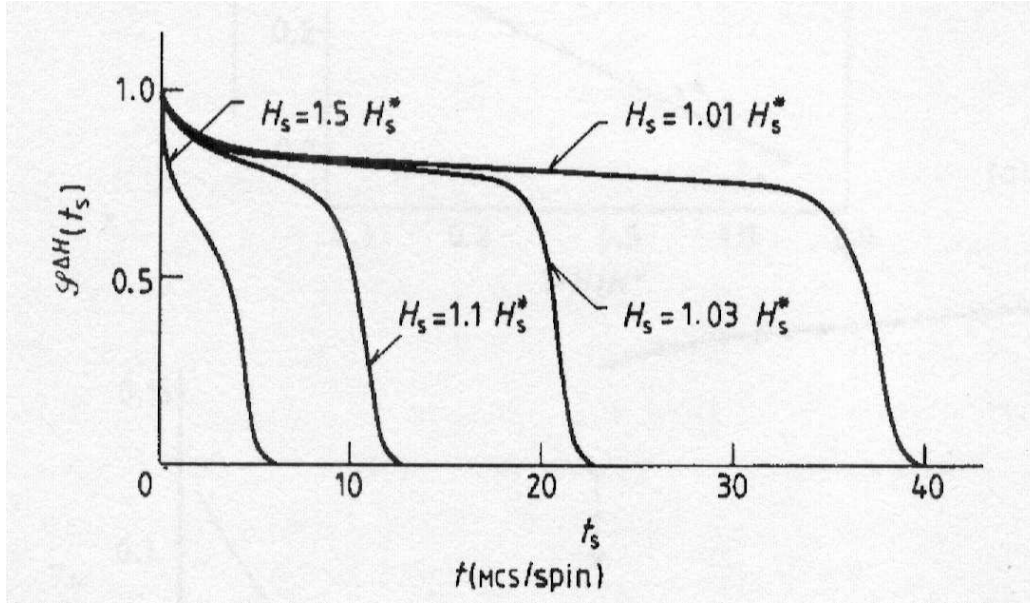


Figura 2.2: Función de relajación de no-equilibrio $\mathcal{L}^{\Delta H}(t)$ graficada versus tiempo para diferentes elecciones de $H_s \equiv H/k_B T$, de ([1]).

Esta incerteza es extremadamente pequeña cuando consideramos un estado metaestable cercano a la transición, pero se vuelve mayor y mayor a medida que nos introducimos en la región de metaestabilidad. Esto es cierto también en experimentos: para preparar un sistema en un estado metaestable tenemos que cambiar algunos parámetros externos de control (como T , H); luego, esperar un tiempo hasta que el proceso de relajación hacia el estado metaestable haya terminado; pero al mismo tiempo la relajación del estado metaestable al estado de completo equilibrio puede haber comenzado. De manera que, alguna dependencia temporal intrínseca es inevitable en principio, a pesar de no ser muy relevante en la práctica.

2.3. Teoría de Nucleación Clásica

Exactamente en el punto de transición de fase de primer orden, la creación de un dominio de una fase sumergido en la otra fase coexistente costará solamente una contribución debida a la densidad de energía interfasial f_{int} entre las dos fases, que es proporcional al área del dominio formado; no hay término volumétrico (proporcional al volumen del dominio), dado que las energías libres de ambas fases son iguales. La formación espontánea de di-

chos dominios (“gotas”) debido a fluctuaciones estadísticas, es relativamente fácil en esta situación. Pero más lo es fuera del punto de transición, si bien cerca, en la región de metaestabilidad, dónde el término volumétrico contribuye al defecto de energía libre.

En un estado metaestable, la formación y crecimiento de gotas suficientemente grandes (“nucleación”) de la fase estable es el mecanismo básico de decaimiento hacia el estado de equilibrio, pero esas fluctuaciones “heterofásicas” ocurren incluso en la región de una fase y se piensa que son responsables de una “singularidad esencial” [39, 40] en la curva de coexistencia. La línea de pensamiento común [37] es considerar a las gotas como objetos macroscópicos que pueden ser descritos por un término volumétrico y uno superficial. La Teoría de Nucleación Clásica (TNC) postula que una gota de radio R de la fase estable puede aparecer con probabilidad $P(R)$ proporcional al factor de Boltzman

$$P(R) \sim g(L) \exp[-\beta \mathcal{F}(R)] \quad (2.3)$$

dónde $\mathcal{F}(R)$ es el exceso (o defecto) de energía libre por la presencia de la gota:

$$\mathcal{F}(R) = a(f_1 - f_2)R^d + bsR^{d-1} \quad (2.4)$$

dónde s es la tensión superficial (o interfásica) en el contorno de la gota, f_1 y f_2 son respectivamente las energías libres por unidad de volumen dentro y fuera de la gota, a y b son constantes geométricas positivas. Cómo $(f_1 - f_2) < 0$ se produce una competencia entre el término volumétrico y el superficial. El radio crítico

$$R_c = \frac{bs(d-1)}{a(f_2 - f_1)d} \quad (2.5)$$

maximiza la energía libre (2.4). Si una gota de radio $R > R_c$ es formada por las fluctuaciones, el factor volumétrico domina y la fase estable crece, avanzando sobre todo el sistema. Si se forma una con $R < R_c$ la tensión superficial domina y la gota es controlada por su entorno y se desvanece.

El prefactor $g(L)$ depende de L sólo para tamaños no muy grandes. En éste régimen sólo se forma una única gota de la fase estable y se expande hasta cubrir la red completa. En particular, en dos dimensiones $g(L) \sim L^2$ en este régimen. Para tamaños mayores se forman muchas gotas críticas que se expanden y coalescen, en este régimen, denominado “de coalecencia” el prefactor g no depende de L

La TCN (considerando sólo gotas esféricas) postula que, si suponemos que sólo una gota de tamaño crítico es formada, el tiempo de nucleación $\tau(L)$ es inversamente proporcional a la probabilidad de generación de una gota crítica

$$\tau(L) \propto g(L)^{-1} \exp(\beta \mathcal{F}(R_c)) \quad (2.6)$$

En el Capítulo 7 particularizamos para el caso $d = 2$ y estudiamos el escaleo de τ con el tamaño del sistema.

2.4. Crecimiento de dominios y coarsening

Cuando un sistema es enfriado rápidamente desde una fase desordenada a altas temperaturas hasta temperaturas muy inferiores a la de transición, se forman dominios de las diferentes configuraciones de la fase estable y crecen (p.ej., magnetización hacia arriba o hacia abajo en el modelo de Ising), proceso que se conoce como *coarsening*. Un ejemplo muy común de coarsening se nos presenta a la hora del almuerzo [41], cuando uno agita el condimento de la ensalada, y el aceite y el vinagre se mezclan en pequeñas gotitas. Una vez que dejamos de agitar las pequeñas gotitas se convierten gradualmente en gotas grandes, formando una mezcla cada vez peor (menos mezclada) hasta que todo el aceite se separa del vinagre.

El proceso de coarsening ha sido muy estudiado, tanto experimental como teóricamente en los últimos años [42, 43]. En muchos sentidos un sistema en proceso de coarsening a tiempos largos es análogo a un sistema en equilibrio cerca del punto crítico. Típicamente el proceso de coarsening está caracterizado por leyes de crecimiento para escalas típicas de medida asociadas con los dominios (como el tamaño promedio de los dominios, $l(t)$). Éste tamaño característico generalmente crece con una ley de potencia del tiempo

$$l(t) \propto t^n \quad (2.7)$$

Dado que a tiempos largos esta escala de tamaño será macroscópica, podemos esperar que, cómo en los fenómenos críticos, el exponente n del escaleo sea independiente de ciertos detalles microscópicos del sistema, como la estructura de red o la dinámica particular utilizada (en el caso de simulaciones numéricas). En otras palabras, se espera que haya sólo unas pocas clases de universalidad. Dos de ellas han sido delineadas. La primera, con $n = 1/2$, es llamada Lifshitz-Allen-Cahn [44, 45], o *crecimiento generado por curvatura* y ocurre en muchos sistemas donde el parámetro de orden no es conservado

por la dinámica. Ejemplo de esto es el modelo de Ising con la dinámica de Glauber. La segunda clase corresponde a un proceso más lento con $n = 1/3$ y es conocida como crecimiento de Lifshitz-Slyozov [46] y ocurre cuando el parámetro de orden es conservado por la dinámica. El ejemplo típico de esta clase es la decomposición espinodal que es el proceso de separación de fases, en un fluido binario o aleación, al enfriar bruscamente desde la región “de una fase” (donde los átomos se mezclan) hacia la región “de dos fases” (donde se separan). Aunque resulta llamativo imaginar que todos los modelos se enmarcan en una de estas dos clases de universalidad, no existe una razón a priori para esperar que esto sea así. En particular, es conocido que sistemas con desorden impuesto, cómo el modelo de Ising con campo aleatorio o un modelo de Ising con impurezas diluidas tienen un coarsening logarítmicamente lento ($n = 0$). En los últimos tiempos, ha habido varias afirmaciones de que incluso en sistemas sin aleatoriedad, el coarsening obedecerá la ley $l \simeq \ln(t)$. En particular, Shore y coautores [47] encontraron que un sistema tridimensional con interacciones ferromagnéticas entre primeros vecinos e interacciones anti-ferromagnéticas con segundos vecinos, presenta esa dinámica compleja.

Finalizamos este capítulo planteando un dato frecuente en la literatura: en sistemas físicos en materia condensada con transiciones de fase de primer orden, se espera que un enfriamiento brusco de una fase de altas temperaturas a otra de bajas temperaturas desenlace en un proceso de nucleación o de decomposición espinodal [36]. La conjetura se basa en una derivación, del tipo de la teoría de campo-medio, de la región de metaestabilidad que es determinada por el mínimo de energía libre funcional. Si el enfriamiento brusco o *quench* termina en la llamada “región de nucleación”, i.e. la región entre la curva de coexistencia y la espinodal, la transición de fase ocurre via nucleación. Si el quench termina en temperaturas bajo la espinodal la transición ocurre a través de decomposición espinodal, es decir, coarsening. El tamaño de la región de nucleación debería crecer con la “fuerza” del orden de la transición (p.ej., el salto en la energía interna); y viceversa, para una transición de primer orden débil es más probable terminar en la región de decomposición espinodal.

Capítulo 3

Simulaciones numéricas

Muchos sistemas en física estadística, y en física en general, no pueden ser tratados y resueltos en forma analítica, por su complejidad o por involucrar muchos grados de libertad. En estos casos las simulaciones numéricas se vuelven una herramienta necesaria y a la vez poderosa para el estudio de las propiedades del sistema.

Un problema típico en mecánica estadística consiste en calcular valores medios de observables macroscópicos de un sistema cuyo Hamiltoniano se asume conocido. Podemos citar como ejemplos algunos sistemas magnéticos clásicos:

El modelo de Ising, que representa un ferromagneto con anisotropía uniaxial, donde N espines interactúan de acuerdo a

$$\mathcal{H}_{Ising} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - H \sum_{i=1}^N S_i \quad , \quad S_i = \pm 1; \quad (3.1)$$

el modelo **XY**

$$\mathcal{H}_{XY} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y) - H_x \sum_{i=1}^N S_i^x \quad , \quad (S_i^x)^2 + (S_i^y)^2 = 1 \quad (3.2)$$

que aproxima el comportamiento de un ferromagneto con anisotropía planar; o el modelo de Heisenberg “clásico”

$$\mathcal{H}_{XY} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j) - H_z \sum_{i=1}^N S_i^z \quad , \quad (S_i^x)^2 + (S_i^y)^2 + (S_i^z)^2 = 1 \quad (3.3)$$

que representa un ferrromagneto completamente isotrópico.

El modelo de Potts también forma parte de esta familia y a su vez, como ya se dijo, tiene aplicaciones en otro tipo de sistemas físicos.

Intentaremos, entonces, entender el formalismo que nos permite tratar a estos sistemas numéricamente y obtener resultados con validez física.

3.1. Métodos de Monte Carlo

El promedio térmico de cualquier observable $A(\mathbf{x})$ ($\mathbf{x}$ es el vector en el espacio de las fases que describe las variables correspondientes a los grados de libertad del sistema, e.j. $\mathbf{x} = (S_1, S_2, \dots, S_N)$ para (3.1)) es definido en el ensamble canónico como:

$$\langle A(\mathbf{x}) \rangle_T = \frac{1}{Z} \mathbf{Tr}_{\mathbf{x}} [A(\mathbf{x}) \exp(-\mathcal{H}(\mathbf{x})/k_B T)] \quad (3.4)$$

$$Z = \mathbf{Tr}_{\mathbf{x}} [\exp(-\mathcal{H}(\mathbf{x})/k_B T)]$$

Donde $\mathbf{Tr}_{\mathbf{x}}$ denota una suma (o integral) sobre todos los valores permitidos de $\mathbf{x}$.

El método de Monte Carlo en mecánica estadística de equilibrio nace de la idea de aproximar la ecuación exacta (3.4), donde se suma sobre todos los estados $\{\mathbf{x}\}$, por una sumatoria que utilice sólo un subconjunto característico de puntos del espacio de las fases $\{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_M\}$ como muestreo estadístico.

Claramente, si consideramos el límite $M \rightarrow \infty$, la suma discreta

$$\overline{A(\mathbf{x})} = \frac{\sum_{l=1}^M \exp(-\mathcal{H}(\mathbf{x}_l)/k_B T) A(\mathbf{x}_l)}{\sum_{l=1}^M \exp(-\mathcal{H}(\mathbf{x}_l)/k_B T)} \quad (3.5)$$

debe aproximarse a (3.4). Incluso aveces no es necesario sumar infinitos términos; por ejemplo, en el caso del problema de Ising, (3.4) es una suma discreta sobre los 2^N estados $\mathbf{x} = (S_1, \dots, S_N)$. Pero en (3.5) queremos trabajar solamente con un subconjunto pequeño de esos estados $M \ll 2^N$.

El llamado método de Monte Carlo de *muestreo simple* consiste en elegir los puntos $\mathbf{x}$ de manera *aleatoria* (una distribución uniforme en el espacio de las fases) utilizando “*números pseudo-aleatorios*” producidos por un “*generador de números aleatorios*” convenientemente construido en la computadora.

Este método posee ciertas ventajas y en general es “rápido”, sin embargo no es de utilidad para los problemas que nos interesa tratar pues, en particular, falla para “bajas” temperaturas y N “pequeños” [48].

Lo que necesitamos es un método más eficiente, que elija las configuraciones $\mathbf{x}_1$ no de manera completamente aleatoria, sino preferentemente de aquella región del espacio de las fases que tenga relevancia para la temperatura en que queremos calcular los valores medios.

Suponemos entonces un proceso en el que los M puntos $\mathbf{x}_1$ del espacio de las fases con los que calculamos el promedio son elegidos de acuerdo a alguna probabilidad $P(\mathbf{x}_1)$, de manera que (3.5) ahora es reemplazada por

$$\overline{A(\mathbf{x})} = \frac{\sum_{l=1}^M \exp(-\mathcal{H}(\mathbf{x}_1)/k_B T) A(\mathbf{x}_1)/P(\mathbf{x}_1)}{\sum_{l=1}^M \exp(-\mathcal{H}(\mathbf{x}_1)/k_B T)/P(\mathbf{x}_1)} \quad (3.6)$$

Una elección simple y natural de $P(\mathbf{x}_1)$ en (3.6) es $P(\mathbf{x}_1) \propto \exp(-\mathcal{H}(\mathbf{x}_1))$, de manera que el factor de Boltzman se cancela, y (3.6) se reduce a un promedio aritmético

$$\overline{A(\mathbf{x})} = \frac{1}{M} \sum_{\mathbf{x}} A(\mathbf{x}) \quad (3.7)$$

Éste se dió en llamar método de Monte Carlo de *muestreo pesado*. El problema ahora es, claro, encontrar un procedimiento que realice este “muestreo pesado”.

Metropolis et al. [49] propusieron a cambio de elegir los sucesivos estados $\mathbf{x}_1$ independientemente uno de otro, construir un proceso markoviano donde cada estado $\mathbf{x}_{1+1}$ es construido a partir de un estado previo $\mathbf{x}_1$ con una adecuada transición de probabilidad $W(\mathbf{x}_1 \rightarrow \mathbf{x}_{1+1})$.

Tenemos entonces una dinámica estocástica para la evolución temporal de nuestro sistema, dada por la ecuación maestra

$$\frac{d}{dt}P(\mathbf{x}, t) = - \sum_{\mathbf{x}'} W(\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}') P(\mathbf{x}, t) + \sum_{\mathbf{x}'} W(\mathbf{x}' \rightarrow \mathbf{x}) P(\mathbf{x}', t) \quad (3.8)$$

donde $P(\mathbf{x}, t)$ es la densidad de probabilidad de encontrar al sistema en la configuración $\mathbf{x}$ al tiempo t . Aquí hemos introducido una *interpretación dinámica* del método de Monte Carlo (considerando $P(\mathbf{x}_1) \equiv P(\mathbf{x}, t)$). Su base

teórica está dada por las correlaciones que guardan las configuraciones generadas secuencialmente en una cadena markoviana, y es de aplicación provechosa en distintos campos de la física[48]).

Es posible elegir la probabilidad de transición W de manera que en el límite $t \rightarrow \infty$ la función distribución de estados $P(\mathbf{x}, t)$ tienda a la distribución de equilibrio de Boltzman-Gibbs

$$P_{eq}(\mathbf{x}) = \frac{1}{Z} \exp\left(-\frac{\mathcal{H}(\mathbf{x})}{k_B T}\right) \quad (3.9)$$

como deseamos. Para ello debemos exigir de (3.8) que para $P(\mathbf{x}, t) \rightarrow P_{eq}(\mathbf{x})$:

$$0 = - \sum_{\mathbf{x}'} W(\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}') P(\mathbf{x}, t) + \sum_{\mathbf{x}'} W(\mathbf{x}' \rightarrow \mathbf{x}) P(\mathbf{x}', t) \quad (3.10)$$

Una condición suficiente para satisfacer esto último es imponer el principio de *Balance Detallado*:

$$P_{eq}(\mathbf{x}) W(\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}') = P_{eq}(\mathbf{x}') W(\mathbf{x}' \rightarrow \mathbf{x}) \quad (3.11)$$

La ecuación (3.11) implica que la razón entre las transiciones de probabilidad para un “movimiento” $\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}'$ y el movimiento inverso $\mathbf{x}' \rightarrow \mathbf{x}$ depende sólomente de la variación de energía $\delta\mathcal{H} = \mathcal{H}(\mathbf{x}') - \mathcal{H}(\mathbf{x})$,

$$\frac{W(\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}')}{W(\mathbf{x}' \rightarrow \mathbf{x})} = \exp\left(-\frac{\delta\mathcal{H}}{k_B T}\right) \quad (3.12)$$

Obviamente esto no especifica una forma única de $W(\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}')$ y aún existe cierta arbitrariedad en su elección. Dos elecciones frecuentes son:

$$\begin{aligned} W(\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}') &= \frac{1}{2\tau_s} \left[1 - \tanh\left(\frac{\delta\mathcal{H}}{2k_B T}\right) \right] \\ &= \frac{1}{\tau_s} \frac{\exp(-\delta\mathcal{H}/k_B T)}{[1 + \exp(-\delta\mathcal{H}/k_B T)]} \end{aligned} \quad (3.13)$$

o

$$W(\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}') = \begin{cases} \frac{1}{\tau_s} \exp(-\delta\mathcal{H}/k_B T) & \text{si } \delta\mathcal{H} > 0, \\ \frac{1}{\tau_s} & \text{en otro caso} \end{cases} \quad (3.14)$$

donde τ_s es un factor arbitrario que eligiremos igual a uno (en general τ_s se interpreta como la unidad de “tiempo de Monte Carlo” y llamamos a W “probabilidad de transición por unidad de tiempo”).

3.2. Dinámica de Metrópolis

En el presente trabajo utilizamos algoritmos que simulan una dinámica que toma como probabilidad de transición a (3.14), usualmente llamada *dinámica de Metrópolis*.

El esquema general del algoritmo de Metrópolis es el siguiente:

- Se elige una configuración inicial arbitraria $\mathbf{x}$,
- Se elige una nueva configuración $\mathbf{x}'$, por algún método (de forma secuencial o aleatoria). En nuestro caso $\mathbf{x}'$ difiere de $\mathbf{x}$ en el estado de espin de un sitio i al azar de los N de la red,
- Se calcula la variación de energía $\delta\mathcal{H} = \mathcal{H}(\mathbf{x}_{\mathbf{I}'}) - \mathcal{H}(\mathbf{x}_{\mathbf{I}})$,
- Si $\delta\mathcal{H} \leq 0$ se acepta la nueva configuración,
- Si $\delta\mathcal{H} > 0$ se acepta la nueva configuración con probabilidad $\exp(-\delta\mathcal{H}/k_B T)$,
- Se repite el proceso con la configuración elegida.

Llamamos *paso de Monte Carlo* al ciclo que consiste en repetir N veces el proceso recién descrito (requiriendo que en promedio cada espin sea elegido una vez). Normalizamos la escala temporal t de manera que en cada unidad de tiempo ocurran $N\tau_s^{-1}$ transiciones de espines individuales. Y como hemos elegido $\tau_s = 1$ nuestra unidad de tiempo es 1 MCS (un paso de Monte Carlo).

Capítulo 4

Descripción del sistema

A lo largo del trabajo estudiamos el modelo de Potts con $q = 9$ en una red cuadrada bidimensional de lado L con condiciones de contorno periódicas: El sistema consta de $N = L \times L$ espines a los que reconoceremos por su ubicación coordinada en la red $S(i, j)$, con $i = 1, \dots, L$, $j = 1, \dots, L$. Cada espín $S(i, j)$ posee cuatro vecinos cercanos $S(i + 1, j)$, $S(i, j + 1)$, $S(i - 1, j)$, $S(i, j - 1)$ con los que interactúa de acuerdo a (1.10), siendo

$$S(L + 1, j) \equiv S(1, j), \forall j \quad \text{y} \quad S(i, L + 1) \equiv S(i, 1), \forall i.$$

De manera que nuestra red “cuadrada” en rigor de verdad está trazada sobre un toro bidimensional.

En primer lugar, estamos interesados en el cálculo de la energía por espín

$$E_N = \frac{1}{N} \langle H \rangle \quad (4.1)$$

y el parámetro de orden (1.12)

$$M = \frac{q^{\frac{\max(N_\mu)}{N}} - 1}{q - 1}$$

así como también, en algún caso, las funciones respuesta asociadas a estas cantidades:

$$C_N = \frac{1}{NT^2} [\langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2] \quad (4.2)$$

calor específico por espín, y

$$\chi_N = \frac{N}{T} [\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2] \quad (4.3)$$

“suceptibilidad magnética” por espín.

Vale la pena aclarar que, en general, en sistemas de espines la *magnetización absoluta por espín* en alguna dirección privilegiada (p.ej., la dirección del campo) es útil como parámetro de orden y por lo general es lo que se usa como tal. En nuestro caso no definimos una *magnetización* debido a que no le hemos asignado direcciones en el espacio a los q posibles *estados* de los espines. Más que cambiar de dirección o “flippear” como se suele decir, nuestros espines se pintan y despintan de distintos colores o se etiquetan y desetiquetan con números entre 1 y q . Pero es de esperar que en ocasiones nos refiramos al parámetro de orden en términos de *magnetización* o que llamemos *suceptibilidad magnética* a la medida de la fluctuación del parámetro de orden.

También es útil tener en cuenta los valores que toma la energía por espín en los casos límites de orden y desorden completos:

Cuando $T \rightarrow 0$ el sistema se acomoda de manera que todos los s_i sean iguales, de (4.1) resulta $E_0 = -2$. Decimos que el sistema se encuentra en su *estado fundamental*, que tiene degeneración q .

Para $T \rightarrow \infty$ la configuración es completamente aleatoria y dado un espín cualquiera existe una probabilidad $4 \times \frac{1}{q}$ de que alguno de sus vecinos esté en su mismo estado y dado que sumar sobre todos los *pares* de la red equivale a sumar sobre todos los sitios y luego dividir por 2 tenemos $E_\infty = -\frac{2}{q}$.

De [16] contamos con el resultado exacto para la temperatura crítica en función de q

$$\frac{k_B T_c}{J} = \frac{1}{\ln(1 + \sqrt{q})} \quad (4.4)$$

y también con los valores exactos de la energía a T_c

$$\frac{E_c^- + E_c^+}{2J} = -1 - \frac{1}{\sqrt{q}} \quad (4.5)$$

donde

$$E_c^- = \lim_{T \rightarrow T_c^-} \langle E_N \rangle \quad \text{y} \quad E_c^+ = \lim_{T \rightarrow T_c^+} \langle E_N \rangle \quad (4.6)$$

($E_c^- \equiv E_c^+$ para $q < 4$, transición de segundo orden). Del resultado de Baxter [2] para el calor latente

$$\frac{E_c^+ - E_c^-}{J} = 2 \left(1 + \frac{1}{\sqrt{q}}\right) \tanh \frac{\Theta}{2} \prod_{n=1}^{\infty} (\tanh n\Theta)^2, \quad \Theta = \arccos \sqrt{q}/2 \quad (4.7)$$

y (4.5), podemos calcular E_c^+ y E_c^- separadamente y comparar luego con nuestros resultados numéricos. Para $q = 9$ los valores exactos resultan:

$$T_c = 0,7213 \quad , \quad E_c^+ = -1,0335 \quad \text{y} \quad E_c^- = -1,63316$$

Capítulo 5

Resultados previos

En este Capítulo presentamos algunos resultados y comentarios existentes en la literatura acerca de la dinámica en el modelo de Potts, cerca de la transición de primer orden.

En un trabajo con simulaciones de MC [9], hábilmente, con recursos computacionales mucho más limitados que los actuales, Binder estudió posibles ciclos de histéresis y la dinámica de relajación para el modelo de Potts de 3, 4, 5 y 6 estados. Plantea que para $q = 5, 6$ no se observan indicios claros de la existencia de histéresis asociada a estados metaestables, como sería de esperar para una transición de fase de primer orden. Critica un trabajo [50] de Blöte y Swendsen -dónde aseguran la existencia de ciclos de histéresis- argumentando que esos resultados son exagerados pues dependen fuertemente de la magnitud del “tiempo de promediación” y del intervalo en que se toman temperaturas sucesivas (que en el caso de [50] son $\Delta t = 100 MCS$ y $k_B \delta T / J = 0,02$ respectivamente). Obtiene mejores resultados para menores $\delta T / \Delta t$. Haciendo un análisis de exponentes críticos observa que incluso para $q = 5, 6$ sus resultados son consistentes con los obtenidos en estimaciones previas dónde la transición se suponía de segundo orden. Propone entonces dos escenarios posibles (extensivos a todo valor de q) para la transición en términos de E_N vs. T :

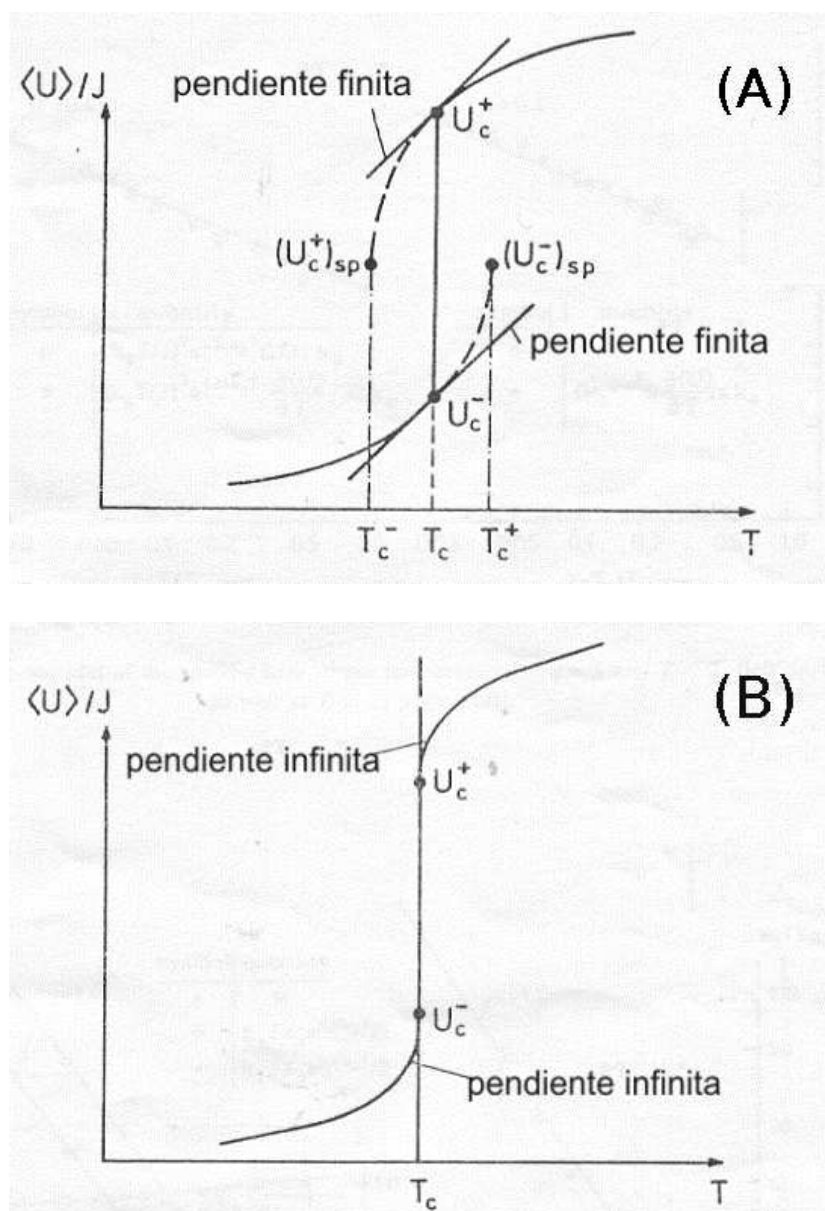


Figura 5.1: Esquema de la variación de la energía con la temperatura para el caso de singularidades espinodales (A) y para el caso de una verdadera divergencia del calor específico en una transición de fase de 1^{er} orden (B).

En el primer escenario, el ciclo de histéresis es muy angosto en el límite termodinámico, las temperaturas “pseudoespinodales” T_c^+ y T_c^- (en dónde diverge el calor específico) están muy próximas a T_c y la derivada $\frac{d\langle E_N \rangle}{dT}$ es finita a T_c , tal como se muestra en la figura (5.1A). En el segundo, el calor específico y la susceptibilidad divergen exactamente a T_c y el comportamiento es el de la figura (5.1B); en éste caso, la histéresis observada en simulaciones de MC sería atribuible a efectos de tamaño finito.

Binder estima que en el primer caso se espera para $q = 6$ $\Delta T/T_c \approx 10^{-3}$, siendo $\Delta T = T_c^\pm - T_c$ y un valor aún menor para $q = 5$. Sostiene que para distinguir estos dos escenarios habría que aproximarse lo suficiente a T_c , lo que requeriría (debido al fenómeno de redondeo por tamaño finito) sistemas de tamaño $N \approx 10^3 \times 10^3$. Por otro lado, estudiando el comportamiento de las funciones de relajación no-lineales de la energía y el parámetro de orden, no observa estados metaestables y sí un pronunciado decaimiento crítico en las leyes de potencias.

En otro orden de cosas, Murty, Challa, Landau y Binder [17] analizan efectos de tamaño finito en las cantidades termodinámicas estudiando varios momentos de la función distribución de energía, que es aproximada como superposición de dos gaussianas. Testean sus resultados teóricos en simulaciones de MC en el modelo de Potts de 10 estados en dos dimensiones; afirmando la validez de sus predicciones.

Arkin y coautores [51] estudian la transición de primer orden débil del modelo para $q = 5$ con un pequeño campo magnético aplicado. Señalan la presencia de una región de metaestabilidad¹ “dentro” de la cual el mecanismo de relajación es a través de la nucleación clásica, y fuera, mediante decomposición espinodal. En otro trabajo más reciente [36] Arkin y Çelik, analizan la transición débil de primer orden con $q = 3$ para el modelo de Potts en 3 dimensiones y nuevamente concluyen que después de un enfriamiento rápido que termina por debajo de T_c en la región metaestable, la evolución temporal hacia el equilibrio procede via nucleación.

Existen varios trabajos en dónde se estudia el modelo bidimensional de Potts en transiciones más marcadamente de primer orden:

Velytsky, Berg y Heller [7], presentan ciclos de histéresis de la energía para

¹Un dominio de temperaturas en las cercanías de la temperatura crítica

el modelo de Potts de 10 estados. Y por su parte se interesan en la estructura de dominios y la existencia de un proceso de nucleación en la transición.

Gupta [11] estudia la dinámica del modelo de 15 estados; mide numéricamente la tensión superficial orden-desorden; y basado en sus resultados asegura que el cambio de fase ocurre a través de un proceso de nucleación.

Meunier y Morel [12] estudian efectos de tamaño finito mediante el “modelo de la gota”. Concluyen que el intervalo de metaestabilidad ($T^* - T_c$) va a cero en el límite termodinámico.

Cómo podemos apreciar, la existencia de estados metaestables en la transición de fase de primer orden de nuestro modelo y la dinámica involucrada en el proceso de transición constituyen aún un problema abierto en el área de la física estadística. En los próximos capítulos presentamos los resultados de nuestro trabajo.

Parte II

Resultados

Capítulo 6

Estadística de equilibrio

6.1. Magnitudes termodinámicas

Si bien nuestro objetivo final es estudiar las propiedades dinámicas involucradas en la transición de fase del modelo, comenzamos el desarrollo de nuestro trabajo estudiando su comportamiento termodinámico.

Para tamaños de red entre $N = 20 \times 20$ y $N = 500 \times 500$ medimos E_N , M , C_N , χ_N en función de la temperatura.

Partiendo de un estado completamente ordenado (todos los s_i con igual valor) dejamos al sistema termalizar un tiempo $tran \simeq 3000 - 5000 MCS$ a una temperatura $T_{min} \simeq 0,5$ por debajo de la temperatura crítica; luego medimos las cantidades que nos interesan promediándolas durante $t_{max} \simeq 4000 - 7000 MCS$. Acto seguido, aumentamos la temperatura una cantidad $\Delta T \simeq 0,01$, termalizamos y promediamos. Repetimos el proceso hasta llegar a $T_{max} \simeq 1$ por encima de T_c . Presentamos como ejemplo los resultados obtenidos para $L = 150$:

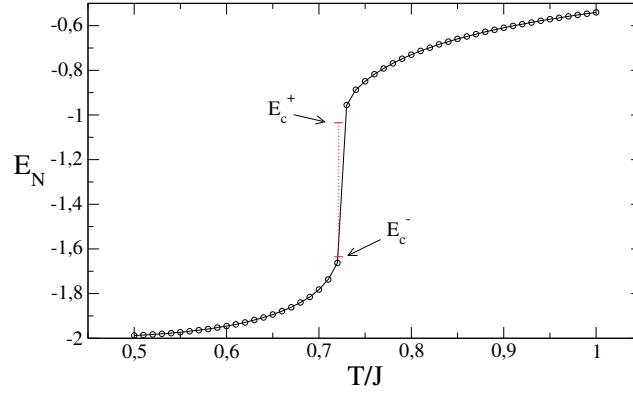


Figura 6.1: Energía por espín para una red $N = 150 \times 150$, para $T \ll 1$ tiende a la energía del estado fundamental $E(T = 0) = -2$, para $T \gg 1$ crece tendiendo hacia la energía de un estado completamente desordenado (en el infinito $E_\infty = -0,222$), presenta un claro salto en las proximidades de la temperatura crítica $T_c = 0,7213$. Comparamos el salto de E_N , correspondiente al *calor latente* de la transición T_c , con el valor exacto de [2].

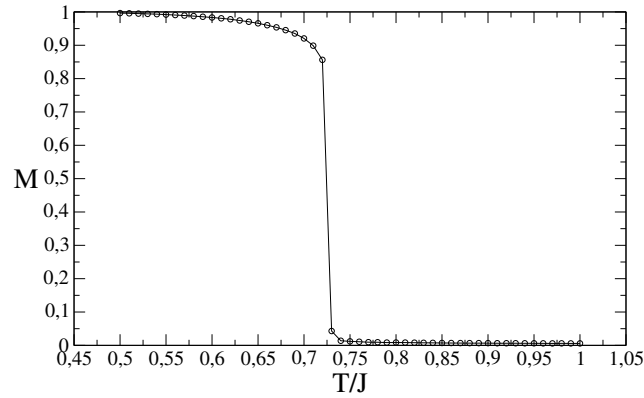


Figura 6.2: Parámetro de orden para una red $N = 150 \times 150$, es casi 0 por encima de T_c y su valor se acerca a 1 al ordenarse el sistema a bajas temperaturas; muestra claramente la transición de fase orden-desorden a una temperatura muy bien definida

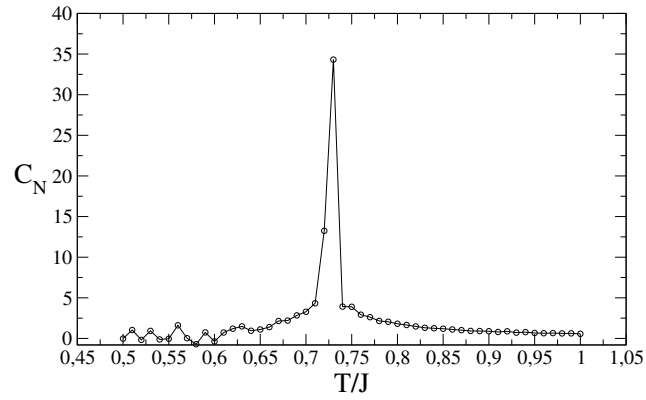


Figura 6.3: Calor específico por espín para una red $N = 150 \times 150$, presenta un marcado pico alrededor de T_c y es casi cero en el resto del rango

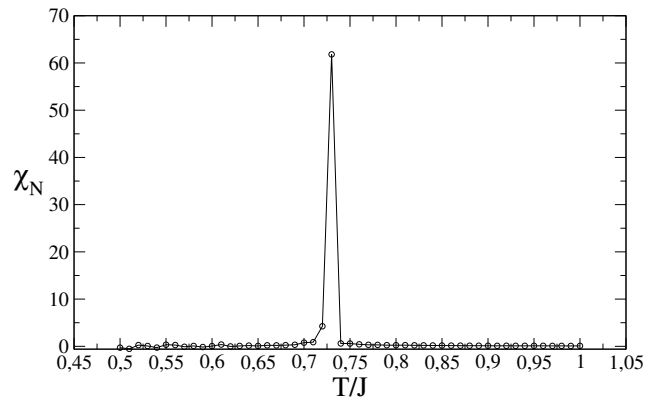


Figura 6.4: Suceptibilidad por espín para una red $N = 150 \times 150$, presenta un marcado pico alrededor de T_c y es casi cero en el resto del rango

Para contrastar nuestros resultados con los teóricos; realizamos algunas corridas utilizando $\Delta T \simeq 0,001$ para tener más precisión en el valor aproximado de T_c (ya que hasta orden 10^{-2} en ΔT no notamos diferencia alguna), y obtuvimos picos marcados en C_N y χ_N a la temperatura $T'_c = (0,725 \pm 0,002)$ siendo el resultado exacto $T_c = 0,721$ hasta ese orden. Esto nos da la pauta de que los tamaños de red y tiempos de promediación que utilizamos, así como la aproximación numérica a la dinámica del sistema nos proveen resultados útiles y con validez física.

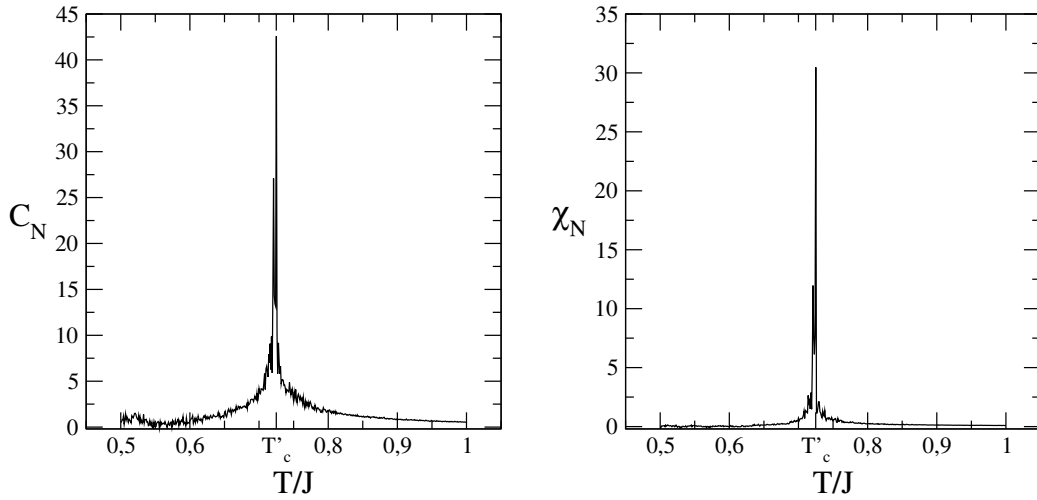


Figura 6.5: Calor específico y susceptibilidad magnética por espín para una red $N = 85 \times 85$. Presentan un pico marcado a $T'_c = 0,725$.

Talvez un dato importante para apuntar en cuanto a las simulaciones es el echo de que para obtener curvas “suaves” es necesario aumentar el tiempo de termalización y de promediación en las inmediaciones de T_c ya que las fluctuaciones se incrementan y los errores estadísticos también. También fue necesario promediar mucho a muy bajas temperaturas; ya que el factor T^2 en el denominador de (4.2) y de (4.3) tiende a incrementar el valor de C_N y χ_N y es necesaria mucha estadística para mostrar que efectivamente $[\langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2]$ va a cero “más rápido” que¹ T^2 . Esta dificultad que se presenta es uno de los

¹Esta también es una razón por la cual no medimos para temperaturas muy bajas estas

llamados *efectos de tamaño finito*.

Ésta etapa del trabajo sirve para optimizar los algoritmos, elegir las escalas de temperatura dónde vamos a trabajar y reconocer el problema computacional y los tiempos que demandan las simulaciones.

6.2. Ciclos de histéresis

Queremos ahora observar el comportamiento del sistema en procesos cuasiestáticos. Esto es, procesos de enfriamiento y calentamiento suficientemente lentos, de manera que en cada paso de tiempo la desviación del estado de equilibrio (o cuasi-equilibrio) sea pequeña.

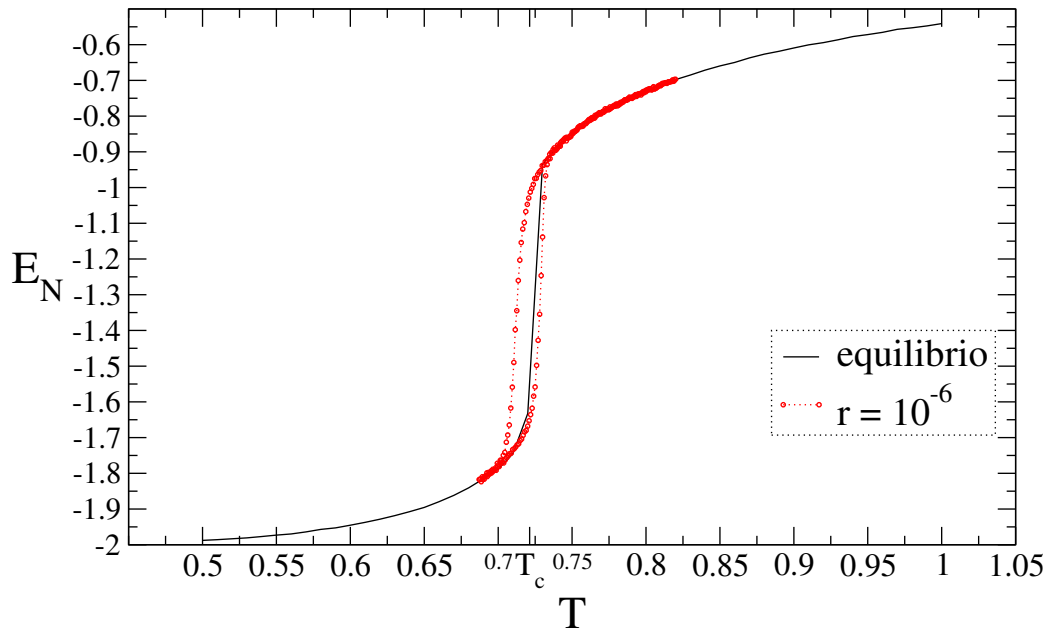


Figura 6.6: Ciclo de histéresis alrededor de T_c para una red $N = 60 \times 60$ y una tasa de enfriamiento y calentamiento $r = 10^{-6}$

Como primer paso queremos alejarnos sólo un poco de la curva de equilibrio para lo cual realizamos el siguiente procedimiento: Comenzando con cantidades, partimos de $T_{min} = 0,5$

un estado completamente desordenado dejamos al sistema termalizar a una temperatura $\tilde{T}_{max}$ mayor a T_c . Seguidamente realizamos un enfriamiento o “cooling” con una tasa r (1/MCS), cambiando la temperatura de acuerdo a $T(t) = \tilde{T}_{max} - rt$ a cada paso de Monte Carlo o “tiempo” discreto t . Al llegar a una cierta temperatura $\tilde{T}_{min}$, por debajo de T_c dejamos de enfriar y comenzamos a calentar partiendo desde la última configuración obtenida, hasta volver a $\tilde{T}_{max}$. Si en el proceso medimos E_N vs. T obtenemos ciclos de histéresis, propios de transiciones de fase de 1^{er} orden.

Obtuvimos ciclos de histéresis para distintos tamaños de red (entre $N = 40 \times 40$ y $N = 150 \times 150$) y distintas tasas ($r = 10^{-2} - 10^{-6}$).

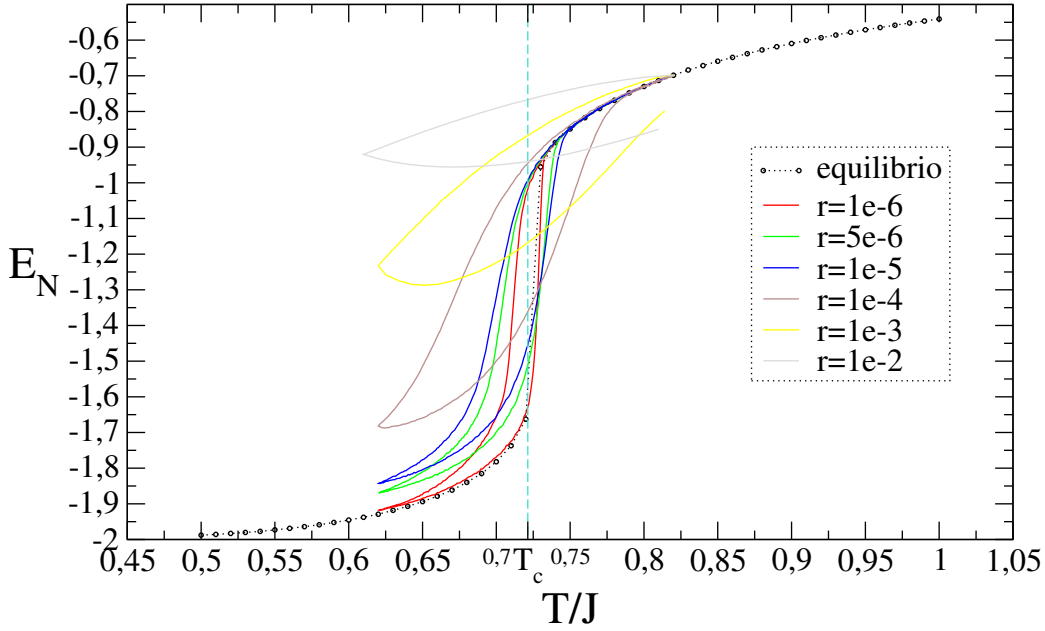


Figura 6.7: Ciclos de histéresis para una red $N = 150 \times 150$ y distintas tasas. Notar cómo nos acercamos a la curva de equilibrio (curva obtenida con el método de la sección anterior) a medida que “enlentecemos” el proceso.

Como es de esperar, un enfriamiento lento (r muy pequeño) se aproxima más a la curva de equilibrio que un enfriamiento rápido. En particular, en el

límite $r \rightarrow 0$ (enfriamiento cuasiestático) deberíamos recuperar el comportamiento del sistema en el equilibrio.

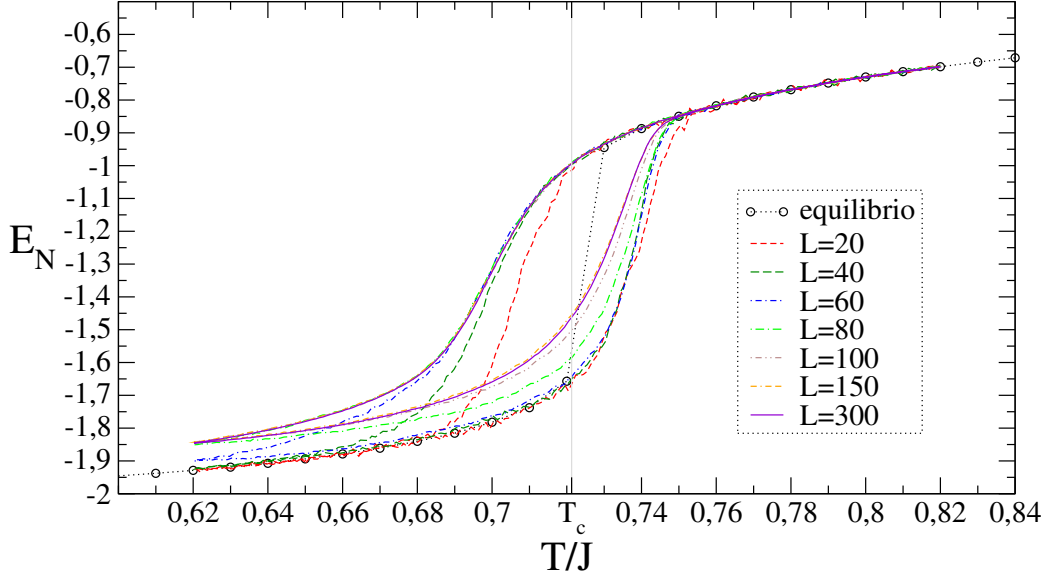


Figura 6.8: Ciclos de histéresis para distintos tamaños de red y una tasa $r = 10^{-5}$. Para los dos tamaños más grandes las curvas son casi idénticas.

Notamos que al aumentar el tamaño del sistema se necesita enfriar a tasas más pequeñas para llegar a recuperar el estado de equilibrio por debajo de la temperatura de transición. Para una tasa fija, el área del ciclo de histéresis decrece con el tamaño del sistema, pero parece saturar para tamaños grandes, sugiriendo que la histéresis sobrevive en el límite termodinámico.

Debemos ser cuidadosos con ésta interpretación, en verdad éstas áreas no son del todo comparables ya que, para la tasa utilizada, sólo los tamaños pequeños alcanzan nuevamente el estado de equilibrio después del enfriamiento y forman un verdadero ciclo de histéresis alrededor de la curva de equilibrio; a medida que aumentamos el tamaño del sistema las curvas se apartan más y más de la situación de equilibrio, y al calentar volvemos por un camino que depende del punto en que hayamos dejado de enfriar. Obtener verdaderos ciclos de histéresis para sistemas de tamaños grandes demanda el uso de

tasas muy pequeñas ($< 10^{-6}$) y el problema se torna sutil, ya que al realizar un enfriamiento tan lento podríamos permitir que el sistema (al menos en algunas realizaciones) nucleé, es decir, que caiga a su estado estable cuando atravezemos la temperatura crítica. Una manera posible de indagar la existencia de histéresis en el límite termodinámico puede ser: enfriar a partir de un estado de equilibrio a temperaturas altas con una cierta tasa r hasta una temperatura $T^<$ arbitraria pero cercana a T_c ; por otro lado, calentar a partir de un estado ordenado de equilibrio, a bajas temperaturas hasta cierta temperatura $T^>$ mayor a T_c e igualmente distante a ésta que $T^<$; repetir el procedimiento para distintos tamaños de red utilizando la misma tasa r y conservando los mismos valores de $T^<$ y $T^>$; luego podemos comparar las áreas comprendidas entre las curvas de enfriamiento y calentamiento y las rectas a $T^<$ y $T^>$ fijas, en función del tamaño de red y extrapolar al límite termodinámico para analizar si esa extrapolación resulta en un valor distinto de cero (lo que indicaría la supervivencia de la histéresis en el límite termodinámico) o no.

En la fig. 6.8 podemos observar que cuando enfriamos, las curvas son indistinguibles hasta cierta temperatura $T^* < T_c$; podemos decir que tenemos un estado metaestable con energía bien definida para cada temperatura entre T^* y T_c . Lo mismo ocurre cuando calentamos.

Hemos obtenido ciclos de histéresis para la energía por espín en función de la temperatura para tamaños no existentes hasta ahora en la literatura, estudiamos su dependencia con la tasa de enfriamiento y calentamiento y planteamos la problemática que se presenta al estudiar la variación del área de histéresis con el tamaño del sistema.

Para el parámetro de orden se obtienen ciclos de histéresis similares. Presentamos como ejemplo resultados obtenidos para una red $N = 40 \times 40$, pero para el Modelo de Potts con $q = 7$ ¹.

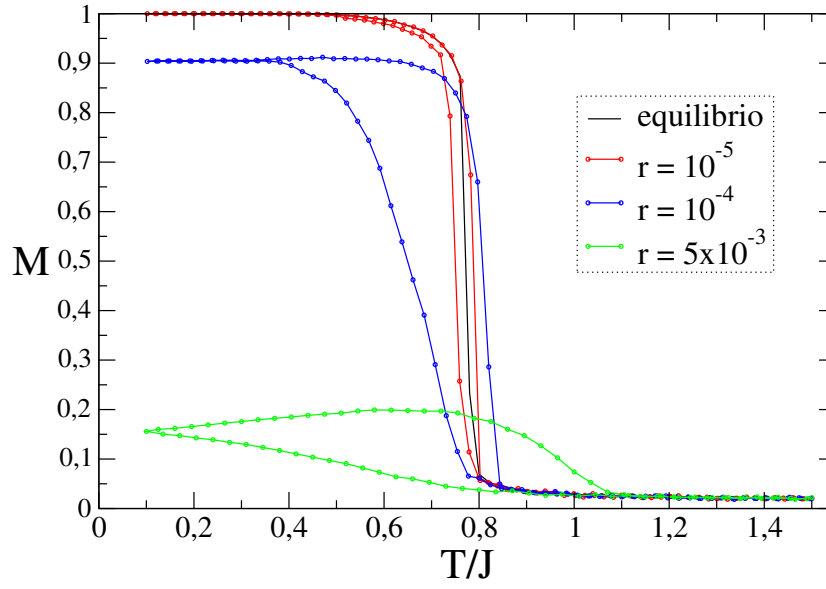


Figura 6.9: Curvas de enfriamiento y ciclos de histéresis para distintas tasas y un tamaño de red $N = 40 \times 40$, correspondientes al Modelo de Potts con $q = 7$.

¹A pesar de que en este trabajo presentamos principalmente los resultados obtenidos para el modelo con $q = 9$, hemos obtenido varios resultados para distintos valores de q

Capítulo 7

Relajación

7.1. Sobre-enfriamiento y metaestabilidad

En esta sección estudiamos el proceso por el cual el sistema, colocado en un estado sobre-enfriado o de no-equilibrio, relaja a su estado estable. Para ello, llevamos al sistema a un estado sobre-enfriado realizando un cooling con tasa r a partir de una temperatura T_{max} hasta cierta temperatura T_o , por debajo de la temperatura crítica. Partiendo de la última configuración dejamos al sistema “evolucionar” a temperatura fija T_o , registrando E_N y M en función del tiempo (medido en MCS).

Con el objeto de verificar la existencia de estados metaestables, elegimos temperaturas T_o cercanas a T_c , pues queremos asegurarnos de estar “dentro” de la región de metaestabilidad, región que de alguna manera viene dada por el ancho del ciclo de histéresis.

Realizamos numerosas mediciones para distintas temperaturas por debajo de $T_c = 0,7213$ (principalmente $T_o = 0,717, 0,719, 0,72$), tasas entre 10^{-6} y 10^{-2} y tamaños de red entre 30×30 y 300×300 , obteniendo datos tanto de realizaciones individuales como de promedios sobre muchas realizaciones. Vamos a restringirnos al estudio de E_N en función del tiempo; resultados similares se obtienen analizando las curvas de $M(t)$.¹

Se observa que el sistema, a partir del estado sobre-enfriado donde fue dejado a temperatura T_o , relaja rápidamente a un *plateau* o estado metaes-

¹Para optimizar los tiempos de obtención de datos, en algún momento modificamos nuestros algoritmos de manera que sólo calculen $E_N(t)$.

table y tiempo más tarde “cae” abruptamente a su estado de equilibrio para esa temperatura.

En realizaciones independientes se puede apreciar que el sistema, estando en el plateau de metaestabilidad, elige estocásticamente el momento de caída a su estado estable. Ésta transición abrupta sugiere un proceso activado, lo que indicaría un proceso de nucleación de la fase estable: estando el sistema “atrapado” en un mínimo local de energía libre, en algún momento una gota de alguna de las fases estables (de radio mayor al crítico) es formada por fluctuaciones térmicas. Decimos que el proceso se activa, el sistema nuclea, saltando la barrera de energía libre que le impedía relajar al estado de equilibrio o mínimo global.

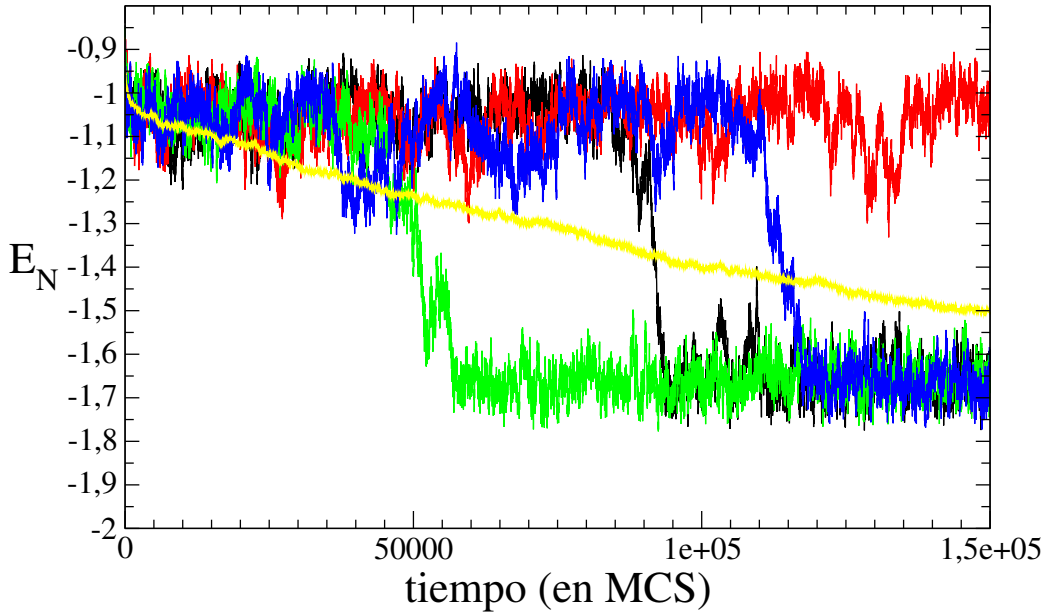


Figura 7.1: Realizaciones independientes y promedio sobre ~ 150 muestras (curva amarilla), de la energía de un sistema $N = 60 \times 60$ después de ser sobre-enfriado con una tasa de enfriamiento $r = 10^{-3}$ hasta una temperatura $T_o = 0,719$.

Notamos que los tiempos en que ocurre la primera relajación son algunos órdenes de magnitud menores a los tiempos estocásticos de la segunda relajación, que lleva al sistema a su estado de equilibrio. Esto nos motiva a

tomar una escala logarítmica en el eje del tiempo y guardar puntos de E_N en tiempos logarítmicamente espaciados, ahorrando también tamaño de almacenamiento de datos.

Presentamos algunos de los resultados obtenidos, donde comparamos el comportamiento del sistema para distintos tamaños, distintas temperaturas T_o , y distintas tasas de cooling r , dejando fijas en cada caso las otras dos variables.

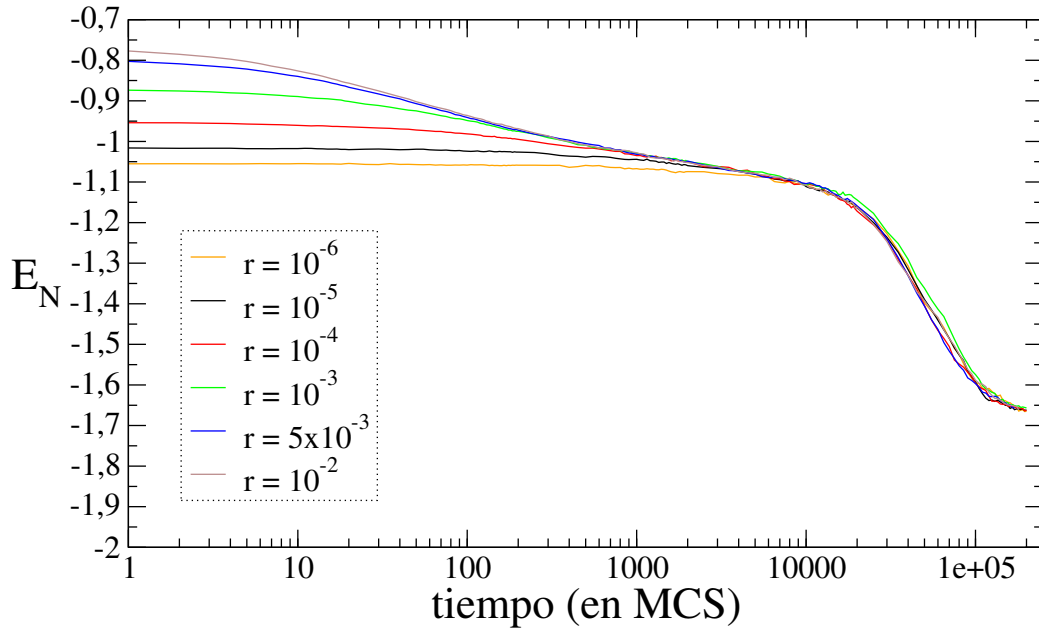


Figura 7.2: Comportamiento de E_N con el tiempo, para un sistema de tamaño $N = 100 \times 100$ después de ser sobre-enfriado hasta una temperatura $T_o = 0,719$ con distintas tasas de enfriamiento; las curvas son el resultado de promediar sobre ~ 150 realizaciones independientes.

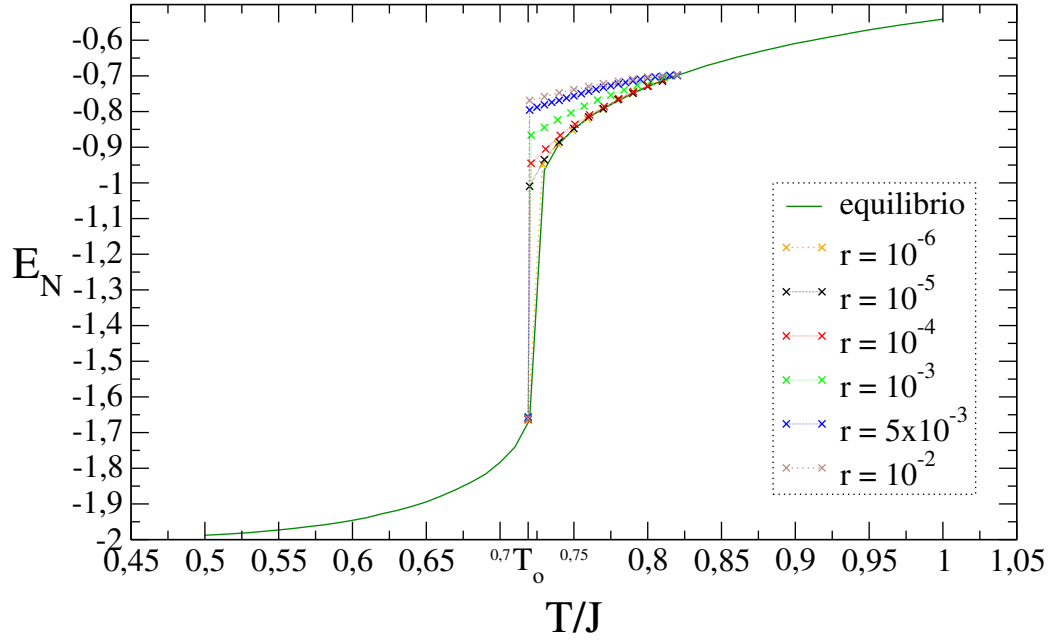


Figura 7.3: Muestra de lo que ocurre con E_N en función de la temperatura en el proceso de relajación de la figura anterior. A partir de un estado de equilibrio enfriamos con tasa r hasta T_o y después de esperar cierto tiempo el sistema cae a su estado de equilibrio para esa temperatura.

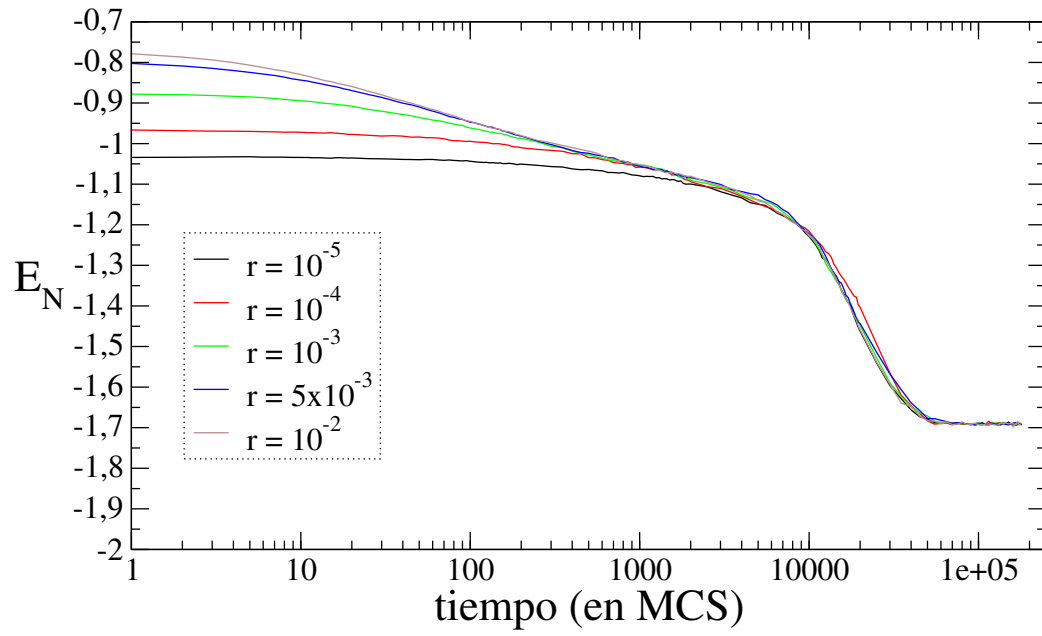


Figura 7.4: Idem (Fig. 7.2) pero para una red $N = 80 \times 80$ y $T_o = 0,717$.

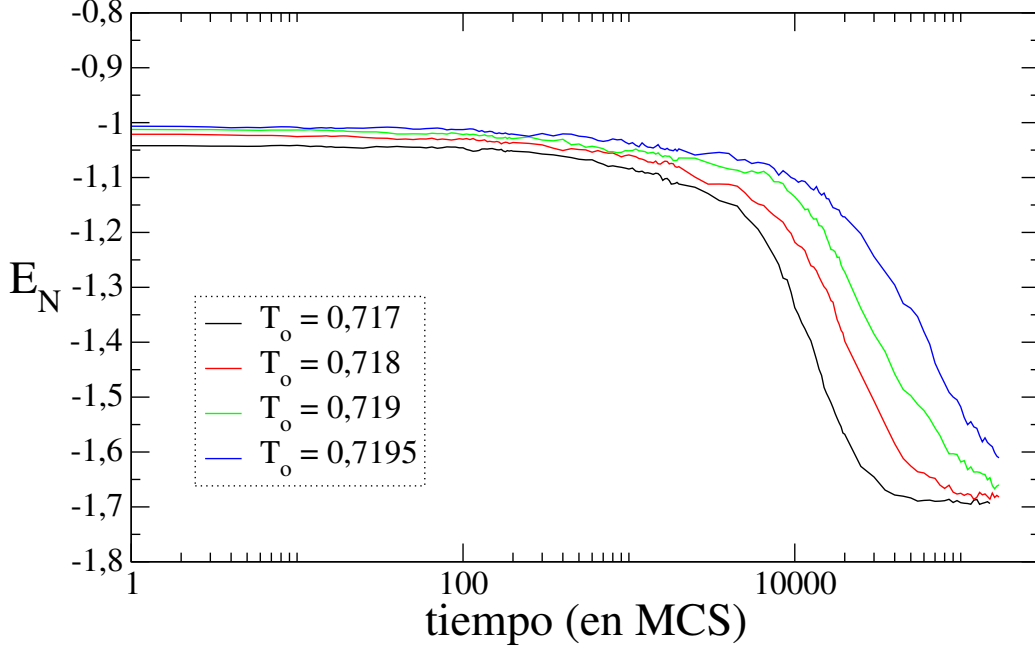


Figura 7.5: Dependencia con la temperatura T_o a la cual dejamos al sistema relajarse libremente, para una red 60×60 después de un cooling con $r = 10^{-5}$. Notamos que a medida que nos acercamos a T_c la permanencia en el estado metaestable aumenta.

Ya que necesitamos promediar sobre varias realizaciones, en general ~ 150 , las simulaciones son interrumpidas arbitrariamente para cierto tiempo t_{corte} . Es por eso que algunas curvas no “alcanzan” el estado de equilibrio.

Notamos que el valor del plateau para una dada T_o no depende de la tasa a la que hayamos enfriado. Por otro lado, la energía del estado metaestable depende de la temperatura a la que estamos estudiando la relajación. El valor del plateau coincide con el valor al cual converge la energía del ciclo de histéresis, a la misma temperatura, cuando r es suficientemente pequeña y $L \rightarrow \infty$. Todo esto es evidencia de la existencia de estados metaestables.

Principalmente estamos interesados en estudiar el comportamiento del proceso de relajación con el tamaño del sistema. Ya que sospechamos que la relajación al estado de equilibrio, al menos para temperaturas cercanas a

T_c , ocurre através de un proceso de nucleación, en el sentido expresado en la TCN, dónde el escaleo del tiempo de relajación con el tamaño del sistema es conocido, y de acuerdo a lo apuntado en el capítulo 2.

Se puede observar que aumentando el tamaño del sistema el tiempo de permanencia en el estado metaestable crece (fig. 7.6), y parece saturar para tamaños grandes. Sin embargo, se observa una anomalía en el comportamiento de las curvas para $L = 200$ y $L = 300$. Ésta anomalía puede deberse a una estadística insuficiente (45 – 55 muestras), aunque, como veremos en la sección 7.3, quizá acusan la presencia de otro fenómeno involucrado en la relajación.

Como veremos en la sección 7.2, si realizamos un enfriamiento brusco ($r \rightarrow \infty$) desde un estado completamente desordenado hasta una temperatura T_o obtenemos, para cada T_o , el mismo valor para la energía del estado metaestable y para el tiempo característico de relajación hacia el estado de equilibrio, que se tienen haciendo un cooling desde un estado ordenado con distintas tasas lentas (Fig. 7.7). Notamos que ¹ el tiempo característico de la rápida relajación hacia el estado metaestable τ^{eq} es casi independiente de r y del orden de 500 – 1000 MCS (donde las curvas generadas con distintas tasas de enfriamiento dejan de distinguirse), mientras que el tiempo de la segunda relajación (que culmina en el estado de equilibrio) o tiempo de vida del estado metaestable² τ^{ms} es del orden de 50000 MCS. De manera que $\tau^{ms} \sim 10^2 \tau^{eq}$, cumpliendo la condición para la existencia de metaestabilidad propuesta por Binder en [37] y que presentamos en la sección 2.2.

¹Basados en los resultados para $L = 100$

²El nombre, adoptado en [37], puede ser confuso, ya que nos estamos refiriendo al tiempo total que tarda el sistema en alcanzar el equilibrio, sin embargo como el tiempo de relajación hacia el estado metaestable es muy pequeño es equivalente hablar de tiempo total de relajación o “tiempo de vida” del estado metaestable.

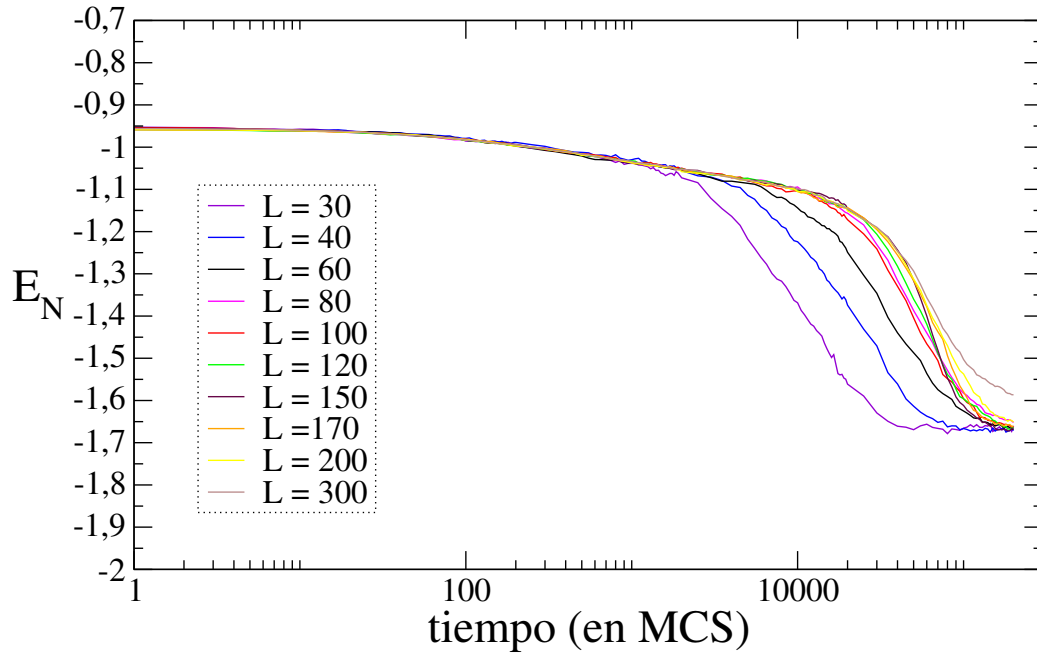


Figura 7.6: Relajación del sistema (sobre-enfriado a una tasa $r = 10^{-4}$ hasta $T_o = 0,719$) al estado de equilibrio; representada por el comportamiento de E_N en función del tiempo, para distintos tamaños de red.

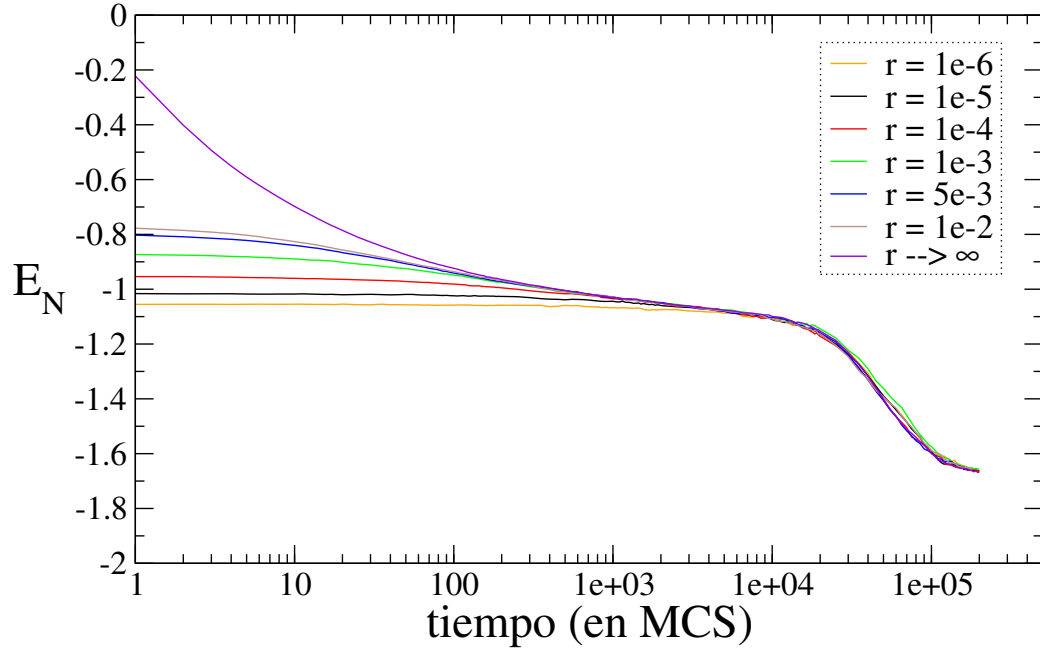


Figura 7.7: Comportamiento de E_N con el tiempo, para un sistema de tamaño $N = 100 \times 100$ después de ser sobre-enfriado hasta una temperatura $T_o = 0,719$: con tasas lentas a partir de un estado de equilibrio a temperaturas bajas y bruscamente a partir de un estado completamente desordenado a temperaturas infinitas

Asumiendo entonces la existencia de metaestabilidad y que el mecanismo dominante de relajación es la nucleación de la fase estable, proponemos un modelo simple para describir las curvas de relajación.

Modelo de dos estados

Pensamos en un proceso activado que comienza en un cierto estado metaestable y sufre una transición hacia otro estado, estable, en un tiempo estocástico τ cuya distribución de probabilidad es $P(\tau)$. Queremos estimar el valor medio $\langle O \rangle(t)$ de una cantidad física $O(t)$ durante este proceso, donde el promedio es tomado sobre las fluctuaciones térmicas. Suponemos que $O(t)$ presenta sólo pequeñas fluctuaciones alrededor de dos valores O_1 y O_2 , cada uno correspondiente a los diferentes estados permitidos. Podemos formular el siguiente modelo simple de dos estados: permitámonos aproximar $O(t)$ como una variable que puede tomar sólo dos valores O_1 y O_2 de la siguiente manera (ver Fig. 7.8):

$$\begin{aligned} O(t, \tau) &= O_1 \Theta(\tau - t) + O_2 \Theta(t - \tau) \\ &= O_1 - (O_1 - O_2) \Theta(t - \tau) \end{aligned} \quad (7.1)$$

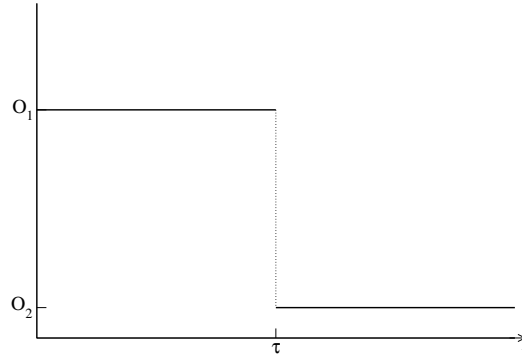


Figura 7.8: Esquema de variación de la variable aleatoria $O(t, \tau)$

Siendo τ estocástico, $O(t, \tau)$ también es una variable estocástica, cuyo promedio viene dado por

$$\begin{aligned} \langle O \rangle(t) &= \int_0^\infty d\tau P(\tau) O(t, \tau) \\ &= O_1 - (O_1 - O_2) \int_0^t d\tau P(\tau) \end{aligned} \quad (7.2)$$

El tiempo aleatorio de relajación τ puede medirse directamente mediante el siguiente protocolo: Llevamos al sistema a su estado sobre-enfriado mediante un cooling y lo dejamos relajar contando el tiempo en pasos de Monte Carlo hasta que la energía cae por debajo de cierto umbral $E_0 + \delta E$, donde $E_0(T)$ es el valor de equilibrio de la energía por espín y δE la fluctuación térmica estándar; almacenando estos tiempos para muchas realizaciones independientes realizamos un histograma de tiempos de relajación τ . Esto nos da una cierta distribución característica de τ y ajustando su perfil con alguna función distribución conocida podemos calcular su valor medio.

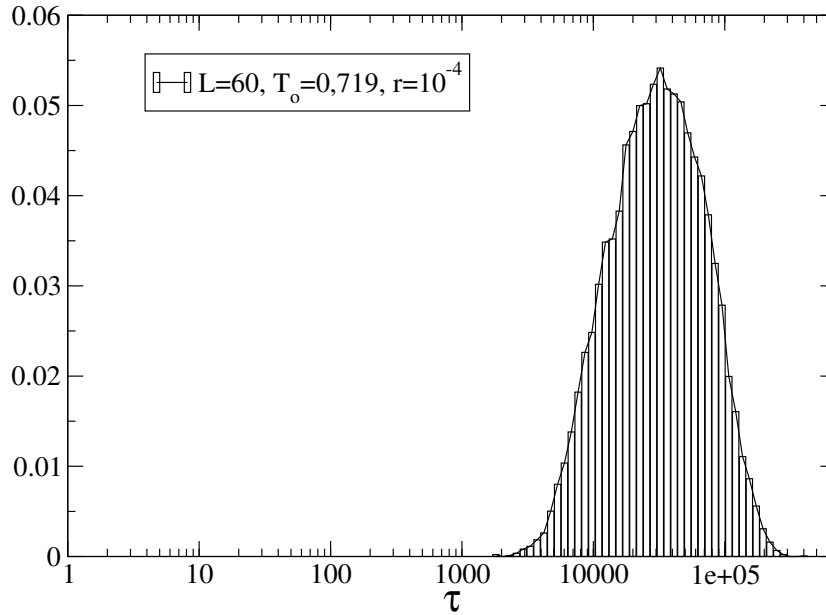


Figura 7.9: Histograma de tiempos de relajación para un sistema 60×60 sobre-enfriado a una tasa $r = 10^{-4}$ hasta $T_o = 0,719$; sobre 19485 realizaciones individuales distribuidas en 45 intervalos.

Repetimos entonces el procedimiento para muchas muestras (~ 5000 en la mayoría de los casos) en algunos tamaños de red y temperaturas. Notamos que el comportamiento típico de $P(\tau)$ puede ajustarse muy bien mediante una distribución log-normal, tal como se aprecia en la figura (Fig. 7.9).

De esta manera, asumimos de forma general que τ tiene una distribución log-normal normalizada.

$$P(\tau) = \frac{1}{\tau\sigma\sqrt{2\pi}} \exp \left[-\frac{(\ln \tau - \mu)^2}{2\sigma^2} \right], \quad \tau > 0 \quad (7.3)$$

de manera que

$$\langle \tau \rangle = \exp \left(\mu + \sigma^2/2 \right) \quad (7.4)$$

luego (7.2) resulta

$$\begin{aligned} \langle O \rangle(t) &= O_1 - (O_1 - O_2) \int_0^t d\tau \frac{1}{\tau\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(\ln \tau - \mu)^2}{2\sigma^2}} \\ &= O_1 - (O_1 - O_2) \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\frac{\ln t - \mu}{\sqrt{2}\sigma}} dx e^{-x^2}, \quad x = \frac{\ln \tau - \mu}{\sqrt{2}\sigma} \\ &= O_1 - (O_1 - O_2) \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{\frac{\mu - \ln t}{\sqrt{2}\sigma}}^{\infty} dy e^{-y^2}, \quad y = -x \\ &= O_1 - \frac{(O_1 - O_2)}{2} f_{cer} \left(\frac{\mu - \ln t}{\sqrt{2}\sigma} \right) \end{aligned} \quad (7.5)$$

donde $f_{cer}(x)$ es la función error complementaria.

O_1 toma el valor de la energía en el plateau y O_2 el valor de la energía en el estado de equilibrio. Para comparar las distintas curvas definimos la función de relajación no-lineal de la energía como [9]:

$$\phi_E(t) = \frac{E_N(t) - E_N(\infty)}{E_N(0) - E_N(\infty)} \quad (7.6)$$

donde $E_N(\infty) \equiv \langle E_N \rangle$ es la energía de equilibrio. De acuerdo a (7.5) tenemos:

$$\langle \phi_E \rangle(t) = \phi_{E_1} - \frac{(\phi_{E_1} - \phi_{E_2})}{2} f_{cer} \left(\frac{\mu - \ln t}{\sqrt{2}\sigma} \right) \quad (7.7)$$

Luego ϕ_{E_1} es el valor de la energía normalizada del plateau y ¹ $\phi_{E_2} = 0$ es el valor de la energía normalizada en el estado de equilibrio. Dejamos libres

¹de acuerdo a (7.6)

los parámetros μ y σ que tienen que ver con la posición y la inclinación de la “caída” de un estado al otro, y nos dan el valor de $\langle\tau\rangle$. Como el plateau de metaestabilidad no está bien definido, en el sentido que no está claro para cada curva (cada tamaño de red) en qué momento comienza y cuán horizontal es, tomamos un rango razonable de valores para ϕ_{E_1} fijándolo en cada ajuste y obteniendo así una medida para el error de nuestros resultados. Realizamos el ajuste para curvas correspondientes a distintos tamaños de red y $T_o = 0,719$, ya que nos interesa estudiar el escaleo de $\langle\tau\rangle$ con el tamaño del sistema para temperaturas cercanas a la transición.

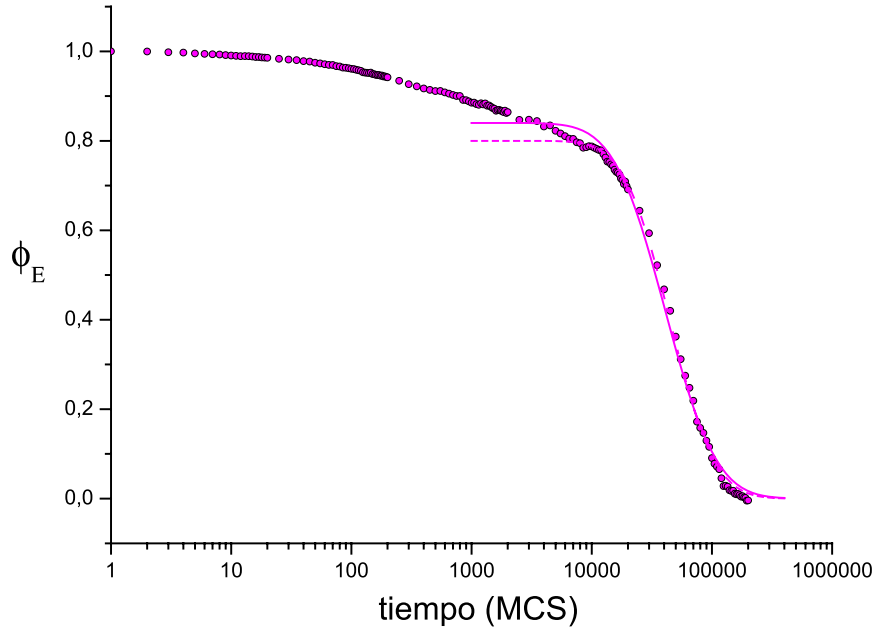


Figura 7.10: Ajuste de acuerdo a (7.7) de $\phi_E(t)$ para un tamaño de red $N = 100 \times 100$ después de un cooling con tasa $r = 10^{-4}$ hasta $T_o = 0,719$. En este caso el ajuste es sobre los datos a partir de $t = 6000$, y estimamos un error definiendo distintos valores para el plateau, como los dos mostrados en la figura (línea sólida y línea punteada).

Podemos decir que, al menos para tamaños hasta $L = 150$ el modelo de dos estados ajusta bien a los datos de la relajación obtenidos en las simulaciones (7.10). Esto nos permite estimar $\langle\tau\rangle$ para diferentes temperaturas y diferentes tamaños del sistema, directamente de las curvas de relajación, sin necesidad de una medición directa de $P(\tau)$, que resulta computacionalmente mucho más costosa.

Escalado del tiempo de relajación con el tamaño del sistema

Recordemos el Capítulo 2 dónde introducimos las predicciones de la TCN, para $d = 2$ tenemos:

$$\tau(L) \propto L^{-2} \exp(\beta \mathcal{F}(R_c))$$

Para tamaños suficientemente grandes tales que $R_c < L$. Para tamaños menores $L \lesssim R_c$, podemos asumir un proceso activado, donde

$$\tau(L) \propto g(L) \exp(\beta \Delta(L)) \quad (7.8)$$

la barrera de energía libre en este caso corresponde a la formación de un dominio de la fase estable cuyo tamaño es del orden de L . Dado que en este régimen el incremento de energía libre asociado está dominado por la tensión superficial, tendremos que $\Delta \propto L$. Despreciando entonces cualquier corrección proveniente del prefactor $g(L)$ tenemos que $\ln \tau \propto \beta L$. Estrictamente para $T = T_c$ sabemos [52] que la barrera de energía libre escala como $\Delta(L) \propto L$ independientemente de del tamaño del sistema. Finalmente, para tamaños mucho mayores entramos en el régimen de coalecencia y se espera que $\ln \tau$ sea independiente de L . Resumiendo:

$$T \ln(\tau) \sim \begin{cases} L & \text{Para } T = T_c \\ L & \text{para } T < T_c \text{ y } L \lesssim R_c \\ \mathcal{F}(R_c) - 2T \ln(L) & \text{para } T < T_c \text{ y } L > R_c \\ cte & \text{para } T < T_c \text{ y } L \gg R_c \end{cases}$$

Realizamos el ajuste para la relajación después de un cooling con $r = 10^{-4}$ hasta $T_o = 0,719$ para distintos tamaños de red. De los valores ajustados de μ y σ en cada caso, calculamos $\langle \tau \rangle = \exp(\mu + \sigma^2/2)$ y lo ploteamos en función del lado de red L .

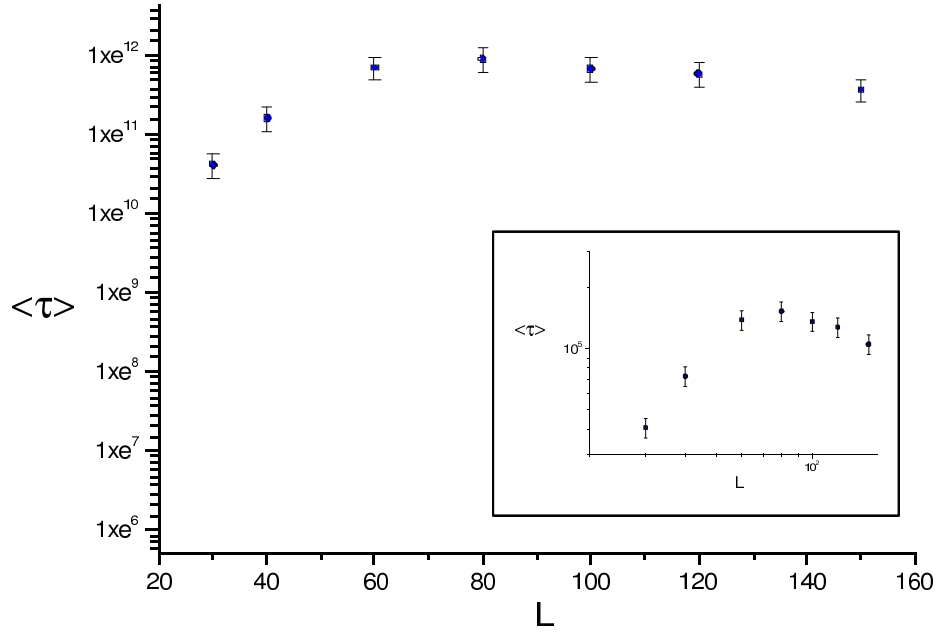


Figura 7.11: Valor medio del tiempo de nucleación en función de L en escala log-lineal. En el gráfico interior, en escala log-log.

El error en el ajuste, proveniente de la incertidumbre a cerca del valor de energía del plateau, es del orden del 15 %. Notamos que el comportamiento para tamaños chicos es del tipo $\ln(\tau) \sim L$, alrededor de $L = 60$ tenemos un punto de *crossover* o cambio de régimen y el comportamiento posterior aparentemente concuerda con un decaimiento logarítmico ($\ln(\tau) \sim -\ln(L)$) que se aprecia como una recta de pendiente negativa en el gráfico interior de la figura 7.11. En principio, nuestros resultados son consistentes con los postulados por la TCN, al menos para tamaños relativamente chicos. Para tamaños mayores ($L > 150$) la anomalía observada en las curvas de relajación (sec. 7.1) no permite estudiar de manera confiable un tiempo característico de relajación y los ajustes del modelo de dos estados no son satisfactorios. Volveremos a tratar el problema del escaleo de $\langle \tau \rangle$ con L en la sección 7.4.

7.2. Quench desde $T = \infty$

En la figura 7.2 vemos que, para una dada temperatura, tanto la energía del estado metaestable como el tiempo de relajación hacia el estado de equilibrio no dependen de la tasa a la cual llevamos al sistema a su estado sobreenfriado. Decidimos entonces realizar directamente un quench (palabra que en español correspondería a *templado* o *enfriado brusco*) desde un estado inicial arbitrariamente desordenado hasta una temperatura T_o por debajo de la temperatura crítica ($T_c = 0,7213$). Esto nos deslinda de la necesidad de realizar un enfriamiento con una tasa lenta y nos permite ahorrar tiempo de CPU en ese sentido; de manera que podemos realizar mejores promediaciones (más muestras) y explorar lo que ocurre para un rango mayor de temperaturas T_o .

El proceso consiste entonces en definir un estado inicial sorteando al azar los estados de cada uno de los espines de la red (esto equivale a poner al sistema a temperatura infinita)¹, luego fijar la temperatura igual a T_o (equivalente a bajar muy bruscamente la temperatura desde ∞ a T_o) y dejar al sistema evolucionar una cierta cantidad de pasos de Monte Carlo hasta que alcanza su estado de equilibrio. Para estimar ese “tiempo” o cantidad de pasos de MC nos basamos en corridas individuales no acotadas, y una vez definido dicho tiempo, calculamos promedios sobre varias realizaciones. Obtenemos datos para distintos tamaños de red, principalmente $N = 60 \times 60$, $N = 100 \times 100$, $N = 150 \times 150$, $N = 300 \times 300$, y para temperaturas T_o entre 0,5 y 0,72.

Graficamos energía por espín versus tiempo, así como también la función de relajación no-lineal de la energía (7.6), tomada en escala lineal y logarítmica. Las curvas que presentamos corresponden a promedios sobre aprox. 300 muestras para los tamaños $L = 60, 100$, aprox. 100 muestras para $L = 150$ y aprox. 50 muestras para $L = 300$:

¹Como observamos en el Capítulo 4, la energía interna por espín de este estado será $-\frac{2}{9}$

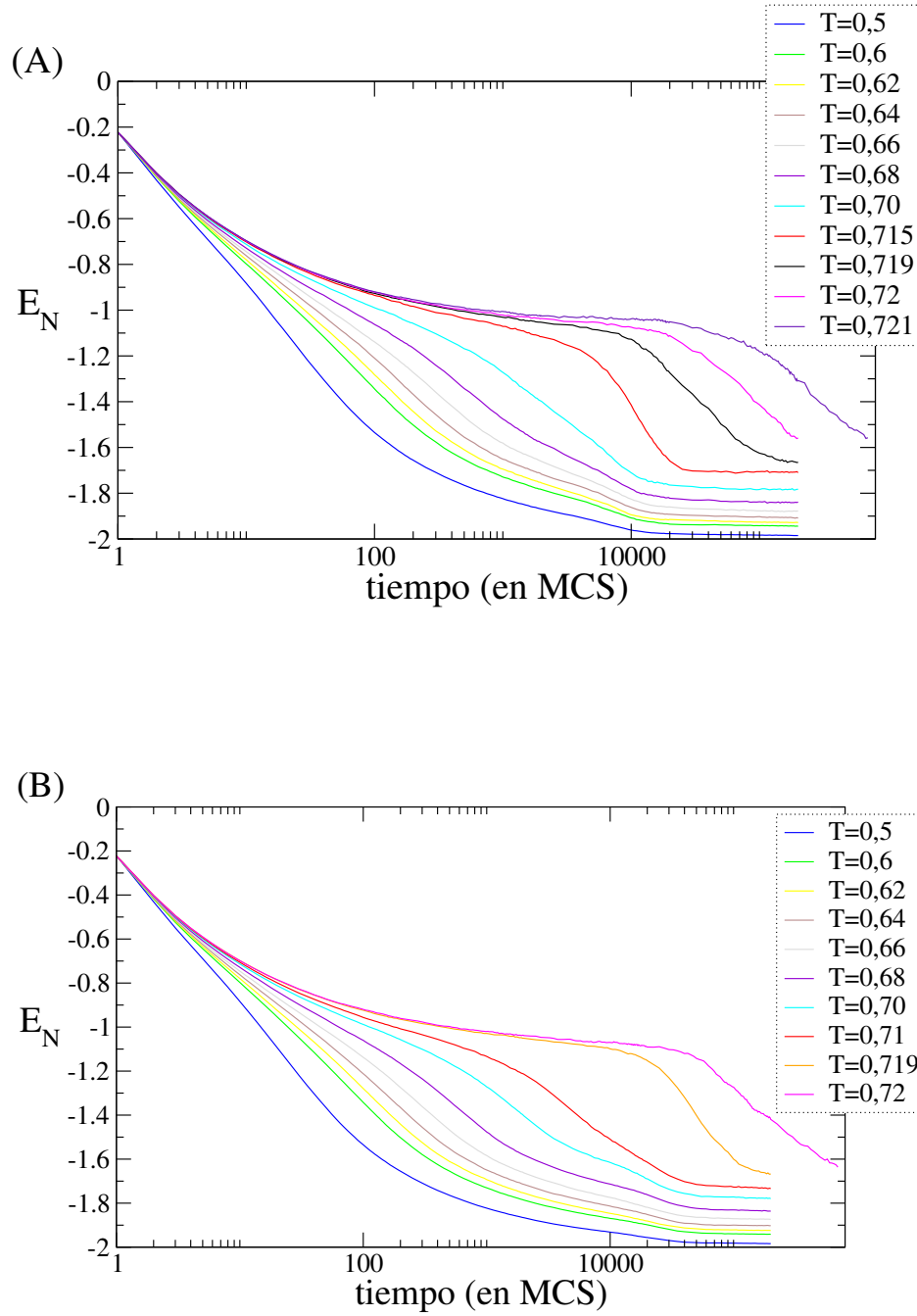


Figura 7.12: Relajación de la energía por espín para redes de lado $L = 60$ (A) y $L = 100$ (B), graficada versus tiempo para distintos valores de T_o después de un quench desde temperatura infinita

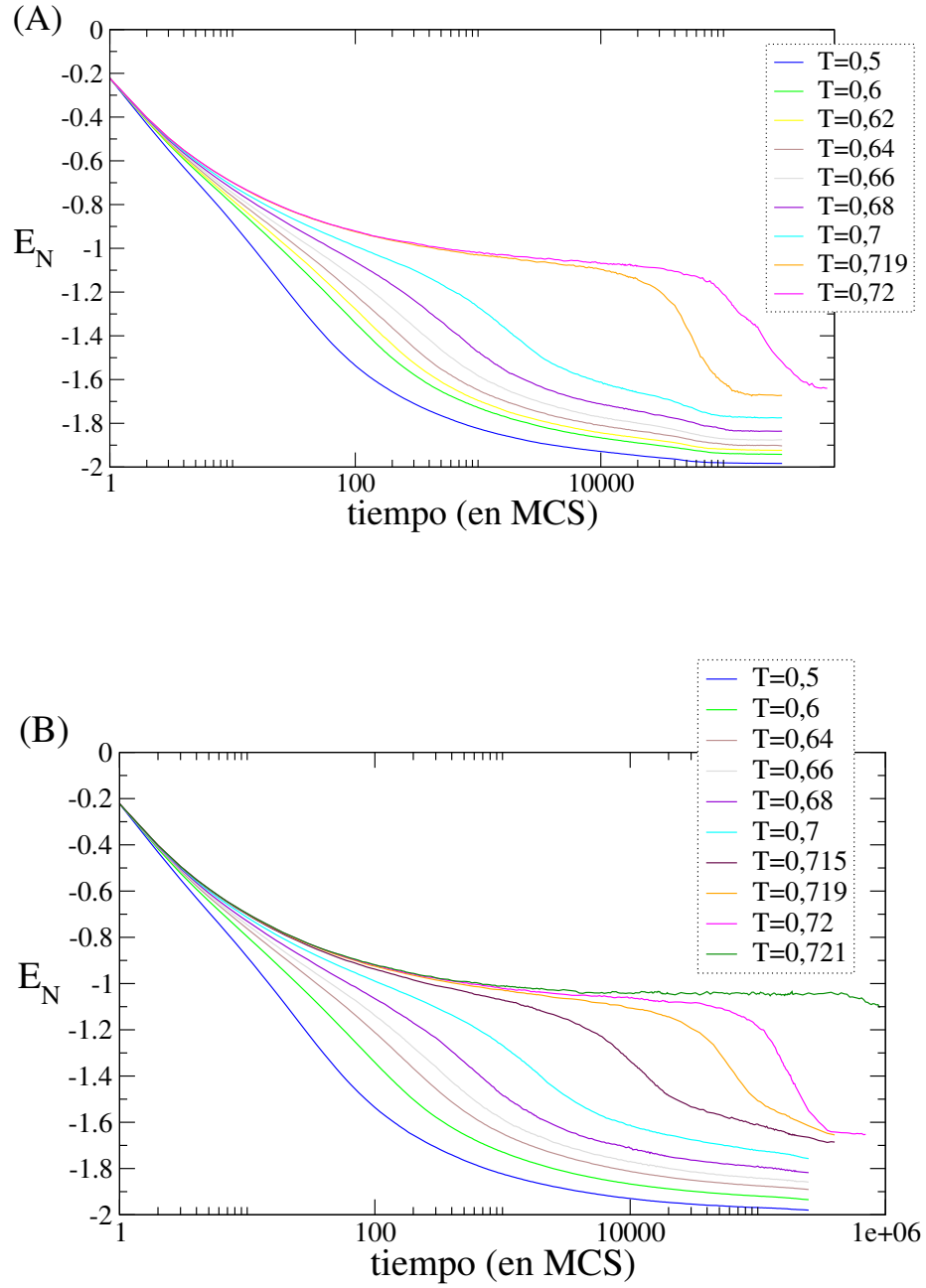


Figura 7.13: Relajación de la energía por espín para redes de lado $L = 150$ (A) y $L = 300$ (B), plotada versus tiempo para distintos valores de T_o después de un quench desde temperatura infinita

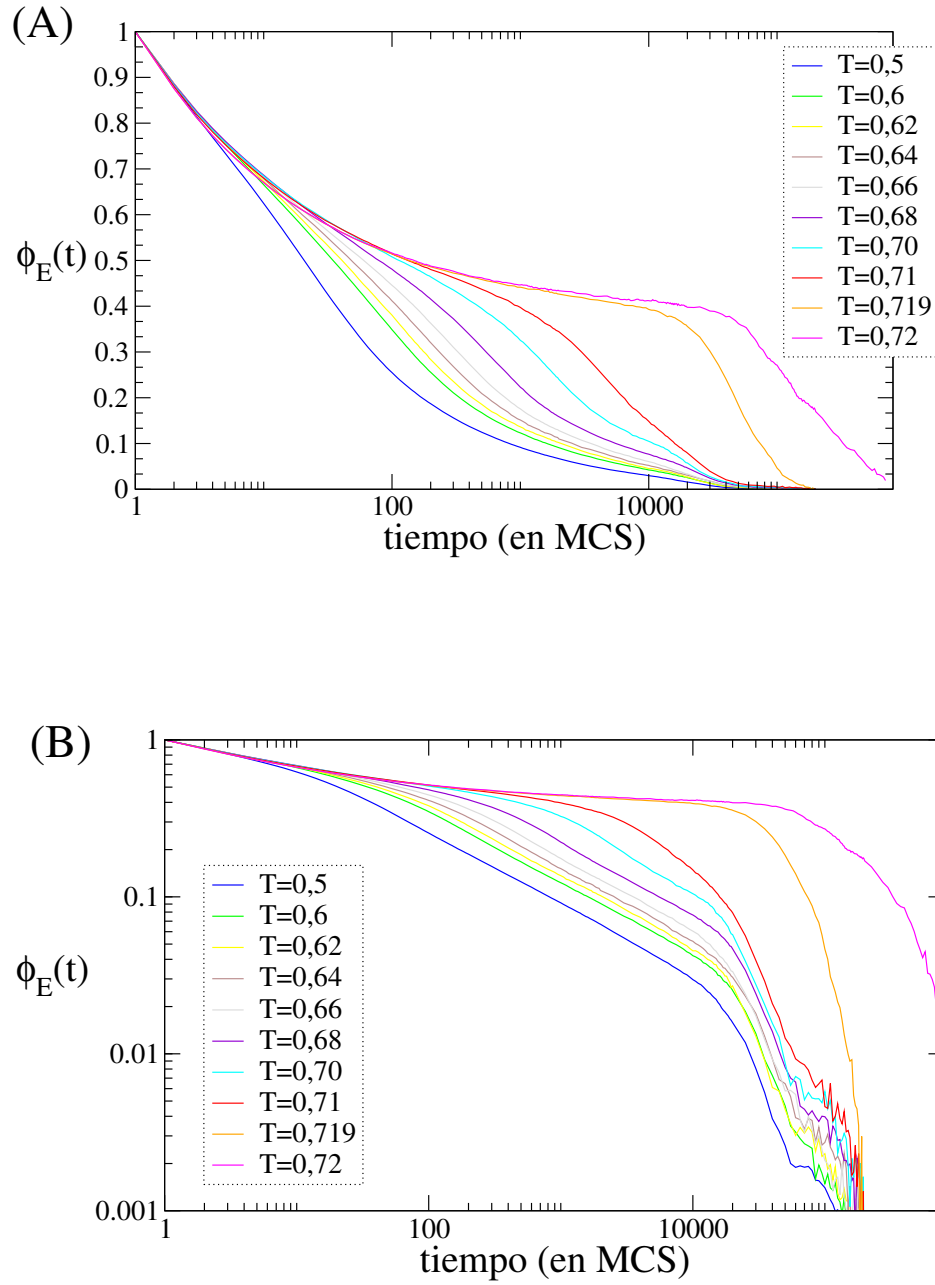


Figura 7.14: Función de relajación no lineal de la energía vs. tiempo para una red de tamaño $N = 100 \times 100$ en escala lineal-logarítmica (A) y doble logarítmica (B); para distintas temperaturas T_o

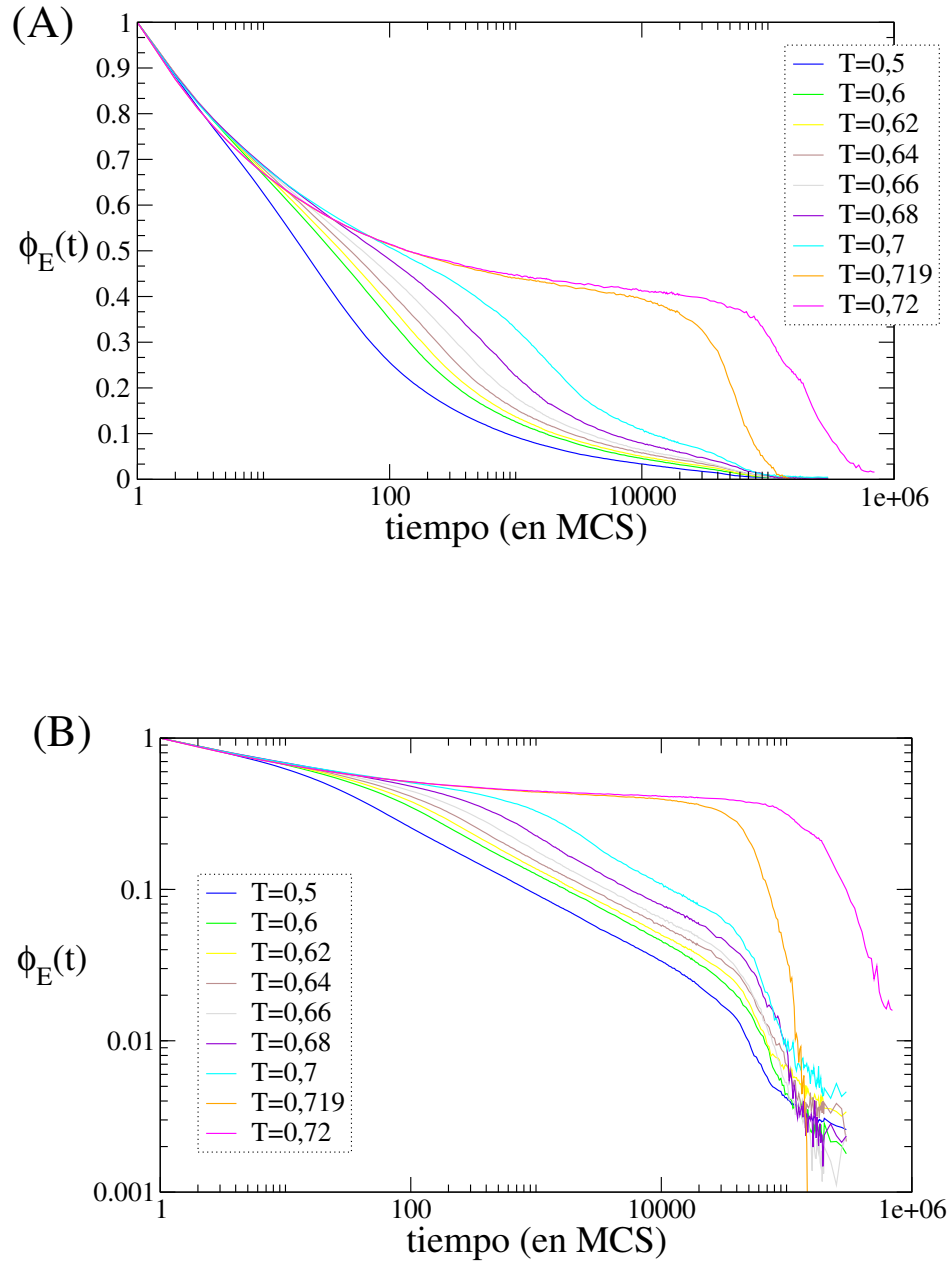


Figura 7.15: Función de relajación no lineal de la energía vs. tiempo para una red de tamaño $N = 150 \times 150$ en escala lineal-logarítmica (A) y doble logarítmica (B); para distintas temperaturas T_o

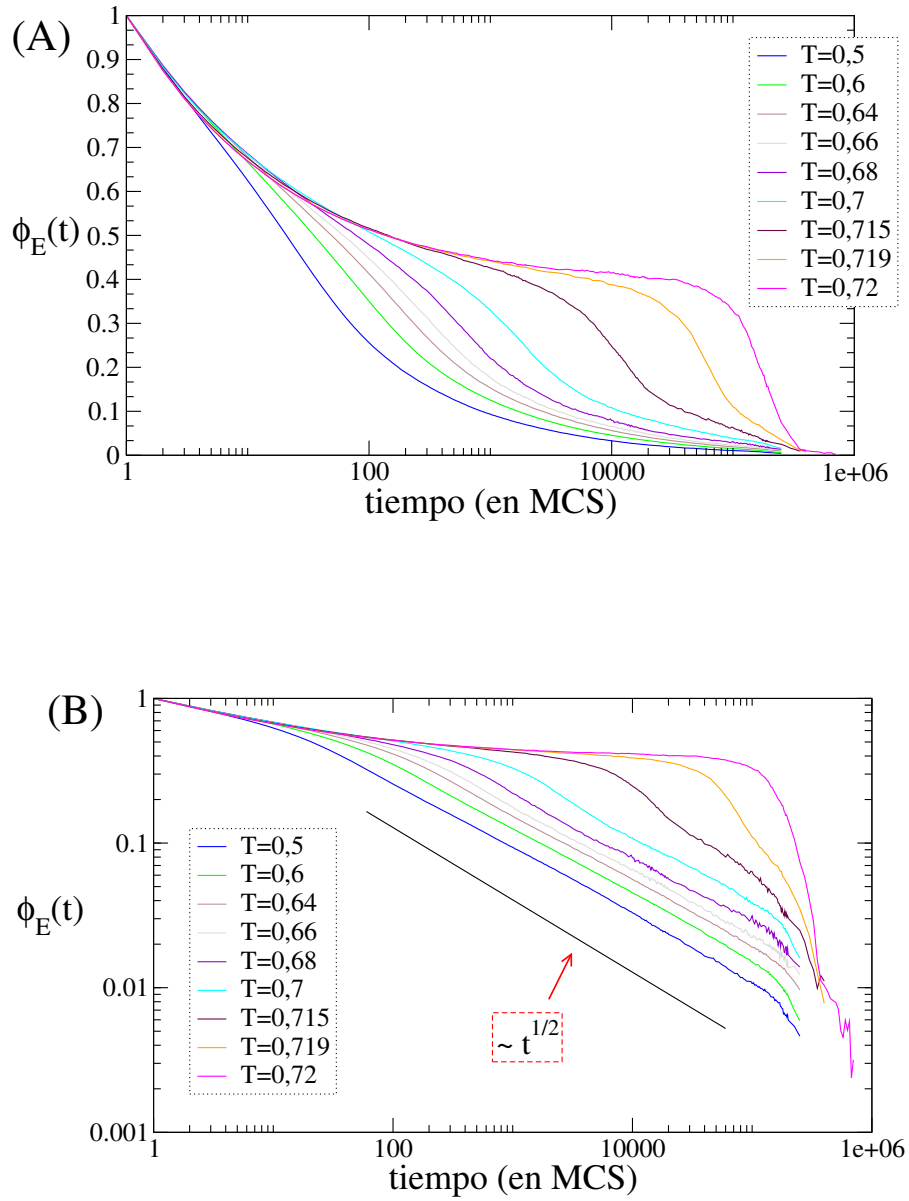


Figura 7.16: Función de relajación no lineal de la energía vs. tiempo para una red de tamaño $N = 300 \times 300$ en escala lineal-logarítmica (A) y doble logarítmica (B); para distintas temperaturas T_o . La línea recta ilustra un comportamiento tipo ley de potencia $\phi_E \propto t^{1/2}$

Podemos notar, quizá más claramente que en la sección anterior, el plateau de metaestabilidad que se presenta para temperaturas cercanas a T_c . Mientras más nos acercamos a T_c más tiempo se mantiene el sistema en el estado metaestable.

Si analizamos las curvas para $T = 0,5$ podemos notar que el plateau desaparece casi por completo y el sistema relaja directamente a su estado de equilibrio con una ley de potencia, hecho que se manifiesta con una recta, al graficar $\phi_E(t)$ en escala doble-logarítmica. Esto es evidencia de coarsening, tal como explicamos a continuación: en el capítulo 2 vimos que (2.7):

$$l(t) \propto t^{1/2}$$

para un proceso de coarsening, donde $l(t)$ es el tamaño típico (lineal) de un dominio al tiempo t (digamos por caso, el valor medio de los diámetros de todas las “gotitas” del sistema). Por otro lado, nuestra energía normalizada o función de relajación es (7.6)

$$\phi_E(t) \propto E_N(t) - E_N(\infty)$$

dónde $E_N(\infty)$ es la energía del estado de equilibrio. Pero cómo cada uno de los dominios corresponde a alguna de las fases estables (i.e. tienen energía mínima), la contribución a ϕ_E sólo viene dada por las paredes de dominio, luego

$$\phi_E(t) \propto \text{perímetro total de las paredes de dominio}$$

Si N_d es el número de dominios y p es el perímetro medio de un dominio

$$\phi_E(t) \propto \frac{pN_d}{2}$$

A cada tiempo t , $p \propto l(t)$, y el número de dominios es proporcional al área total dividida por el área media de un dominio $A_d \propto l^2$

$$N_d = \frac{L^2}{l^2}$$

entonces

$$\phi_E(t) \propto l^{-1} \propto t^{-1/2}$$

y esto es lo que vemos (después de un tiempo transitorio) para la función de relajación después de un quench hasta temperaturas alejadas de T_c (fig. 7.16.B)³.

³El ajuste de $\phi_E(t)$ para $T_o = 0,5$ (en el rango $40 \lesssim t \lesssim 130000$) es $\phi_E(t) \sim t^{-0,46}$

Para temperaturas intermedias las curvas sufren otra inflexión, señalando la presencia de un segundo plateau, de energía más cercana a la de equilibrio. Si bien no queda claro que dicho plateau pertenezca a otro estado metaestable, sí es evidente que ocurre un fenómeno que “frena” el proceso de relajación. Decimos que la dinámica se “traba” y evidentemente la relajación al estado estable no ocurre a través del proceso clásico de nucleación, dónde si bien el tiempo de formación de una gota crítica puede ser grande, una vez formada crece rápidamente hasta ocupar todo el sistema, ni tampoco por medio de un fenómeno de coarsening normal. Éste fenómeno de “retraso” de la relajación se hace presente también en algunos casos para temperaturas muy cercanas a T_c : en las figuras 7.12 se puede observar cómo disminuye la pendiente de “caída” desde el primer plateau hacia el valor de energía de equilibrio, para temperaturas $T_o \geq 0,72$. Pueden estar ocurriendo dos cosas: la primera es que el aumento del *tiempo medio de nucleación* o tiempo que tarda el sistema en caer del plateau, venga acompañado con un aumento en su varianza, de manera que, al acercarnos a T_c tenemos una distribución de tiempos de caída cada vez más ancha, y el promedio sobre varias realizaciones dá como resultado una caída lenta de la función de relajación; otra posibilidad es que, si bien en estas curvas no alcanzamos a notar un segundo plateau, ellas son producto de la promediación de varias realizaciones individuales dónde tal vez el segundo plateau se hace evidente. Un ejemplo de ésta situación se aprecia en la figura 7.17.

En la figura 7.18.A podemos apreciar que este segundo plateau se hace robusto para tamaños grandes. Esto coincide con nuestros resultados de la sección anterior, dónde obteníamos una “cola” para la relajación de la energía en las curvas correspondientes a $L = 200$ y $L = 300$ en la figura 7.6. En ambos casos cortamos las simulaciones antes de que el sistema alcance su estado de equilibrio. El estudio del tiempo de relajación del sistema para tamaños grandes ($L \gtrsim 200$) aparenta ser muy costoso computacionalmente; ya que al aumento natural con N del tiempo real que demora cada paso de MC, debemos sumarle la dificultad de que el sistema “traba” su relajación en este segundo plateau.

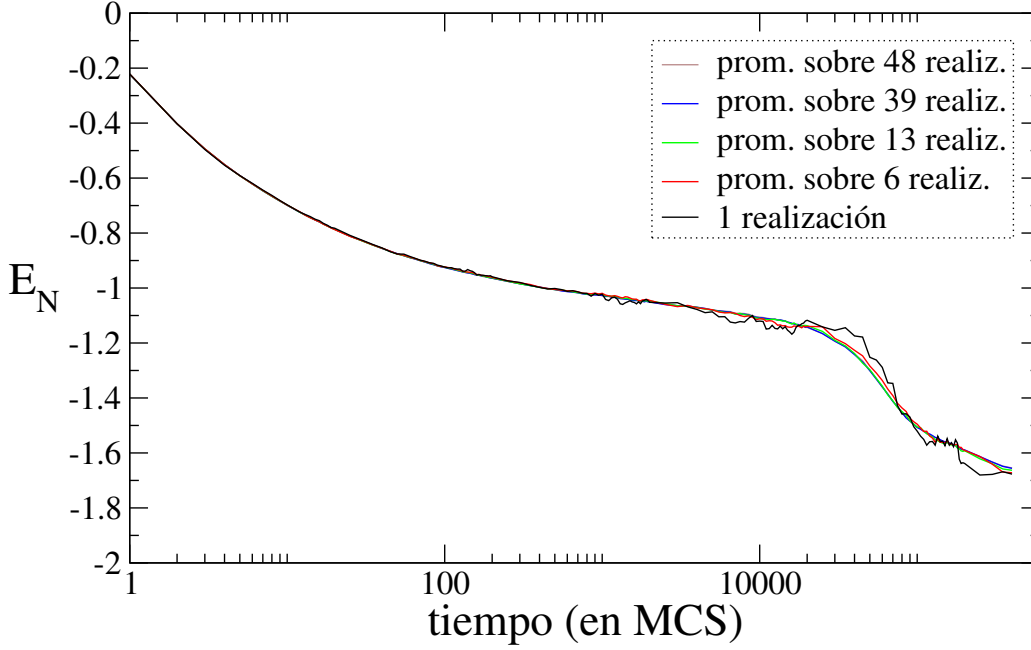


Figura 7.17: Dependencia con el número de muestras de la relajación de la energía por espín de una red 300×300 después de un quench desde $T = \infty$ a $T_o = 0,719$.

En este punto nuestras esperanzas de cuantificar el tiempo de relajación parecen diluirse. Aún asumiendo la existencia de otro estado metaestable y suponiendo tiempos estocásticos τ_1 y τ_2 de caída del primer al segundo plateau de metaestabilidad y de éste último al valor de equilibrio, con distribuciones de probabilidad independientes $P(\tau_1)$ y $P(\tau_2)$, respectivamente, no es posible generalizar nuestro modelo (7.1) a tres estados, ya que las integrales involucradas no tienen solución algebraica. Sin embargo, aún podemos (aunque con mayor costo computacional) realizar la medición directa de τ construyendo histogramas a partir de datos obtenidos de muchas realizaciones individuales. En la sección 7.4 presentamos algunos resultados.

Analizando el comportamiento de la energía por espín en función del tiempo para una dada temperatura T_o , podemos decir que: para temperaturas muy por debajo de $T_c = 0,7213$ la relajación prácticamente no depende del tamaño del sistema (fig. 7.19.A) y la presencia de metaestabilidad es casi

inexistente. En su lugar, los resultados son consistentes con un proceso de coarsening normal. Para temperaturas más cercanas (fig. 7.19.B) el tiempo de estadía en el primer plateau (o pseudo-plateau) no depende del tamaño del sistema y esta dependencia aparece en el segundo y más lento estadio de la relajación hacia el equilibrio (notamos que cuánto más grande es la red más tarda en alcanzar el estado de equilibrio); ya en temperaturas muy próximas a T_c (figs. 7.18) la presencia de un plateau propiamente dicho, a altas energías, se hace más marcada y el tiempo de permanencia crece con el tamaño del sistema, pero la caída al estado de equilibrio tipo nucleación que se observa para tamaños intermedios ($L \simeq 100$) fracasa para tamaños mayores donde se hace notoria la presencia del segundo plateau.

Volviendo a la consideración hecha por Arkin y Çelik en [36] y presentada sobre el final del Capítulo 2, podemos decir que si bien un quench que termina “muy” por debajo de la temperatura crítica (digamos $T \leq 0,5$) desenlaza efectivamente en un proceso de coarsening, no está claro que en el caso que el quench termine en la “región de metaestabilidad” el proceso de decaimiento sea via nucleación. En todo caso dicha región estaría restringida a temperaturas muy próximas a T_c .

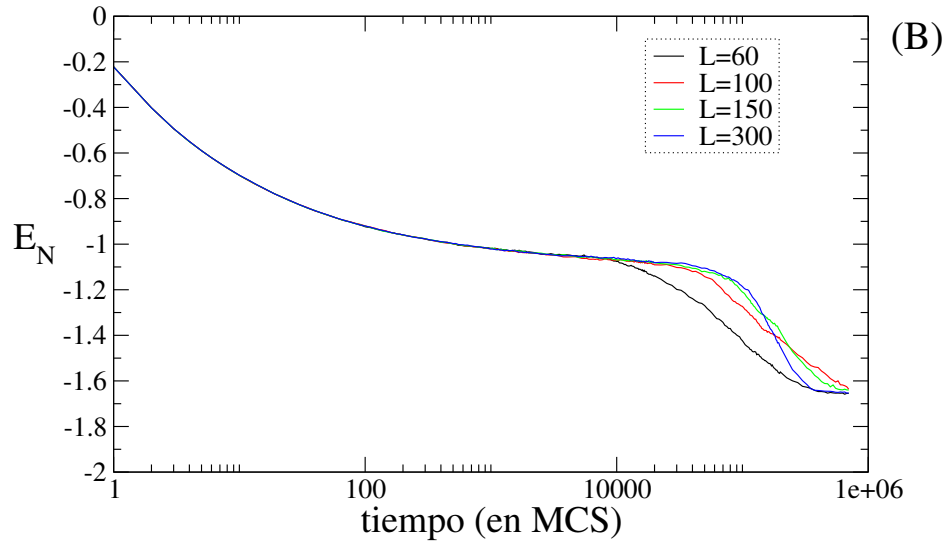
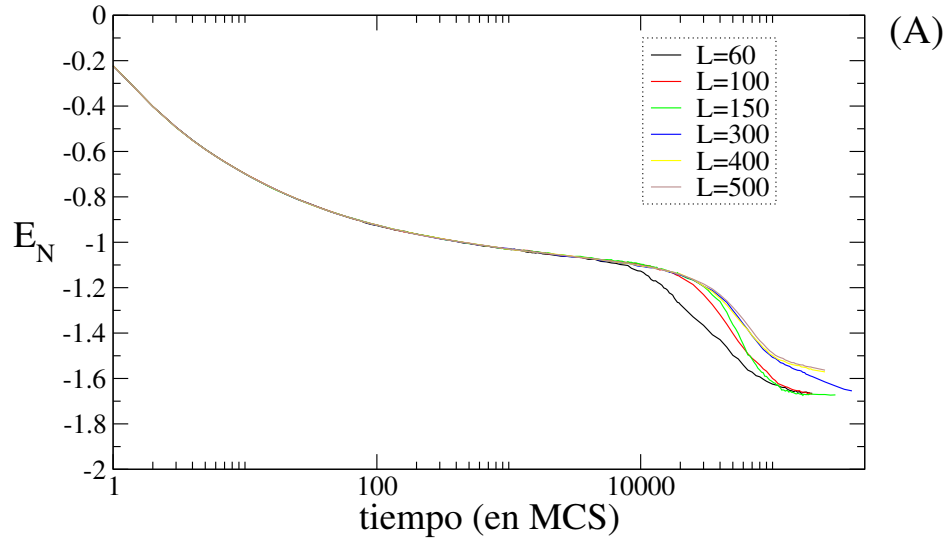


Figura 7.18: Energía por espín vs. tiempo para temperatura $T_o = 0,719$ (A) y $T_o = 0,72$ (B) y distintos tamaños de red

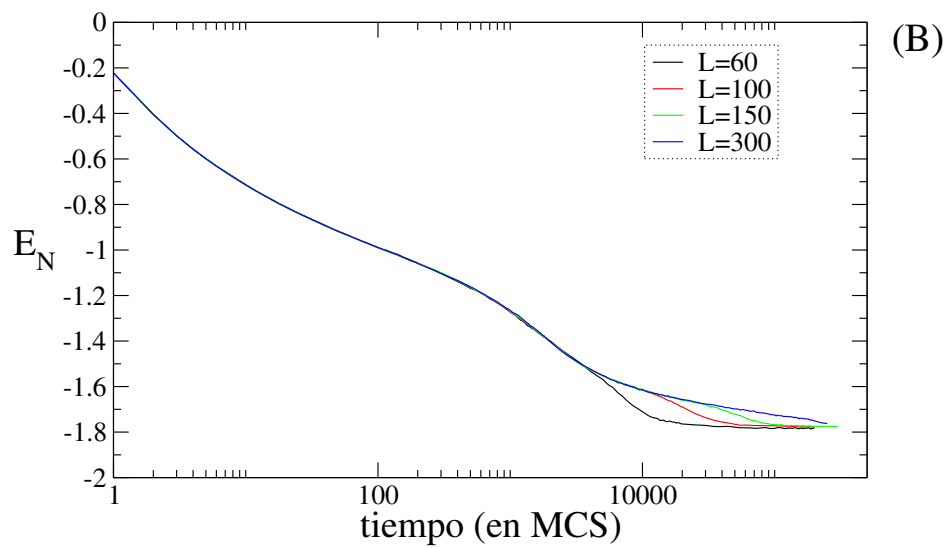
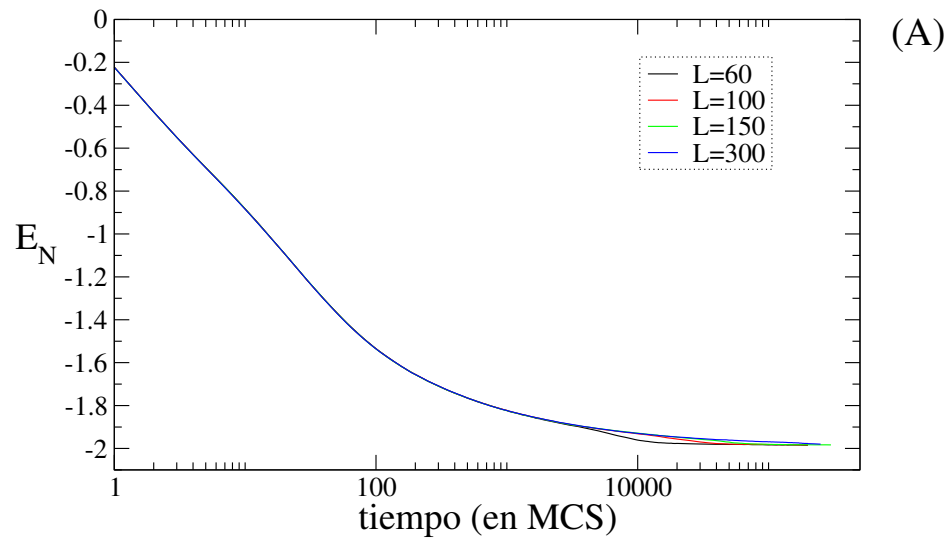


Figura 7.19: Energía por espín vs. tiempo para temperatura $T_o = 0,5$ (A) y $T_o = 0,7$ (B) y distintos tamaños de red

7.3. Realizaciones individuales y configuraciones típicas

Como vimos al comienzo del capítulo, estudiar el comportamiento de realizaciones individuales nos sirve para notar con mayor claridad la presencia de algún plateau o la permanencia del sistema fluctuando cerca de cierto valor de energía. Habiendo observado una relajación anómala del sistema para ciertos valores de temperatura, queremos estudiar su comportamiento en realizaciones individuales aisladas y cómo complemento “observarlo” en el proceso de relajación. Para ello repetimos el procedimiento usual de quench desde un estado completamente desordenado y ahora modificamos nuestro programa para que guarde en un archivo la información de la configuración de la red para distintos tiempos logarítmicamente espaciados. Esto es una matriz $L \times L$ cuyos coeficientes son números enteros entre 1 y 9. Le asignamos entonces a cada coeficiente el espacio en una cuadrícula correspondiente a sus coordenadas en la matriz; que coloreamos con negro si el coeficiente es 1, con blanco si es 9 y con escala de grises los enteros intermedios. De esta manera estamos “fotografiando” al sistema en su evolución temporal hacia el estado de equilibrio y podemos “ver” la formación y crecimiento de dominios de distintos estados de espín y la “competencia” que se genera entre ellos por ocupar toda la red.

Al observar realizaciones del sistema para un quench que termina en temperaturas muy cercanas a T_c notamos que el sistema relaja a través del mecanismo de nucleación. Por ejemplo, en la figura 7.20 se puede notar observando las figuras secuencialmente que: el sistema en primera instancia relaja hacia un valor de energía que corresponde a cierto tamaño característico de dominios y constituye un estado de cierta estabilidad; luego, en algún momento, una gota de tamaño considerable es formada por fluctuaciones y crece rápidamente hasta ocupar todo el sistema. Si bien esto no constituye una prueba rotunda de la existencia de nucleación en el caso general, dá la pauta de que si nos acercamos lo suficiente a T_c éste será el mecanismo que elijirá el sistema para relajar a su estado de equilibrio. Recordemos que cuanto más próxima es T_o a T_c , el plateau de metaestabilidad se mantiene por más tiempo (ej. fig. 7.13.B), es más estable, esto también es una característica distintiva del proceso de nucleación, a diferencia de un coarsening dónde el plateau es inexistente o de otros tipos de relajación o procesos activados dónde el primer plateau tiene corta duración.

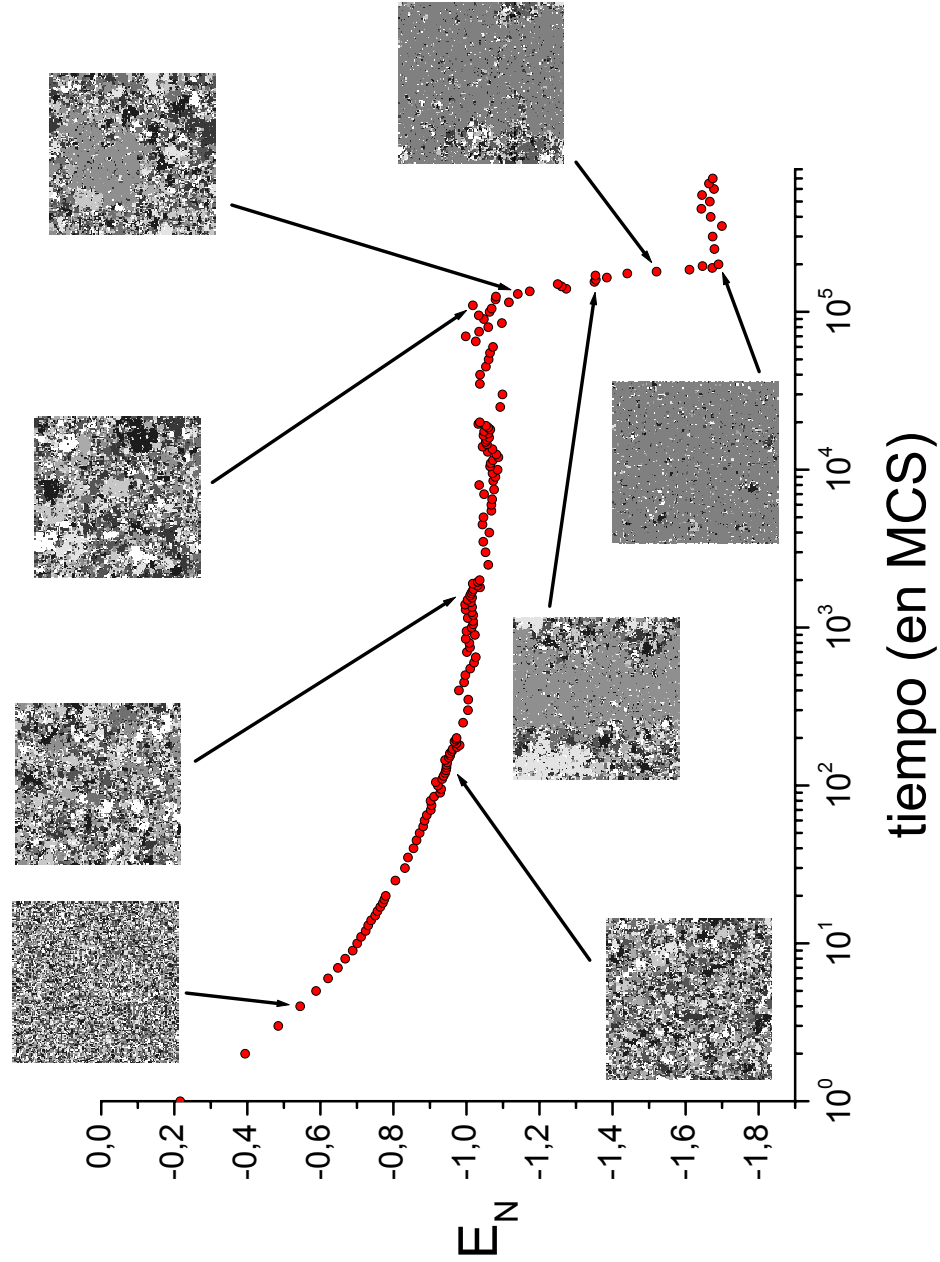


Figura 7.20: Relajación de la energía por espín con el tiempo, para una realización individual de una red 150×150 después de un quench desde temperatura infinita hasta $T_o = 0,72 < T_c$. En los recuadros se muestra las configuraciones de red que dan lugar a los puntos señalados por las flechas.

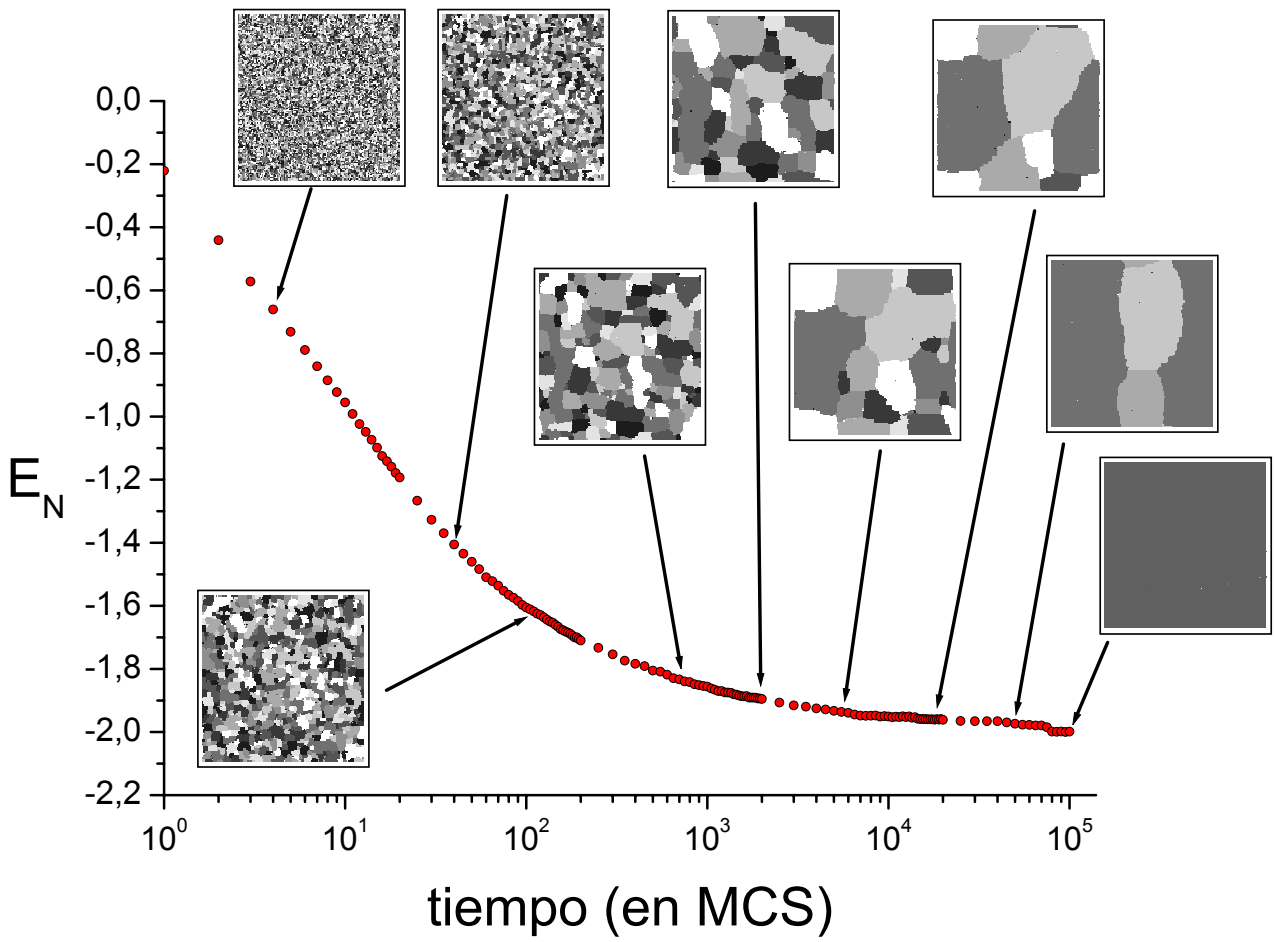


Figura 7.21: Idem fig. 7.20 para una red 150×150 y $T_o = 0,4$.

Para un quench hasta temperaturas mucho menores a T_c las figuras nos muestran un proceso de coarsening, tal como esperábamos (fig. 7.21). Así como en la mezcla de aceite con vinagre, las gotas de los distintos “condimentos” (dominios estables) de nuestra red al principio son muy pequeñas y están muy mezcladas. Con el tiempo, los dominios aumentan su tamaño gradualmente hasta que, después de separarse, uno de ellos desplaza completamente a los otros ocupando todo el sistema.

Debe tenerse cuidado, sin embargo, al analizar temperaturas cercanas al cero absoluto. Un quench hasta dichas temperaturas desenlaza en un proceso de coarsening que posiblemente se se traba para cierto tamaño de dominios, permaneciendo el sistema estable fuera del equilibrio. Ésta situación ha sido reportada [8] cómo indicadora de la presencia de un estado vítreo. Nosotros preferimos guardar cautela al respecto, ya que para semejantes temperaturas los “flipeos” de espines son muy poco probables, y pensamos que quizá el sistema no se “traba” por la competencia entre dominios de cierto tamaño característico sino más bien que permanece casi estático llegado cierto punto, ya que la dinámica no es favorecida. Por completitud presentamos un ejemplo de esta situación en la figura 7.22.

Para temperaturas T_o intermedias ($0,5 \lesssim T_o \lesssim 0,718$) el panorama es más complejo, como vimos. Las configuraciones típicas o “fotos” del sistema no ayudan a desentrañar el misterio del todo pero dejan ver que el proceso no corresponde a un coarsening puro ni a una nucleación en el sentido clásico. Algunas realizaciones sugieren que puede ocurrir un proceso de coarsening activado; es decir, el sistema relaja a través de un coarsening que se traba en ciertos tamaños característicos de dominios por un cierto tiempo para luego continuar relajando; esto genera un perfil tipo escalonado de la energía por espín en función del tiempo (fig. 7.24). En términos de energía potencial correspondería decir que el sistema se mueve en un paisaje montañoso con varios mínimos locales dónde queda atrapado, teniendo que saltar barreras de energía libre en busca del mínimo global o estado de equilibrio.

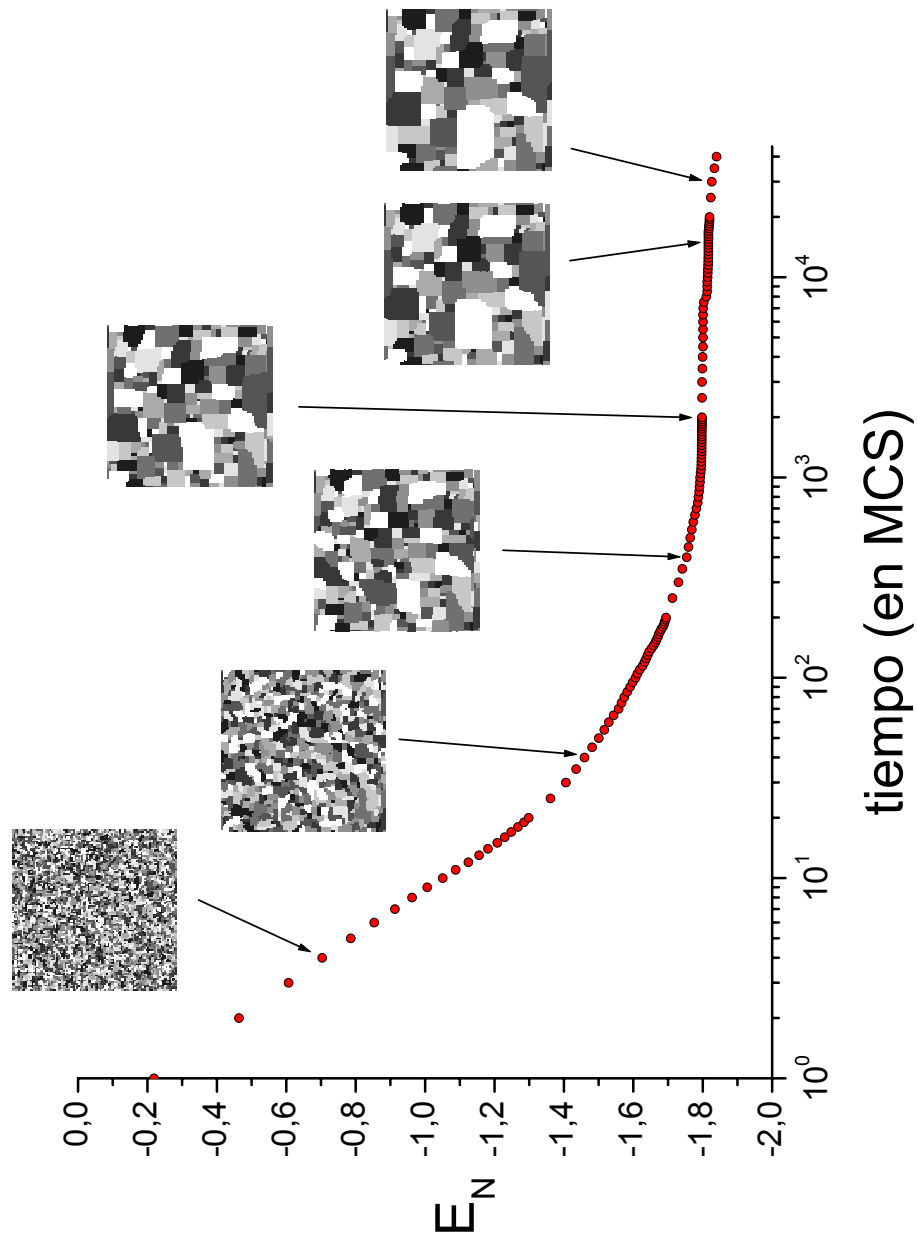


Figura 7.22: Idem fig. 7.20 para una red 100×100 y $T_o = 0,1$. Notar que el sistema no alcanza su estado de equilibrio (para esta temperatura $E_N = -2$), y el estacionamiento del valor de energía y de la configuración de red es notable.

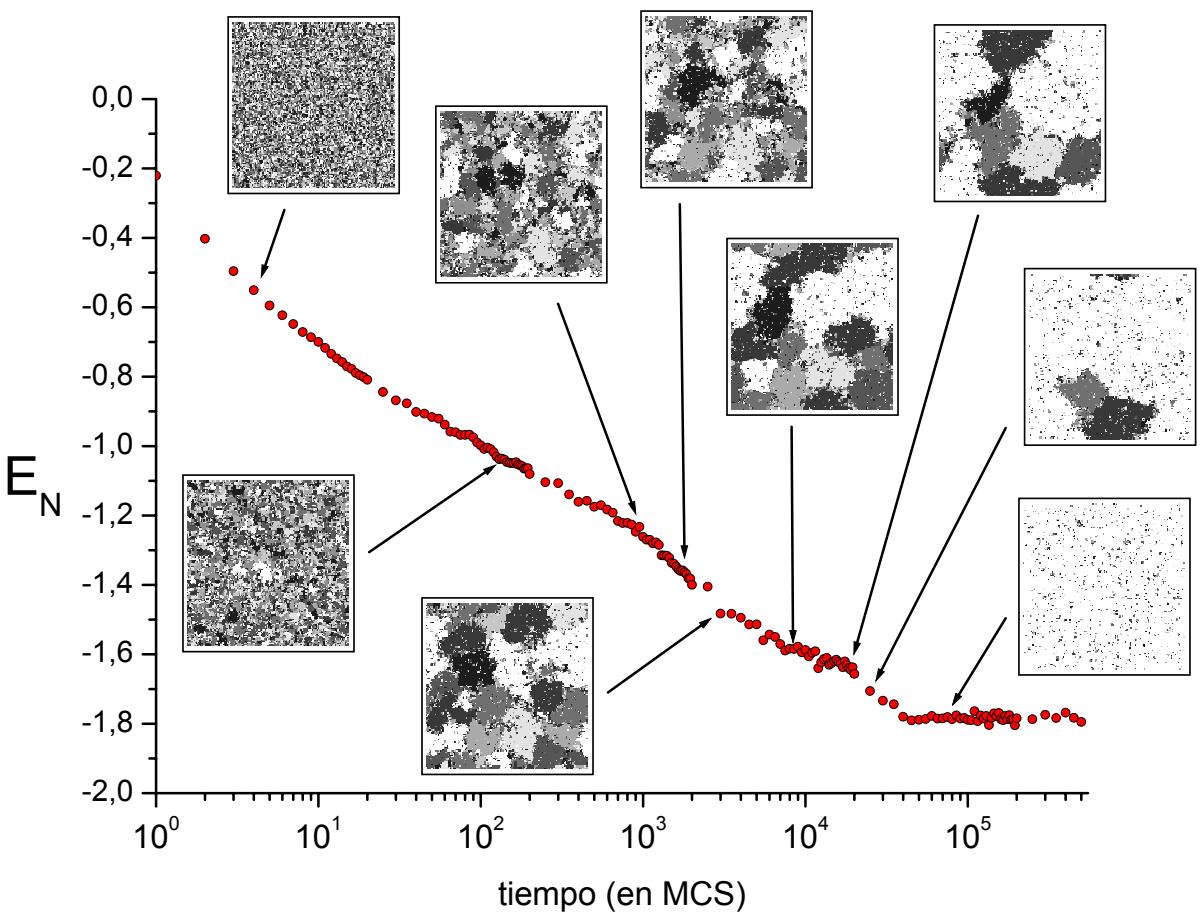


Figura 7.23: Idem fig. 7.20 para una red 150×150 y $T_o = 0,7$.

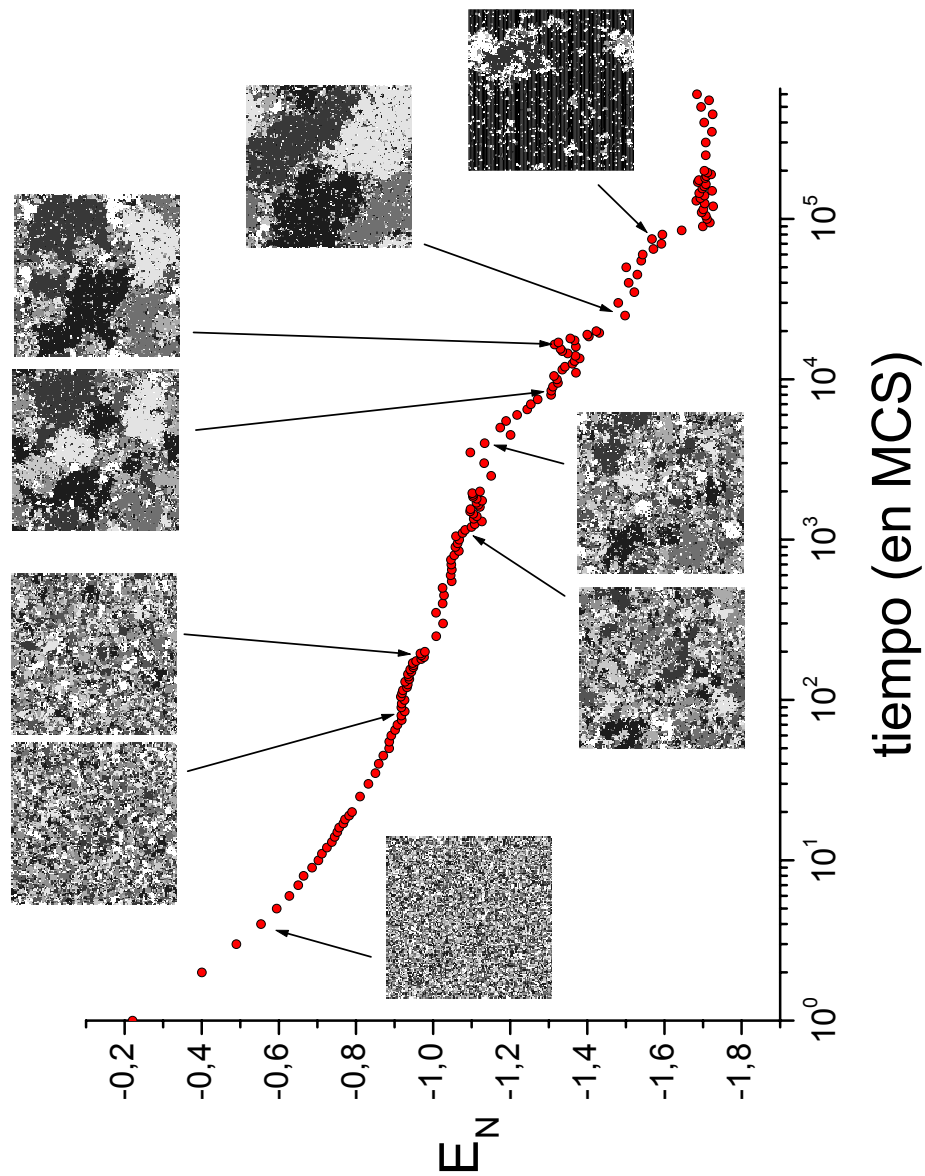


Figura 7.24: Idem 7.20 para una red 150×150 y $T_o = 0,715$. De a pares se presentan configuraciones que a distintos tiempos muestran un valor de energía similar.

Para finalizar esta sección presentamos un ejemplo para una red de lado $L = 300$ después de un quench hasta $T_o = 0,719$ en dónde una aparente nucleación, con más de una gota de tamaño considerable (mayor al tamaño crítico), es frenada, y el sistema permanece en un segundo plateau un tiempo similar al que tardaron en aparecer las gotas de tamaño crítico. Entre los grandes dominios compitiendo, se observa una capa intermedia de espines en una fase estable diferente a la de ellos, que persiste en la secuencia de figuras. Queda para un trabajo futuro, estudiar este comportamiento, analizando la posibilidad de que sean estas fajas intermedias las causantes del estancamiento de la relajación.

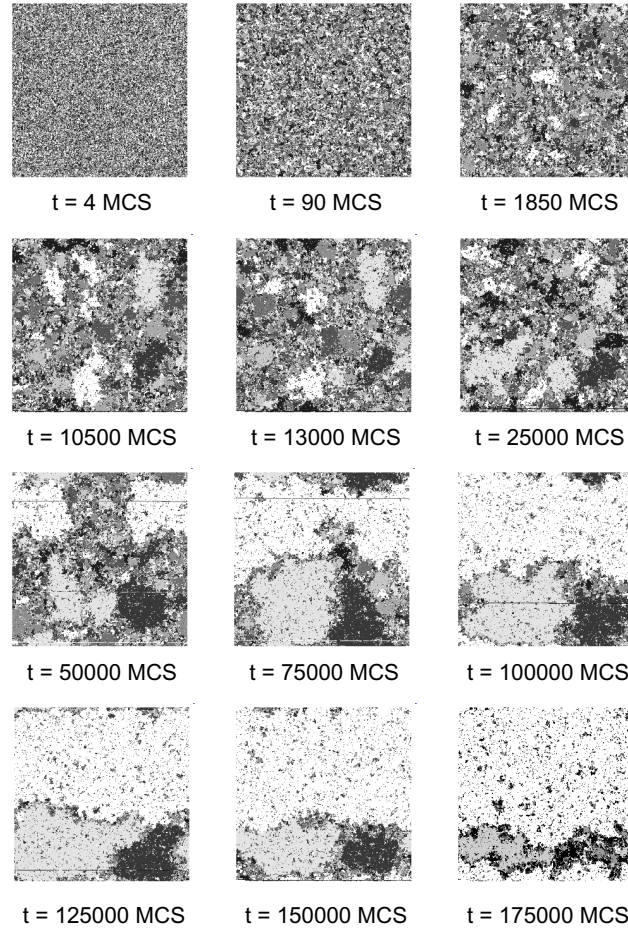


Figura 7.25: Configuraciones a distintos tiempos para la relajación de un sistema 300×300 después de un quench hasta $T_o = 0,719$

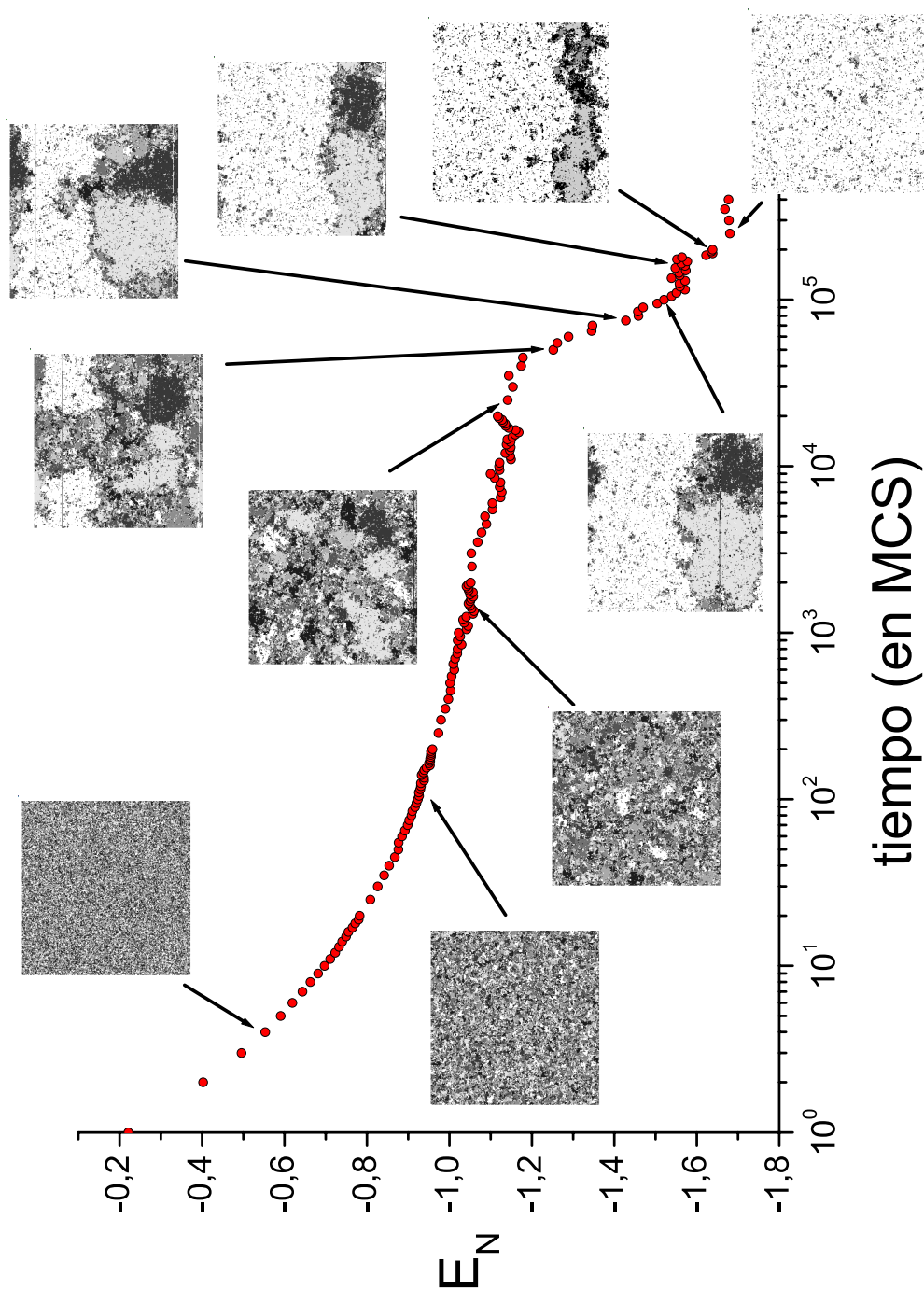


Figura 7.26: Idem 7.20 para una red 300×300 y $T_o = 0,719$.

7.4. Tiempos de relajación

Lo prometido anteriormente: Estudiamos la distribución de *tiempos de relajación* $P(\tau)$ para distintos tamaños de red y distintas temperaturas T_o , midiendo directamente dichos tiempos τ para un número grande de muestras independientes y realizando un histograma con los valores obtenidos para estudiar su distribución. Después del proceso de quench hasta temperatura T_o ya varias veces explicado, simplemente dejamos al sistema relajarse y comenzamos a contar el tiempo que transcurre (en MCS) hasta que la energía media por espín cae por debajo de cierto umbral¹, que esencialmente es el valor de energía correspondiente al estado de equilibrio a temperatura T_o más su banda de error. Medimos valores de τ para tamaños de red N iguales a 15×15 , 30×30 , 60×60 y 100×100 . Y para distintas temperaturas T_0 entre 0,5 y 0,719. La cantidad de muestras medidas para cada histograma es de 40000 para las redes con $L = 15$ y $L = 30$, ~ 34000 para los histogramas con $L = 60$ y entre 5000 y 17000 para el caso de $L = 100$. Intentamos medir también para tamaños de red mayores (p. ej. $L = 150$, $L = 300$), pero los tiempos computacionales necesarios para obtener una buena estadística, crecen considerablemente y algunos meses de simulaciones serían necesarios para obtener histogramas como los que mostramos a continuación para tamaños más chicos:

¹Los umbrales fijados para $T_o = 0,5; 0,6; 0,7; 0,715; 0,719$ son respectivamente $E_N = -1,98; -1,94; -1,77; -1,7; -1,66$.

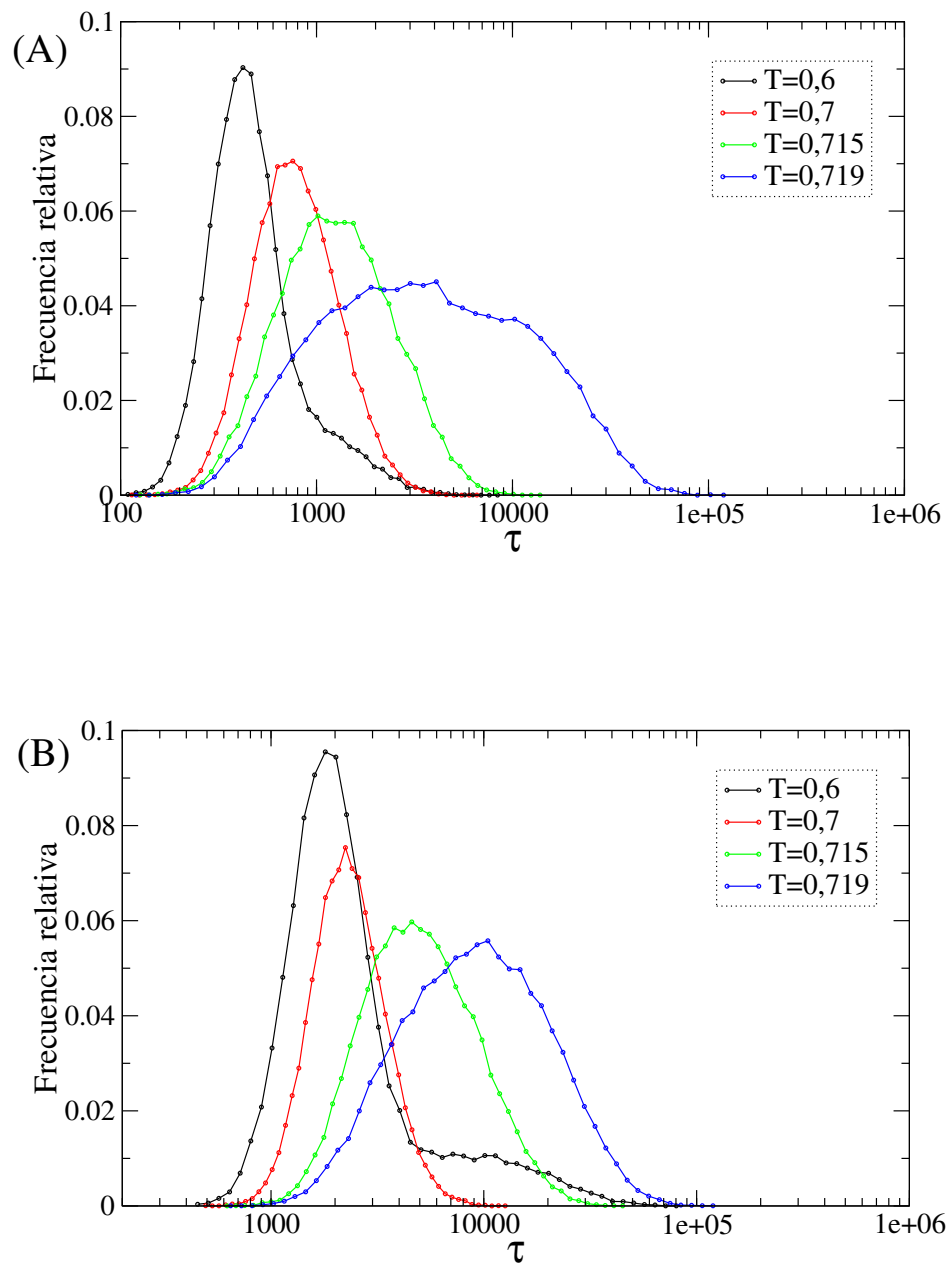


Figura 7.27: Histogramas de tiempo de relajación τ para tamaños de red 15×15 (A) y 30×30 (B) y distintas temperaturas

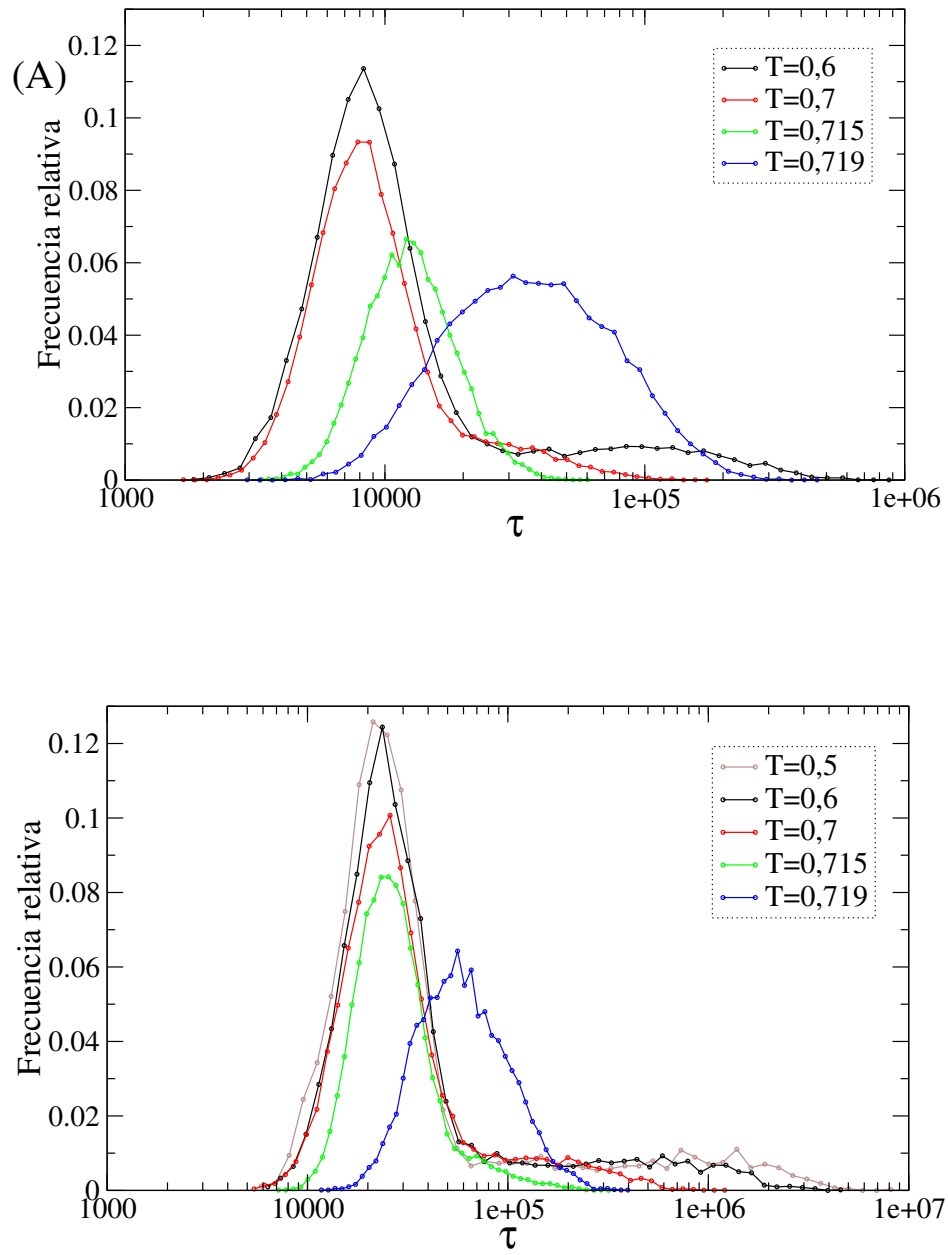


Figura 7.28: Histogramas de tiempo de relajación τ para tamaños de red 60×60 (A) y 100×100 (B) y distintas temperaturas

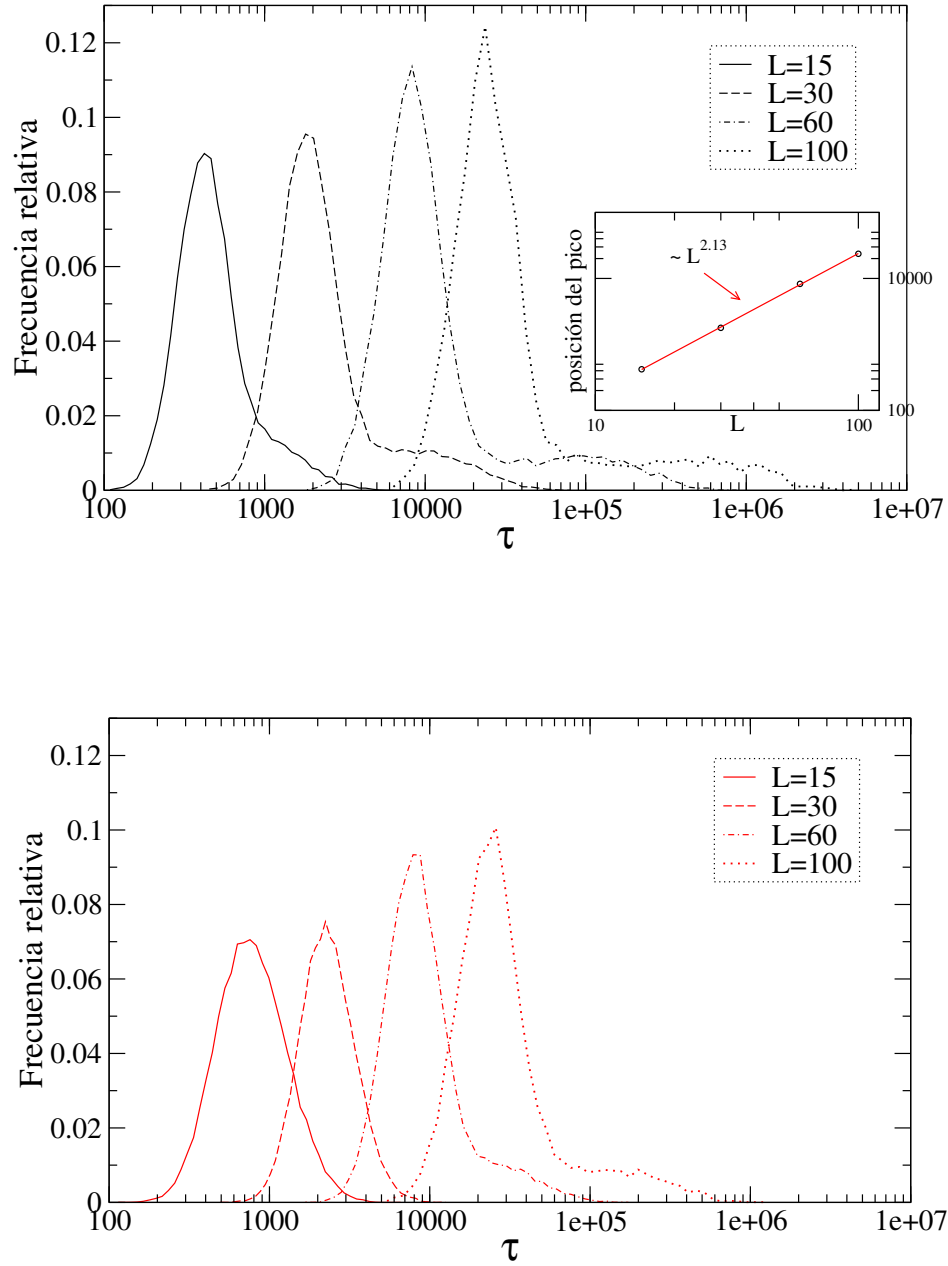


Figura 7.29: Histogramas de tiempo de relajación τ para distintos tamaños de red a temperaturas $T = 0,6$ (A) y $T = 0,7$ (B).

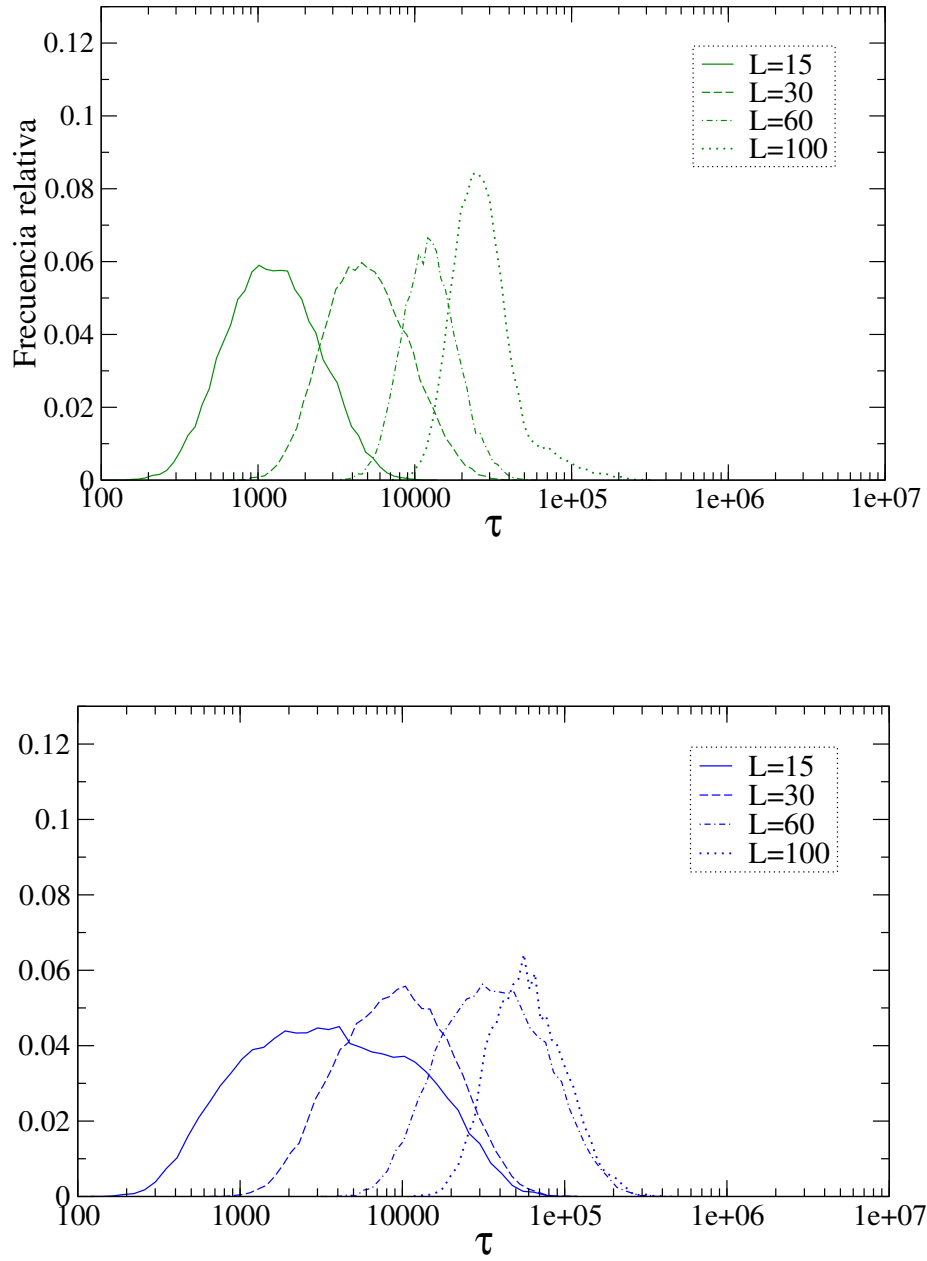


Figura 7.30: Histogramas de tiempo de relajación τ para distintos tamaños de red a temperaturas $T = 0,715$ (A) y $T = 0,719$ (B).

Vemos que, después de un enfriamiento brusco desde temperaturas infinitas hasta T_o por debajo de la temperatura crítica, el estado resultante demora un tiempo medio $\langle \tau \rangle$ en relajar a su estado de equilibrio que depende en principio del tamaño del sistema y del valor de T_o . Para tamaños de red muy pequeños ($L = 15$) los máximos de la distribuciones de tiempos de relajación para distintas temperaturas están bien diferenciados. A medida que nos acercamos a T_c el valor medio de la distribución es mayor y también su varianza que abarca tres órdenes de magnitud diferentes. A medida que observamos tamaños del sistema mayores, los picos (para distintas temperaturas) se van juntando y a su vez aparece una *cola larga* en las distribuciones para bajas temperaturas. En el histograma de τ para el tamaño de red más grande que medimos ($L = 100$, fig.7.28.B) se ve claramente cómo los picos para $T_o = 0,5, 0,6, 0,7, 0,715$ se han alineado, sin embargo la distribución es más ancha cuanto a más bajas temperaturas; sólo la distribución $P(\tau)$ para $T = 0,719$ (la más cercana a T_c) conserva su perfil log-normal (gausiano en las escala logarítmica utilizada).

Si observamos $P(\tau)$ para temperaturas cercanas a T_c notamos que su valor máximo se desplaza hacia valores mayores a medida que aumentamos el tamaño del sistema y su varianza relativa disminuye. Para las temperaturas menores ($T = 0,5; 0,6$), en cambio, observamos una distribución más ancha, con un pico marcado a tiempos menores y una *cola larga* que no alcanza a generar otro máximo pero que se hace más robusta a medida que aumentamos el tamaño del sistema. Para las temperaturas $T_o = 0,7; 0,715$ las distribuciones presentan un comportamiento intermedio entre los dos ya mencionados, pero vale la pena notar que para $T_o = 0,715$ obtenemos las distribuciones $P(\tau)$ más localizadas.

Para bajas temperaturas estimamos que el pico máximo corresponde a la relajación rápida del coarsening. Si tenemos un tamaño característico $l(t) \propto t^{1/2}$ y sabemos que cuando $t \simeq \langle \tau \rangle$ el tamaño característico de un dominio es del orden del tamaño del sistema ($l(t) \simeq L$), entonces el valor medio de τ debería crecer como $\langle \tau \rangle \sim L^2$, y esto es lo que se refleja en la figura 7.29.A. La cola larga que abarca tiempos mucho mayores puede ser debida al efecto ya comentado del desfavorecimiento de la dinámica a temperaturas bajas. Si bien no muy claramente, en la figura 7.28.B se alcanza a apreciar que para temperaturas más bajas esta rama de la distribución se hace más robusta y se extiende hacia tiempos mayores; creemos entonces que es la manifestación de muestras individuales que realizan un proceso de

coarsening pero se traban antes de llegar a su estado de equilibrio y en ocasiones demoran varios órdenes de magnitud en destrabarse y relajar. Vimos evidencia de esto último en el análisis de configuraciones durante una única realización en la sección 7.3.

Finalmente estudiamos el escaleo de $\langle\tau\rangle$ con el tamaño del sistema para temperaturas cercanas a T_c como es el caso de $T_o = 0,719$ (Fig. 7.30). Para ello obtuvimos $\langle\tau\rangle$ de dos maneras diferentes: por un lado, ajustando las curvas gaussianas en la escala logarítmica y calculando $\langle\tau\rangle = 10^{\mu+\sigma^2/2}$ (donde μ es la posición del máximo de la campana y σ la varianza), y por otro lado, haciendo directamente un promedio aritmético de todos los datos de τ obtenidos para cada tamaño de red (fig. 7.31). Incluimos el valor obtenido para $L = 150$ promediando sobre aprox. 1000 valores de τ obtenidos en realizaciones independientes.

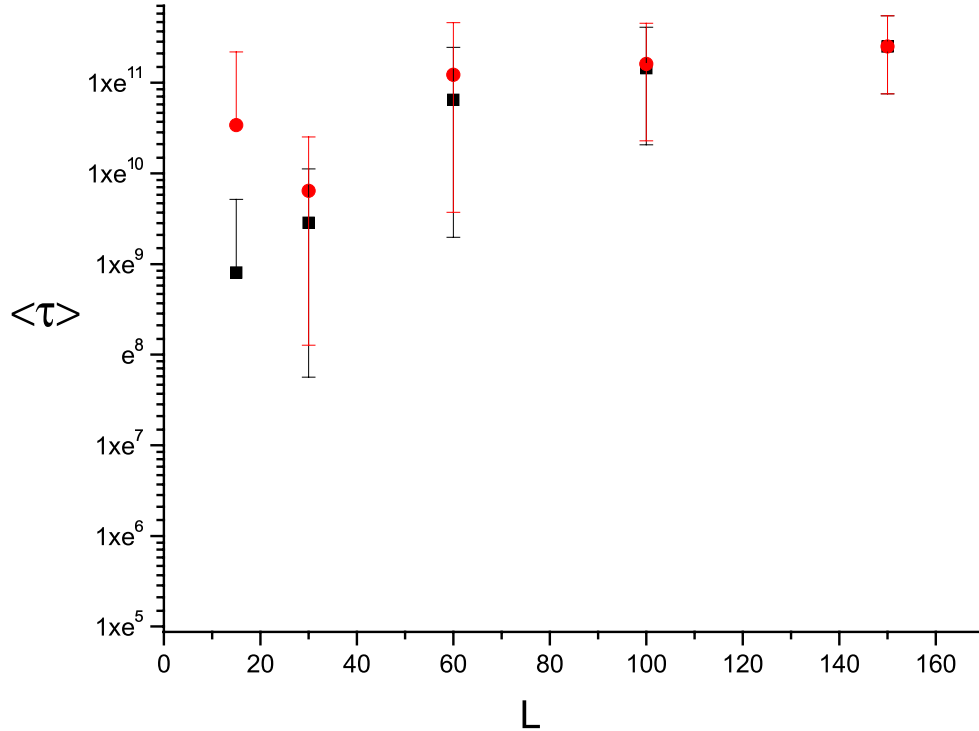


Figura 7.31: Escaleo de $\langle\tau\rangle$ vs. L , obtenido con ajustes gaussianos (círculos) y de un promedio directo (cuadrados).

Primeramente notamos que para el tamaño más pequeño ($L = 15$), la

enorme varianza de la distribución (fig. 7.30.B) provoca un punto en discordancia con el comportamiento esperado, al obtener los datos con el ajuste gaussiano. Por otro lado el hecho de tener distribuciones anchas genera una desviación media muy grande, manifestada en las bandas de error (que en ambos casos fueron tomadas como la desviación estándar del promedio aritmético de los datos estadísticos). Vemos que en primera instancia, el comportamiento es $\ln(\tau) \sim L$ para tamaños pequeños y que cerca de $L = 60$ tenemos un punto de corssover coincidiendo con lo observado en la sección 7.1 (ver fig. 7.32), para tamaños mayores el comportamiento puede ser tanto $\ln(\tau) \sim -\ln(L)$ como $\ln(\tau) \sim cte$. Afirmamos nuestra concordancia con los resultados esperados por la TCN al menos para tamaños pequeños y cerca de T_c .

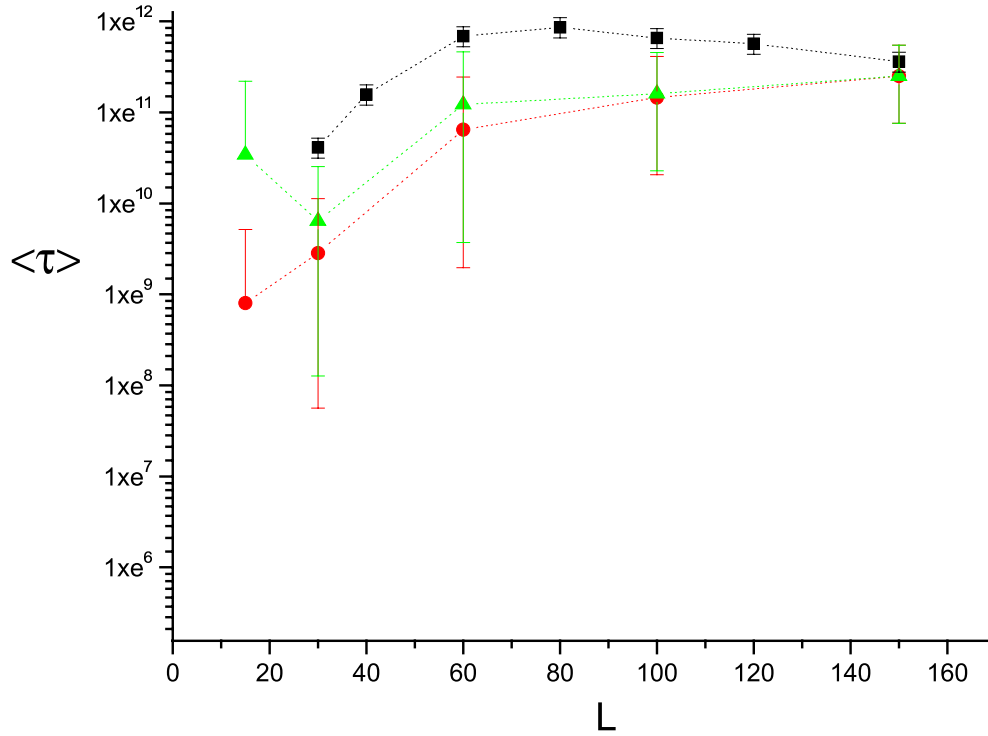


Figura 7.32: Escaleo de $\langle \tau \rangle$ vs. L , comparación de los resultados de la sección 7.1 con los obtenidos a partir de los histogramas. En este caso los puntos señalados con cuadrados corresponden a los resultados de la sección 7.1, los triángulos a los puntos obtenidos con ajustes gaussianos y los círculos a los valores obtenidos de un promedio directo de los datos.

Capítulo 8

Conclusiones y posibles direcciones

Estudiamos el modelo de Potts bidimensional de 9 estados, cerca de su transición de fase de primer orden. Encontramos ciclos de histéresis de la energía por espín y el parámetro de orden con la temperatura. En principio robustos en el límite termodinámico, situación correspondiente al primero de los esquemas propuestos por Binder en [9] y presentados en el Capítulo 5.

Como rescatamos en la sección 7.1, encontramos evidencia de la existencia de metaestabilidad para temperaturas T_o menores, pero próximas a T_c : independientemente del estado inicial del que partamos, observamos una primera relajación rápida con un tiempo característico τ^{eq} seguida de un plateau que se mantiene hasta cierto tiempo τ^{ms} y se cumple $\tau^{ms} \sim 10^2 \tau^{eq}$ lo que indica la existencia de un estado metaestable [37]. Tanto el comportamiento de escala de τ^{ms} con el tamaño del sistema, el comportamiento de las curvas de relajación de la energía (que concuerdan con el modelo de dos estados) como la observación de configuraciones individuales típicas, confirman este resultado.

Observamos una relajación tipo coarsening para temperaturas $T_o \ll T_c$ afirmada por el comportamiento $\phi_E \sim t^{1/2}$ (fig. 7.16) y el escaleo tipo $\sim L^2$ para el máximo de las distribuciones de τ a bajas temperaturas (fig. 7.29.A). También en este caso la observación directa de configuraciones típicas confirma este resultado, por otro lado esperado.

Si bien encontramos cierta evidencia de nucleación cerca de T_c , los re-

sultados indican un proceso de relajación más complejo (ni coarsening, ni nucleación), o al menos no responden adecuadamente a la TCN, sólo lo hacen para tamaños relativamente chicos. Podría ocurrir que las predicciones de la TCN estén erradas, al menos para los casos en tamaños grandes en los que se forman simultáneamente más de una gota de radio mayor al crítico. La posible falla de las predicciones de la TCN ya ha sido apuntada en un estudio del modelo de Ising con interacciones de largo alcance [6]. En general las mayores dificultades para arribar a una evidencia más conclusiva acerca de la existencia de metaestabilidad y efectos de nucleación se relacionan con efectos de tamaño finito.

Una de las tareas pendientes, como ya se apuntó en la sección 6.2 es confirmar la existencia de histéresis en el límite termodinámico. Una manera posible de hacerlo fue explicada en dicha sección; otra propuesta consiste en estudiar la relación $r(L)$, siendo ésta la mayor tasa de enfriamiento(calentamiento) para la cual el sistema de tamaño L alcanza el equilibrio después de enfriado(calentado) a esta tasa. Como vimos, a medida que aumentamos el tamaño del sistema, es necesario utilizar tasas más pequeñas para lograr un verdadero ciclo de histéresis. Si la histéresis prevalece en el límite termodinámico $r(L)$ debe hacerse independiente de L a partir de cierto tamaño.

Respecto del comportamiento del tiempo de vida del estado metaestable τ^{ms} , la mayor dificultad se encuentra en la relajación anómala para tamaños grandes. Para estudiar adecuadamente este efecto se requieren simulaciones extensivas a tiempos mucho mayores y para tamaños mayores. Un efecto relacionado es la aparición de una cola larga (o posiblemente un segundo pico) en la distribución de probabilidad $P(\tau)$. Para entender el origen de esta anomalía sería interesante capturar configuraciones típicas de las realizaciones que traban su dinámica a temperaturas intermedias ($T_o = 0,6 - 0,7$) y provocan las colas largas de la fig. 7.29. Para ello podríamos guardar las configuraciones iniciales y la semilla de la simulación de cada realización y testear el tiempo de relajación al equilibrio; si éste supera cierto valor, repetimos la corrida “fotografiando” al sistema en su proceso de relajación.

Bibliografía

- [1] K. Binder. *Phys. Rev. B*, 8:3423, 1973.
- [2] R. J. Baxter. *J. Phys. C*, 6:L445, 1973.
- [3] P. Chaikin and T. Lubensky. *Principles of Condensed Matter Physics*. Cambridge University Press, 2000.
- [4] F. Y. Wu. *Rev. Mod. Phys.*, 54:235, 1982.
- [5] P. Debenedetti and F. Stillinger. *Nature*, 410:259, 2001.
- [6] V. Shneidman K. Jackson and K. Beaty. *J. Chem. Phys.*, 111:6932, 1999.
- [7] A. Velytsky B. Berg and U. Heller. *Nucl. Phys. Proc. Suppl.*, 119:861, 2003.
- [8] M. de Oliveira A. Petri and T. Tomé. *Physica A*, 342:97, 2004.
- [9] K. Binder. *J. Stat. Phys.*, 24:69, 1981.
- [10] C. Borgs and W. Janke. *J. Phys. I France*, 2:2011, 1992.
- [11] S. Gupta. *Phys. Lett. B*, 325:418, 1994.
- [12] J. Meunier and A. Morel. *Eur. Phys. J. B*, 13:341, 2000.
- [13] R. B. Potts. *Proc. Camb. Phill. Soc.*, 48:106, 1952.
- [14] E. Ising. *Z. Phys.*, 21:613, 1925.
- [15] J Ashkin and E. Teller. *Phys. Rev.*, 64:178, 1943.
- [16] T. Kihara Y. Midzuno and T. Shizume. *J. Phys. Soc. Japan.*, 9:681, 1954.

- [17] S. Murthy S. Challa P. Landau and K. Binder. *Phys. Rev. B*, 34, nř3:1841, 1986.
- [18] R. J. Baxter. *J. Stat. Phys.*, 15:485, 1976.
- [19] P. W. Kasteleyn and C. M. Fortuin. *J. Phys. Soc. Jpn.*, 26:11, 1969.
- [20] F. Y. Wu. *J. Stat. Phys.*, 18:115, 1978.
- [21] R. J. Baxter. *J. Math. Phys.*, 11:784, 1970.
- [22] R. J. Baxter. *Exactly Solved Models in Statistical Mechanics*. Academic Press, Harcourt Brace Jovanovich, Publishers, 1984.
- [23] J. P. Straley and M. E. Fisher. *J. Phys. A*, 6:1310, 1973.
- [24] G. R. Golner. *Phys Rev. B*, 8:3419, 1973.
- [25] D. J. Amit and A. Sherbakov. *J. Phys. C*, 7:L96, 1974.
- [26] R. G. Priest and T. C. Lubensky. *Phys Rev. B*, 13:4159, 1976.
- [27] R. K. P. Zia and D. J. Wallace. *J. Phys. A*, 8:1495, 1977.
- [28] R. V. Ditzian and L. P. Kadanoff. *J Phys. A*, 12:L229, 1979.
- [29] D. Kim and R. I. Joseph. *J Phys. A*, 8:891, 1975.
- [30] R. J. Baxter. *Phys. Lett. A*, 54:353, 1975.
- [31] E. Domany and E. K. Riedel. *J. Appl. Phys.*, 49:1315, 1978.
- [32] A.Ñ. Berker S. Ostlund and F. A. Putnam. *Phys. Rev. B*, 17:3650, 1978.
- [33] D. Mukamel M. E. Fisher and E. Domany. *Phys. Rev. Lett.*, 37:565, 1976.
- [34] B. Barbara M. F. Rossignol and P. Bak. *J. Phys. C*, 11:1313, 2000.
- [35] A. Aharony K. A. Müller and W. Berlinger. *Phys Rev. Lett.*, 38:33, 1977.
- [36] H. Arkin and T. Çelik. *Inter. J. Mod. Phys. C*, 11:1313, 2000.
- [37] K. Binder. Theory of first-order phase transitions. *Rep. Prog. Phys.*, 50:783–859, 1987.

- [38] D. Capocaccia M. Cassandro and E. Olivieri. *Commun. Math. Phys.*, 39:185, 1974.
- [39] M. E. Fisher IUPAP Conf. on Statistical Mechanics, Boston 1962, no publicado.
- [40] M. E. Fisher. *Physics*, 3:255, 1967.
- [41] P. Gleiser. Dynamical properties of long range interacting systems, 2001. Tesis Doctoral.
- [42] A. J. Bray. *Advances in Physics*, 43:357, 1994.
- [43] H. Hinrichsen. *Adv. Phys.*, 49:815, 2000.
- [44] A. J. Bray. *Zh. Eksp. Teor. Fiz.*, 42:1354, 1962.
- [45] M. Grousson G. Tarjus and P. Viot. *Phys. Rev. E*, 64:036109, 2001.
- [46] I. Lifshitz and V. Slyozov. *J. Phys. Chem. Solids*, 19:35, 1961.
- [47] J. Shore and J. Sethna. *Phys. Rev. B*, 43:3782, 1991.
- [48] K. Binder and D. W. Heerman. *Monte Carlo Simulation in Statistical Physics*. Springer - Verlag, segunda edici?n corregida edition, 1992.
- [49] N. Metropolis A. W. Rosenbluth M. N. Rosenbluth A. H. Teller and E. Teller. *J. Chem. Phys.*, 21:1087, 1953.
- [50] H. Blöte and H. Swendsen. *Phys. Rev. Lett.*, 43:799, 1979.
- [51] H. Arkin T. Çelik B. Berg and H. Meyer-Ortmanns. *Phys. A*, 274:320, 1999.
- [52] J. Lee and J. M. Kosterlitz. *Phys. Rev. B*, 43:3265, 1991.