

Dinâmica estocástica de sistemas desordenados

Daniel A Stariolo

Departamento de Física
Universidade Federal Fluminense

XI Escola do CBPF - Julho 2017

Sumário

1	Sistemas fora do equilíbrio e dinâmica lenta	4
1.1	Exemplos de sistemas com dinâmica lenta	7
1.1.1	Sistemas magnéticos e fluidos: crescimento de domínios	7
1.1.2	Vidros	9
1.1.3	Sistemas granulares	10
1.1.4	Vidros de spin	12
2	Fenomenologia da dinâmica lenta	15
2.1	Observáveis e medias estatísticas	15
2.2	Memória e aging	17
2.3	O Teorema de Flutuação-Dissipação	22
3	Sistemas em contato com reservatórios: o formalismo de Langevin	27
4	O modelo SK com vínculo esférico	32
4.1	Propriedades de equilíbrio termodinâmico	32
4.2	Dinâmica de Langevin	37
4.3	Temperatura zero	39
4.3.1	Tipos de condições iniciais	40
4.4	A dinâmica desde um estado inicial desordenado	42
4.4.1	Comportamento assintótico da função de autocorrelação nos diferentes setores temporais	43
4.4.2	Comportamento da função resposta	44
4.4.3	Relaxação da densidade de energia	45
4.5	Temperatura finita	46
4.5.1	Condição inicial desordenada	49
4.5.2	Condição inicial “staggered”	55

<i>Daniel A. Stariolo - CBPF - 2017</i>	3
5 A superfície de energia do modelo SK esférico	59
5.1 Campo externo nulo	59
5.2 Campo externo aleatório	64
Referências Bibliográficas	69

Capítulo 1

Sistemas fora do equilíbrio e dinâmica lenta

Consideremos o modelo de Ising do ferromagnetismo:

$$\mathcal{H} = - \sum_{i,j=1}^N J_{ij} S_i S_j, \quad (1.1)$$

onde $J_{ij} = J > 0$ é a constante de interação ferromagnética e os spins de Ising $\{S_k = \pm 1, k = 1, \dots, N\}$. Em dimensões $d \geq 2$ o modelo apresenta uma transição de fases contínua a uma temperatura crítica T_c entre uma fase paramagnética para $T > T_c$ e uma fase ordenada ferromagnética para $T < T_c$. **Em uma fase ordenada**, como a fase ferromagnética abaixo de T_c , **a relaxação para o equilíbrio é exponencial**, com uma escala de tempo característica. Por exemplo, as funções de correlação decaem na forma:

$$C(t) = \frac{1}{N} \sum_i s_i(t_0 + t) s_i(t_0) = \exp -(t/\tau), \quad (1.2)$$

onde t_0 é um tempo de espera antes de começar a medir correlações, e τ é a escala de tempo característico da relaxação. A baixas temperaturas a tendência dos spins é de se alinharem com os vizinhos para minimizar a energia. No estado fundamental todos os spins apontam na mesma direção e todas as interações de pares são facilmente satisfeitas.

No entanto, existem sistemas chamados *frustrados* para os quais não é possível satisfazer simultaneamente todas as interações de pares. O exemplo mais simples

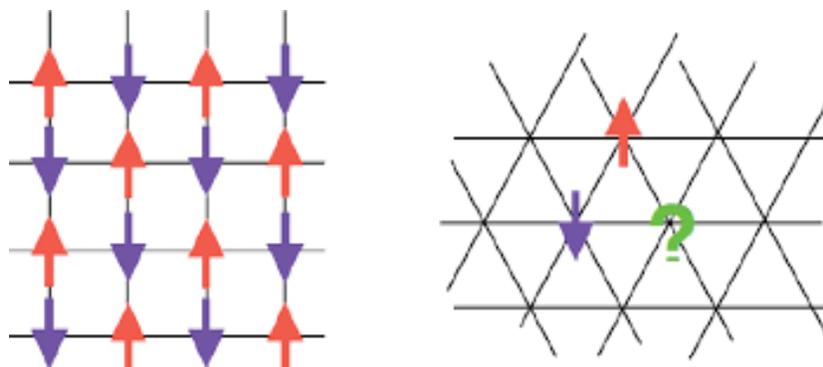


Figura 1.1: O modelo de Ising antiferromagnético nas redes quadrada (esquerda) e triangular (direita).

é o antiferromagneto de Ising na rede triangular, como mostrado na figura 1.1. A frustração causa uma grande degenerescência no estado fundamental do sistema. Outra possível causa de frustração, muito comum em sistemas reais por causa da presença de impurezas na matriz cristalina, é a *desordem*. Impurezas na matriz cristalina podem ser modeladas no Hamiltoniano (1.1) considerando as constantes de interação de pares J_{ij} como sendo variáveis aleatórias, dependentes, por exemplo, da distância entre pares de sítios, da natureza química das impurezas, e outros fatores causantes de aleatoriedade efetiva nas interações microscópicas.

Frustração e desordem são causa de um forte amortecimento na dinâmica de relaxação para o equilíbrio de muitos sistemas. Nestes casos a relaxação é tipicamente dada por uma lei de potências:

$$C(t) = C_{\infty} + t^{-\alpha} \quad (1.3)$$

As causas da dinâmica lenta em sistemas hamiltonianos pode ser estudada de diversos pontos de vista. Um destes é analisar a evolução temporal de um ponto no espaço de configurações sobre a **superfície de energia** do sistema. Para um sistema com N graus de liberdade, a energia potencial define uma função em um espaço N -dimensional, o *espaço configuracional*. Um ponto neste espaço representa o estado dinâmico do sistema em um instante de tempo dado. A medida que o tempo passa, este ponto “viaja” sobre a superfície de energia potencial, como mostrado pictoricamente, na figura 1.2 no segundo painel. As superfícies de energia de sistemas desordenados e frustrados apresenta “rugosidade” na sua estrutura. A rugosidade se reflete em uma estrutura não trivial de mínimos locais de energia e pontos de sela. Em um processo de resfriamento, o sistema vai per-

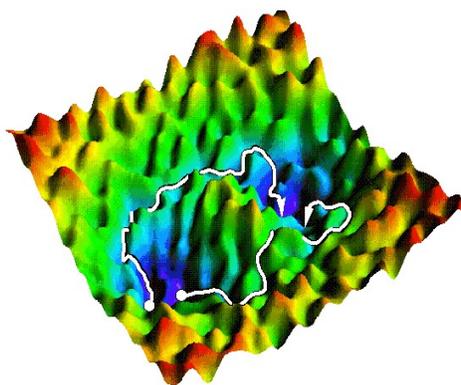
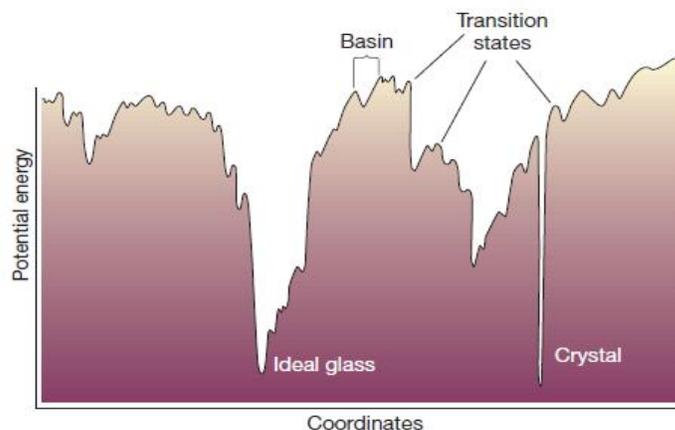


Figura 1.2: Descrições pictóricas de superfícies de energia “rugosas”.

dendo energia cinética e, gradativamente, va ficando preso em bacias de energia que correspondem, tipicamente, a um ou varios mínimos locais. Dependendo da taxa de resfriamento, a energia cinética pode diminuir tanto que o sistema não consiga mais difundir sobre a superfície de energia para mínimos de energia menor, e eventualmente, para o estado fundamental. Estes casos correspondem a uma quebra de ergodicidade no sistema, o espaço de fases se “quebra” em subespaços mutuamente inacessíveis. No entanto, se o sistema é considerado em contato com um banho térmico e portanto trocando energia com ele, flutuações podem acontecer que permitam o sistema escapar de bacias locais e relaxar para estados de menor energia. É natural concluir que as escalas de tempo necessárias para que esta relaxação acontece podem ser muito grandes, o que leva ao fenômeno da

relaxação lenta.

1.1 Exemplos de sistemas com dinâmica lenta

1.1.1 Sistemas magnéticos e fluidos: crescimento de domínios

Um mecanismo possível para dinâmica lenta, que pode estar presente em sistemas com ou sem desordem, é o **crescimento de domínios**. Muitos processos naturais apresentam crescimento de domínios, ou *domain coarsening* [1]. Por exemplo, quando um material é resfriado rapidamente desde um estado líquido de alta temperatura para uma temperatura típica da fase sólida, muitos sistemas apresentam algum tipo de separação de fases, como ilustrado na figura 1.3. Um



Figura 1.3: O fenômeno do crescimento de domínios.

ferromagneto tentará se ordenar, mas devido à simetria de spin-flip ambos estados de magnetização positiva e negativa irão crescer e competir pela estabilidade final. Em processos metalúrgicos, quando um material é lentamente resfriado, grãos com diferentes orientações cristalinas irão aparecer e crescer. Um líquido molecular ou ligas binárias sofrem decomposição espinodal ou separação de fases quando rapidamente resfriados. Todos estes são típicos processos de relaxação fora do equilíbrio. De aqui em diante vamos adotar o ferromagneto de Ising como o exemplo genérico deste tipo de sistemas. A interação de troca tende a orientar os spins em uma de duas possíveis orientações. Depois de algum tempo, em uma amostra de material, irão estar presentes domínios de spins para cima e domínios de spins para baixo, e a dinâmica apresentará duas contribuições dominantes: uma **dinâmica rápida** de spin-flip dentro dos domínios já formados se $T \neq 0$ e uma **dinâmica lenta** de evolução das **paredes de domínio**. Intuitivamente, é evidente que embora o sistema esteja globalmente fora do equilíbrio, a primeira

contribuição corresponde a um estado de equilíbrio local, representativo do estado assintótico do sistema, enquanto que a segunda contribuição é uma autêntica dinâmica fora do equilíbrio. Esta segunda dinâmica lenta é a que é interessante para nós. A presença de paredes de domínio se reflete na existência de uma *tensão superficial*, ou excesso de energia, que é proporcional à superfície total que separa domínios com orientações de spin diferentes:

$$\mathcal{E}_s \propto J L^{d-1} \quad (1.4)$$

Para poder minimizar a sua energia livre o sistema tenderá a reduzir a tensão superficial minimizando a superfície total das paredes de domínio. Como consequência deste processo, para tempos longos muitas paredes terão sumido, e o sistema estará se aproximando do equilíbrio. No entanto, se o estado inicial for completamente desordenado, e o sistema for suficientemente grande, se verifica que nenhuma das duas fases consegue se impor completamente, e o processo de coarsening continua indefinidamente. Sempre existirão paredes e o equilíbrio nunca é atingido.

É possível mostrar que o tamanho linear dos domínios crescerá como uma potência do tempo transcorrido na fase de baixa temperatura, que chamaremos **tempo de espera**, t_w :

$$L(t_w) = \Upsilon(T) t_w^{1/z}, \quad (1.5)$$

onde z é um **expoente crítico**, chamado *expoente dinâmico*, e seu valor depende da **classe de universalidade** da dinâmica específica [2]. Neste regime de coarsening o sistema apresenta **propriedades de escala** (scaling), no sentido que as propriedades estatísticas são invariantes por um rescalamento das distâncias pelo tamanho típico $L(t)$. Da relação (1.5) podemos deduzir que **um sistema de tamanho L irá equilibrar em um tempo da ordem de $t_{eq} \propto L^z$** , depois do qual o valor da magnetização atingirá o valor de equilíbrio. Para um sistema tal podemos definir um equilíbrio restrito a uma componente ergódica (o modelo de Ising possui dois), se limitarmos as médias temporais a tempos tais que $t_{eq} < t < t_{erg}$, sendo t_{erg} a escala de tempo na qual o sistema recupera completamente a ergodicidade. Neste intervalo as médias de ensemble devem coincidir com as médias temporais.

Estas considerações simples sobre a fenomenologia do crescimento de domínios deixam clara a importância da ordem dos limites $t \rightarrow \infty$ e $L \rightarrow \infty$. Se fazemos o limite de tempos grandes para L fixo o sistema sempre poderá recuperar a ergodicidade e consequentemente equilibrar. Se no entanto fazemos primeiro $L \rightarrow \infty$, a altura das barreiras de energia e os tempos de equilíbrio divergem, e o sistema pode ficar para sempre fora do equilíbrio.

1.1.2 Vidros

Vidros estruturais ou *vidros de janela* são muito comuns na natureza e na tecnologia e apresentam muitas semelhanças com sistemas com desordem congelada como vidros de spin e sistemas em campos aleatórios que discutiremos mais adiante. No entanto, os vidros estruturais não possuem na sua estrutura microscópica a desordem congelada característica daqueles sistemas. A desordem acontece nas posições instantâneas das moléculas, que a baixas temperaturas não conseguem se organizar numa estrutura cristalina e apresentam uma estrutura amorfa, sem simetrias evidentes.

Em geral, um vidro é produzido resfriando rapidamente um material no estado líquido até uma temperatura abaixo da temperatura de transição líquido-sólido T_m . Em sistemas bons formadores de vidros, como silicatos, um resfriamento rápido permite evitar que o sistema cristalize, que atinja a estrutura de menor energia. No entanto, o sistema solidifica numa estrutura amorfa, o vidro. As características termodinâmicas deste estado amorfo dependem fortemente da **taxa de resfriamento** (cooling rate) desde o estado inicial líquido. Existem vidros poliméricos, simples vidros moleculares, vidros metálicos, etc. Nestes sistemas é possível resfriar o estado líquido abaixo da T_m sem cristalizar e então **o sistema entra num estado metaestável, o líquido súper-resfriado (supercooled liquid)**. Quando súper-refriado, a viscosidade do líquido cresce rapidamente varias ordens de grandeza. Por exemplo, a viscosidade da água na temperatura ambiente é da ordem de $10^{-3} Pa \cdot s$. Na água súper-resfriada pode atingir o fantástico valor de $10^{13} Pa \cdot s$. Neste ponto se diz que o líquido sofre uma **transição vítrea** na temperatura correspondente T_g . Esta não é uma transição termodinâmica usual, no sentido que nenhuma singularidad nos potenciais termodinâmicos é observada. É uma *transição dinâmica*. O valor preciso de T_g depende da taxa de resfriamento, e é tanto menor quanto mais lento seja o resfriamento (ver figura 1.4). No estado vítreo, o sistema ainda se comporta estruturalmente como um líquido, e por tanto se observa uma pequena difusividade e o sistema ainda relaxa muito lentamente. Isto acontece até uma temperatura mais baixa, T_K , na qual o sistema se congela e entra num estado de sólido amorfo.

Experimentalmente a viscosidade ou os tempos de relaxação nos vidros são usualmente descritos com muita boa aproximação pela lei de Vogel-Fulcher:

$$\eta(T) = \eta_0 \exp\left(\frac{A}{T - T_0}\right) \quad (1.6)$$

a qual apresenta uma divergência quando $T \rightarrow T_0$. Os vidros com este comporta-

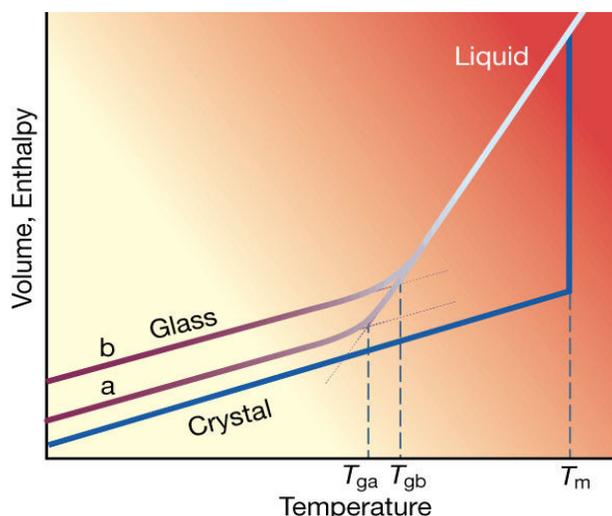


Figura 1.4: A entropia de um formador de vidro nos estados líquido, líquido súper-resfriado e vidro.

mento são chamados *vidros frágeis*. Outros vidros, como os formados por sílica, apresentam um aumento da viscosidade mais lento, com uma divergência somente para $T \rightarrow 0$. Estes são os *vidros fortes*. Neste caso, que corresponde a $T_0 = 0$ na expressão anterior, a relaxação é do tipo Arrhenius. O afastamento eventual do comportamento Arrhenius determina o grau de fragilidade de um vidro [3, 4, 5], como pode ser visualizado na figura 1.5.

Uma pergunta fundamental ainda sem solução é qual é a natureza da transição vítrea. Numa transição de fases de segunda ordem a característica fundamental é a divergência de alguma susceptibilidade, ou o comprimento de correlação entre as partículas, que crescem ao se aproximar da temperatura da transição e divergem na transição, e o aparecimento de um parâmetro de ordem finito. Nenhuma destas características é observada na transição vítrea. Susceptibilidades espaço-temporais de quatro pontos parecem dar conta de comprimentos de correlação crescentes em alguns modelos de sistemas vítreos [6].

1.1.3 Sistemas granulares

Sistemas formados por grãos [7] podem apresentar dinâmica lenta quando sujeitos a forças externas, por exemplo, agitação. Em ausência de forças externas um sistema granular, como uma pilha de areia, ficará em equilíbrio (local) indefini-

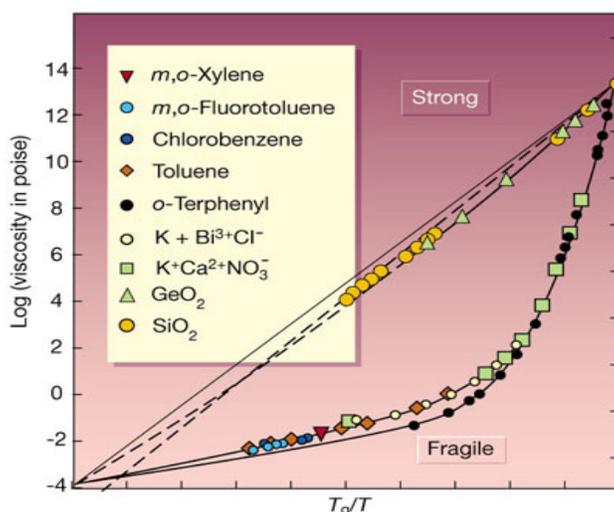


Figura 1.5: Gráfico em escala log-linear da viscosidade em função de T/T_g para diversos sistemas moleculares formadores de vidros.

damente, já que a energia térmica é desprezível aqui, sendo tipicamente ordens de grandeza menor que a energia potencial necessária para passar de um estado metaestável a outro. No entanto, se damos um pequeno "tapa" no recipiente contendo um sistema granular, os grãos irão se reacomodar em novas posições, e o sistema ficará mais compacto. Se aplicarmos uma sucessão destes tapas, de intensidade pequena, o sistema apresentará uma dinâmica de compactação lenta, com muitas semelhanças com a dinâmica lenta (térmica) observada em outros sistemas desordenados. O ponto fundamental a notar neste caso é a necessidade de injetar energia externa no sistema para que este apresente dinâmica, já que a energia térmica (importante nos outros casos) é aqui desprezível.

O forçado externo nos remete ao campo da **reologia**. O parâmetro importante nestes sistemas é a taxa de forçado (ex. shearing rate), que afetará todas as propriedades dinâmicas, como por exemplo o aging nos sistemas. A introdução de uma taxa externa de injeção de energia gera uma escala de tempo característica acima da qual a dinâmica estacionária é recuperada, o aging interrompido. Outro ponto importante é que injetando energia no sistema as forças responsáveis não são mais potenciais (são não-conservativas) e não podemos mais representar o sistema a partir de uma Hamiltoniana, devendo recorrer necessariamente a uma descrição puramente dinâmica e tipicamente dissipativa.

A semelhança dos vidros, os sistemas granulares, quando fracamente forçada

dos, podem apresentar uma transição dinâmica, na qual a distribuição de grãos congela para forçados abaixo de um certo valor crítico. Esta transição é conhecida como **jamming** [8, 9]. Jamming acontece, por exemplo, em modelos de trânsito de veículos em ruas muito movimentadas.

1.1.4 Vidros de spin

Vidros de spin são sistemas magnéticos desordenados nos quais a interação de troca J_{ij} pode ser modelada como sendo uma variável aleatória congelada, ou seja, constante no tempo [10, 11, 12, 13]. O Hamiltoniano mais simples, que se mostrou corresponder a um dos sistemas mais complexos de ser entendidos, é o do **modelo de Edwards-Anderson**, dado por:

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} S_i S_j \quad (1.7)$$

onde $\langle ij \rangle$ indica pares de vizinhos próximos numa rede hipercúbica em d dimensões espaciais. Os spins são tipo Ising $\{S_i = \pm 1, i = 1, \dots, N\}$. Sendo variáveis aleatórias, as constantes de interação estão determinadas por uma distribuição de probabilidades. Dois casos comuns são a Gaussiana:

$$P(J_{ij}) \propto \exp\left(-\frac{J_{ij}^2}{2\sigma^2}\right) \quad (1.8)$$

e a distribuição bimodal:

$$P(J_{ij}) \propto \frac{1}{2} \delta(J_{ij} - 1) + \frac{1}{2} \delta(J_{ij} + 1) \quad (1.9)$$

Quantidades extensivas de interesse devem ser mediadas com as distribuições anteriores, por exemplo a energia livre:

$$\mathcal{F}(T) = \int F_J P(J_{ij}) dJ_{ij} \quad (1.10)$$

$$= -kT \int \ln Z_J(T) P(J_{ij}) dJ_{ij}. \quad (1.11)$$

Notar que é o logaritmo da função de partição que tem que ser mediado. A necessidade de mediar $\ln Z$ acarreta algumas dificuldades técnicas que podem ser contornadas com o uso do *truque das réplicas* [10, 11, 12, 13].

Por tanto, **desordem** é um dos ingredientes fundamentais num vidro de spin. O outro, já presente nas formas de $P(J_{ij})$ consideradas, é a **frustração**. *Frustração quer dizer que não é possível satisfazer todos os vínculos sobre as interações do sistema de forma simultânea*. Considere uma plaqueta quadrada bidimensional. Suponha que três das interações de pares sejam positivas (ferromagnéticas) e que a quarta seja negativa (antiferromagnética). Logo os spins nos quatro vértices da plaqueta tenderão a ficar paralelos em torno das ligações negativas (que minimizam a energia) e anti-paralelos em torno das ligações positivas, de acordo com a forma da energia (1.7). É fácil verificar que quando a plaqueta apresenta um número ímpar de interações negativas não será possível satisfazer as quatro simultaneamente (ver figura 1.6).

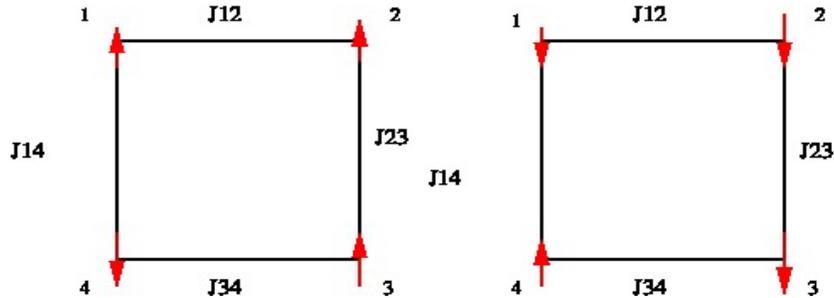


Figura 1.6: Vidro de spin: duas configurações frustradas na rede quadrada.

Este é um exemplo simples de frustração. Uma consequência imediata da presença de frustração é o aparecimento de um número muito grande de estados quase-degenerados com energias muito próximas. A degenerescência é tanto maior quanto maior é o tamanho do sistema. No limite termodinâmico surgem um número enorme de estados metaestáveis, e dinâmica lenta será uma consequência lógica da presença de frustração. A superfície de energia do sistema pode ser vista como sendo *rugosa*, com muitos mínimos locais, máximos locais e pontos de sela, num espaço multidimensional, todos estes são ingredientes básicos de um sistema complexo.

A presença de frustração e desordem impedem o sistema de se ordenar ferromagneticamente a temperaturas baixas, e por tanto a magnetização global de equilíbrio é zero num vidro de spin. No entanto, existe uma temperatura T_c de baixo da qual os spins ficam congelados durante escalas de tempo muito longas, e se pode observar uma outra classe de ordem, a **ordem vidro de spin**. Já que para $T < T_c$ os spins ficam congelados muito tempo se espera que as magnetizações

locais sejam não nulas nesta região: $m_i = \langle S_i \rangle \neq 0$. Também a função de correlação spin-spin apresentará sinais aleatórios causados pela desordem, mas o valor quadrático deverá ser finito apresentando um decaimento exponencial na região não-crítica :

$$\langle S_i S_j \rangle^2 \propto \exp(-|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|/\xi_{SG}) \quad (1.12)$$

As correlações espaciais serão finitas porque os spins estão praticamente congelados e decaem exponencialmente com um comprimento de correlação característico, ξ_{SG} . ξ_{SG} cresce a medida que $T \rightarrow T_c^+$ e existe evidência de que diverge em T_c junto com os tempos de relaxação, implicando uma transição de fase vidro de spin.

Capítulo 2

Fenomenologia da dinâmica lenta

2.1 Observáveis e medias estatísticas

Duas classes fundamentais de observáveis dependentes do tempo, que fornecem informações diferentes, são os que dependem só de um tempo e os que dependem de dois tempos. Estes últimos permitem obter informação muito mais precisa sobre a dinâmica fora do equilíbrio. Observáveis que dependem só de um tempo são, por exemplo, o parâmetro de ordem $\phi(t)$ ou correlações no regime estacionário $C(t)$. *Em sistemas com desordem*, estas quantidades decaem a valores assintóticos de equilíbrio tipicamente com leis de potência:

$$\langle \phi(\vec{x}, t) \rangle = \phi_{eq}(\vec{x}) + c t^{-\alpha}. \quad (2.1)$$

Esta relaxação é característica da dinâmica lenta, e a média é uma média temporal sobre diferentes caminhos possíveis da dinâmica estocástica. Funções mais interessantes são as que dependem de dois tempos, como a função de correlação de dois pontos:

$$C(\vec{x}, \vec{x}', t, t') = \langle \phi(\vec{x}, t) \phi(\vec{x}', t') \rangle \quad (2.2)$$

que representa a correlação entre os valores do parâmetro de ordem no ponto \vec{x} ao tempo t , com o respectivo valor no ponto \vec{x}' ao tempo t' . Se o sistema apresentar invariância por translações espaciais, então $C(\vec{x}, \vec{x}', t, t') = C(\vec{x} - \vec{x}', t, t')$, como é o caso numa fase ordenada homogênea ou em sistemas desordenados em geral. No equilíbrio, esta correlação decairá a algum valor característico, tipicamente ao produto das médias do parâmetro de ordem nos pontos considerados, uma vez que ϕ se descorrelaciona a tempos grandes. Se estamos interessados em estudar

apenas as flutuações respeito dos valores de equilíbrio definimos a **função de correlação conectada de dois pontos**:

$$C_c(\vec{x}, \vec{x}', t, t') = \langle \phi(\vec{x}, t) \phi(\vec{x}', t') \rangle - \langle \phi(\vec{x}, t) \rangle \langle \phi(\vec{x}', t') \rangle \quad (2.3)$$

Se estamos interessados apenas nas dependências temporais num mesmo ponto podemos fazer $\vec{x} = \vec{x}'$ e definir a **função de auto-correlação**:

$$C_s(t, t') = \int d^d \vec{x} C(\vec{x}, t, t') \quad (2.4)$$

Definindo a transformada de Fourier da variável $\phi(\vec{x}, t)$ como:

$$\phi(\vec{k}, t) = \int d^d \vec{x} \phi(\vec{x}, t) e^{-i\vec{k} \cdot \vec{x}} \quad (2.5)$$

e a transformada de Fourier inversa na forma:

$$\phi(\vec{x}, t) = \frac{1}{(2\pi)^d} \int d^d \vec{k} \phi(\vec{k}, t) e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}}, \quad (2.6)$$

se obtém o **fator de estrutura dinâmico**:

$$S(\vec{k}, t, t') = \int d^d \vec{x} \int d^d \vec{x}' C(\vec{x}, \vec{x}', t, t') e^{-i\vec{k} \cdot (\vec{x} - \vec{x}')}. \quad (2.7)$$

O fator de estrutura é uma quantidade acessível diretamente em experimentos, por exemplo, de espalhamento de nêutrons, nos quais este se pode escrever em função da seção de choque dos nêutrons.

Outras quantidades importantes são as respostas. Se o sistema está sujeito a uma perturbação ou campo externo $h(\vec{x}, t)$, o Hamiltoniano do sistema será modificado por um termo do tipo $\Delta H = - \int d^d x h(\vec{x}, t) \phi(\vec{x}, t)$. A **resposta linear** do sistema no ponto \vec{x} no instante t quando se aplica uma perturbação δh no ponto \vec{x}' no instante t' é dada por:

$$R(\vec{x}, \vec{x}', t, t') = \left. \frac{\delta \langle \phi(\vec{x}, t) \rangle}{\delta h(\vec{x}', t')} \right|_{h(\vec{x}, t)=0} \quad (2.8)$$

A causalidade impoe que $R(\vec{x}, \vec{x}', t, t') = 0$ se $t < t'$. Uma quantidade relacionada é a *resposta integrada*, que corresponde à resposta do sistema a uma perturbação aplicada *durante* um intervalo de tempo $t - t'$, e que se define:

$$\chi(\vec{x}, \vec{x}', t, t') = \int_{t'}^t ds R(\vec{x}, \vec{x}', t, s) \quad (2.9)$$

Em particular, num sistema magnético, uma quantidade de interesse experimental direto é a *magnetização termo-remanescente*, que é a magnetização que o sistema tem depois de ter estado sujeito a um campo magnético externo h entre os tempos inicial e um dado tempo de espera t_w :

$$M(\vec{x}, t, t_w) = h \int d^d x' \int_0^{t_w} ds R(\vec{x}, \vec{x}', t, s), \quad (2.10)$$

onde consideramos h constante e homogêneo.

2.2 Memória e aging

Fica claro que a relaxação para o equilíbrio em sistemas vítreos é muito lenta e como consequência estes sistemas permanecem fora do equilíbrio durante escalas de tempo muito longas a baixas temperaturas, provavelmente durante todo o tempo que dura uma observação experimental, e por tanto nos enfrentamos com um complicado problema dinâmico para o qual a mecânica estatística de equilíbrio não será de muita utilidade.

Do ponto de vista da fenomenologia, duas características que definem a dinâmica de um sistema vítreo são a **memória** e o **aging** (envelhecimento). No contexto da dinâmica lenta, o significado destas palavras é claro quando consideramos quantidades a dois tempos, como correlações e respostas. Por exemplo, a função de autocorrelação a dois tempos para um sistema de spins se define como:

$$C(t, t') = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N S_i(t) S_i(t'), \quad (2.11)$$

e consideremos $t \geq t'$. Esta função mede como o sistema se afasta de si mesmo durante a evolução temporal. Em um experimento típico, o sistema é preparado num estado de alta temperatura, e logo subitamente resfriado para uma temperatura abaixo da transição líquido- sólido, ou paramagnética-ferromagnética. Assim é deixado relaxar até um tempo $t' = t_w$, chamado **tempo de espera** (waiting time). Em t_w se começam a medir as correlações até um tempo t . Este é um experimento onde se mede o comportamento do sistema fora do equilíbrio, o caminho para o equilíbrio (ver figura 2.1).

Na figura, as diferentes curvas correspondem a tempos de espera diferentes. O fato delas não colapsarem umas acima das outras é consequência do sistema estar fora do equilíbrio. Na dinâmica estacionária ou de equilíbrio as funções de

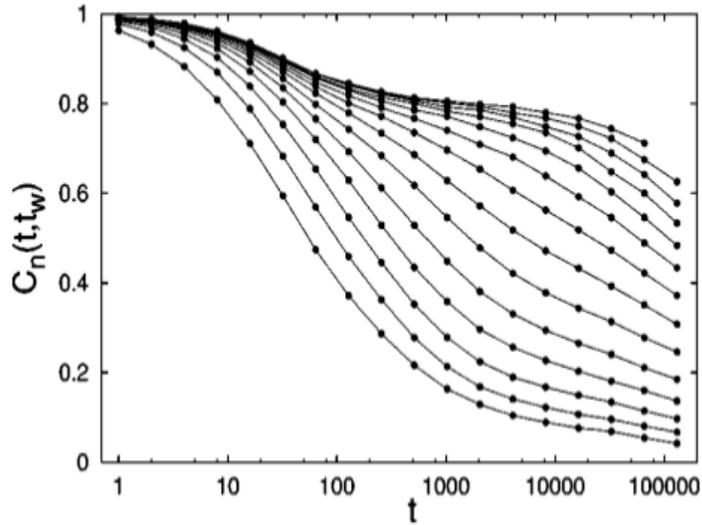


Figura 2.1: Autocorrelações de densidade após um resfriamento rápido no Gás de Rede Frustrado [16]. Os tempos de espera vão de 2^5 (curva inferior) até 2^{17} (curva superior).

dois tempos dependem somente da diferença entre os tempos $C(t, t') = C(t - t')$. No caso fora do equilíbrio, a invariância por translações temporais é quebrada. Outra conclusão imediata é que a dinâmica, ou o estado instantâneo do sistema depende de toda a história dinâmica ou, em outras palavras, *é importante não somente o tempo que passou desde que começamos a medir, mas também o instante preciso no qual se deu início as medidas*, ou seja t_w . Na Fig. 2.1 podemos ver que se o tempo de espera é pequeno (curvas inferiores), as correlações decaem rapidamente, o sistema rapidamente se afasta da configuração na qual estava em $t = t_w$. Mas para tempos de espera grandes, as correlações inicialmente apresentam um decaimento mais ou menos rápido até um *plateau*, num valor bastante alto de $C(t, t_w)$. Pensando em termos do espaço de fases acessível ao sistema, é como se este ficasse preso em uma região pequena, limitada, do espaço total. Quando o sistema relaxa no plateau permanece nessa região por um tempo considerável, e podemos pensar que a ergodicidade está quebrada. Mas se aguardamos o suficiente, finalmente as correlações começam a decair novamente até um valor final assintótico, e a ergodicidade é restaurada. Podemos ver na figura que este regime de queda final começa em tempos cada vez maiores a medida que o tempo de es-

pera aumenta. Podemos dizer que quanto mais velho é o sistema (medindo a idade pelo valor do tempo de espera), menor a probabilidade que flua livremente no espaço de fases, e conseqüentemente que se descorrelacione, ou em outras palavras, o sistema **envelhece** (ages).

Em um sistema desordenado, podemos imaginar este processo como a *evolução numa superfície de energia rugosa*. Durante a escala de tempo t_w o sistema entra numa bacia de atração correspondente a um mínimo local da energia livre. Quanto maior t_w , mais tempo o sistema ficará preso no vale correspondente. Por tanto, se t_w for muito grande, o sistema passará um tempo grande relaxando dentro de uma bacia, como se estivesse em **quase-equilíbrio**. Este comportamento se reflete na função de correlação a dois tempos: neste regime de t_w grande e $t - t_w \ll t_w$ a invariância por translações temporais é satisfeita e a dinâmica é estacionária. Neste regime temporal a dependência com t_w é irrelevante, não se observa nenhum efeito de memória na dinâmica, é uma dinâmica de quase-equilíbrio. O decaimento para o plateau geralmente acontece em forma algébrica:

$$C(t - t_w) \approx q_{EA} + c t^{-\alpha} \quad (2.12)$$

onde notamos que a correlação decai neste regime para o valor do parâmetro de Edwards-Anderson. A temperaturas muito baixas, para poder sair da bacia ou vale no qual se encontra, o sistema deverá normalmente superar **barreiras de energia** consideravelmente grandes. As escalas de tempo típicas para este **processo ativado** são exponenciais:

$$\tau \propto \exp(\Delta E/kT), \quad (2.13)$$

conhecida *lei de Arrhenius*. Depois de tempos nesta escala o sistema consegue escapar do vale e sair a explorar o restante do espaço de fases, e a correlação decai. Este regime final corresponde a tempos $t - t_w \gg t_w$. Aqui podemos notar que a dinâmica não é mais estacionária, se diz que *o sistema caiu fora do equilíbrio*, embora ele nunca chegou realmente lá. Toda a evolução observada corresponde a uma dinâmica fora do equilíbrio.

Neste regime final podemos ainda notar que, para tempos de espera grandes, o decaimento no regime fora do equilíbrio é muito semelhante para diferentes t_w . A medida que t_w aumenta o sistema mergulha mais e mais na superfície de energia rugosa. Estudos analíticos em modelos simples indicam que, no regime de aging, as correlações obedecem uma *lei de escala nos tempos*, da forma:

$$C(t, t_w) = f\left(\frac{h(t)}{h(t_w)}\right) \quad (2.14)$$

com $h(t)$ uma função de t monótona crescente e $f(x)$ uma função de escala. No caso mais simples, somente uma escala temporal é relevante, além da escala de equilíbrio. Este caso corresponde ao chamada *aging simples*:

$$C(t, t_w) = \mathcal{C}(t/t_w) \quad (2.15)$$

Neste caso as curvas para os diferentes t_w podem ser colpasadas em uma curva mestra graficando $C(t, t_w)$ em função de t/t_w . Este comportamento de escala é observado, por exemplo, no processo de crescimento de domínios, no qual a dinâmica lenta se deve ao crescimento lento de paredes de domínio que apresentam um tamanho ou comprimento característico a tempos grandes [1]. Também em alguns modelos de vidros estruturais é observado um comportamento de escala com t/t_w , por exemplo nos modelos de vidros de spin com vínculo esférico [25, 26].

Nos casos mais complexos, quando aparece uma *distribuição* completa de tempos característicos de relaxação, como no modelo SK, não é mais possível escalar as correlações com uma expressão simples envolvendo apenas dois tempos, como as vistas acima. Seria necessário considerar diferentes funções $h(t)$, uma para cada escala temporal.

A fenomenologia observada na função de autocorrelação de um vidro de spin pode ser resumida nas seguintes propriedades analíticas:

- **Quebra fraca da ergodicidade** (weak ergodicity breaking):

$$\lim_{t' \rightarrow \infty} C(t, t') = q_{EA} + C_{est}(t - t') \quad (2.16)$$

Esta relação nos diz que a medida que o tempo de espera aumenta, a função de autocorrelação desenvolve um plateau no valor q_{EA} , que é o valor do parâmetro de Edwards-Anderson. O plateau então é alcançado para tempos t' grandes em relação com a diferença de tempos $t - t'$. Quando estes tempos são comparáveis acontece um crossover entre uma dinâmica estacionária e um regime posterior não-estacionário, o regime de aging, no qual as correlações eventualmente vão para zero. Isto reforça a idéia de que durante a relaxação no plateau o sistema se encontra num estado de quase-equilíbrio dentro de um vale, onde a dinâmica é invariante por translações temporais ou estacionária. O tempo característico onde acontece o crossover entre as duas dinâmicas depende do tempo de espera, e em geral do modelo. A relação anterior se complementa com as seguintes:

$$\lim_{t-t' \rightarrow \infty} C_{est}(t - t') = 0 \quad (2.17)$$

e

$$\lim_{t-t' \rightarrow \infty} \lim_{t' \rightarrow \infty} C(t, t') = q_{EA} \quad (2.18)$$

que corresponde ao valor assintótico no equilíbrio da função de auto-correlação. Ainda:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} C(t, t') = 0 \quad \text{para } t' \text{ finito.} \quad (2.19)$$

A existência de dois regimes bem definidos nas auto-correlações indicam a existência de pelo menos duas escalas temporais importantes no sistema. O número de escalas temporais, ou escalas de correlação, depende do modelo, um caso extremo sendo o modelo SK, que apresenta um número infinito de escalas de correlação. O termo *quebra fraca de ergodicidade* se refere ao fato que, no regime quase-estacionário, o sistema parece evoluir numa região do espaço das fases de “tamanho” proporcional a q_{EA} , ou seja, a ergodicidade parece quebrada. No entanto, depois de um tempo de crossover, que depende do tempo de espera t' , o sistema “escapa” dessa região e as correlações relaxam a zero. Ou seja, a quebra de ergodicidade é “fraca”.

De forma geral, é possível decompor a função de autocorrelação em duas partes, uma estacionária e outra de aging, na forma:

$$C(t, t') = C_{est}(t - t') + C_{ag}(t, t') \quad (2.20)$$

Além dos vidros de spin, os outros modelos descritos antes também apresentam o cenário de quebra fraca da ergodicidade. Por exemplo no problema de crescimento de domínios, o regime estacionário corresponde à dinâmica rápida de flutuações térmicas dentro dos domínios já formados, enquanto o regime de não-equilíbrio ou aging corresponde ao processo de crescimento propriamente dito das paredes dos domínios, que é um processo com dinâmica lenta. No caso dos vidros estruturais, a dinâmica estacionária corresponde a de vibrações da partículas dentro de “gaiolas” formadas pelas vizinhas, enquanto que o regime fora do equilíbrio corresponde a relaxação estrutural onde as gaiolas se desmancham e o sistema como um todo se reestrutura através de um processo altamente cooperativo entre as partículas. O mesmo acontece em sistemas granulares quando são perturbados externamente por uma perturbação fraca.

- **Memória fraca de longo prazo:**

De forma geral, a função resposta pode ser decomposta em dois termos,

semelhante ao feito com as correlações:

$$R(t, t') = R_{est}(t - t') + R_{ag}(t, t') \quad (2.21)$$

onde $R_{est}(t - t') \equiv \lim_{t' \rightarrow \infty} R(t, t')$. Para tempos grandes a resposta vai a zero:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} R(t, t') = 0 \quad (2.22)$$

Também

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \lim_{t' \rightarrow \infty} R(t, t') = 0 \quad (2.23)$$

o que implica

$$\lim_{t \rightarrow \infty} R_{est}(t - t') = 0 \quad \text{e} \quad \lim_{t \rightarrow \infty} R_{ag}(t, t') = 0. \quad (2.24)$$

As respostas vão a zero para tempos suficientemente grandes. No entanto, em diferentes modelos se verifica que a resposta integrada preserva uma dependência explícita no tempo de espera. Isto implica uma *memória de longo prazo fraca*, o sistema preserva uma memória “média” (na resposta integrada) do seu passado. No entanto ela é fraca porque as respostas finalmente decaem a zero, só a resposta integrada apresenta uma contribuição finita a tempos grandes.

2.3 O Teorema de Flutuação-Dissipação

O *Teorema de Flutuação-Dissipação* (TFD) diz respeito a uma série de relações, muito gerais, entre correlações e respostas de sistemas estatísticos em equilíbrio. Existem relações entre as quantidades estáticas, por exemplo, a resposta de um observável a um pequeno campo externo aplicado é proporcional as flutuações em equilíbrio do observável:

$$\chi = \left. \frac{\delta \langle O \rangle_h}{\delta h} \right|_{h=0} = \beta \langle (O - \langle O \rangle)^2 \rangle \quad (2.25)$$

onde $\beta = 1/k_B T$ é a inversa da temperatura de equilíbrio e $\langle O \rangle_h$ quer dizer o valor médio de equilíbrio de um observável O em presença de um pequeno campo externo h . Esta é uma forma do *Teorema de Flutuação-Dissipação estático*.

Relações semelhantes existem entre as correspondentes quantidades dinâmicas, dependentes do tempo. Na dinâmica de equilíbrio, estacionária, o TFD relaciona correlações e as respostas correspondentes na forma:

$$R(\tau) = \beta \frac{dC(\tau)}{d\tau}, \quad (2.26)$$

onde T é a temperatura do banho térmico. Estas relações são independentes de modelos particulares, são satisfeitas para qualquer sistema em equilíbrio térmico. Escrevendo as correlações e respostas explicitamente como funções de dois tempos o TFD se escreve:

$$R(t, t_w) = \frac{1}{T} \frac{\partial C(t, t_w)}{\partial t_w} \quad (2.27)$$

onde $R(t, t_w) = R(t - t_w)$ e $C(t, t_w) = C(t - t_w)$.

Em sistemas fora do equilíbrio estas relações não são válidas em geral. Em sistemas com dinâmica lenta se encontrou que existe uma generalização muito interessante do TFD para os diferentes regimes temporais da dinâmica. Enquanto no regime de quase-equilíbrio o TFD se satisfaz, indicando que neste sentido o sistema parece estar em equilíbrio, no regime de aging se observa uma violação do teorema, com uma relação generalizada entre correlações e respostas da forma:

$$R(t, t_w) = \frac{X(t, t_w)}{T} \frac{\partial C(t, t_w)}{\partial t_w} \quad (2.28)$$

Uma nova função aparece, $X(t, t_w) = TR(t, t_w) / \frac{\partial C(t, t_w)}{\partial t_w}$, chamada *razão de flutuação-dissipação*. Podemos obter informação sobre esta função analisando, por exemplo, a dependência da magnetização termo-remanescente, que é uma resposta integrada acessível experimentalmente:

$$\begin{aligned} M(t, t_w) &= h \int_{t_w}^t ds R(t, s) \\ &= \frac{h}{T} \int_{t_w}^t X(t, s) \frac{\partial C(t, s)}{\partial s} ds \\ &= \frac{h}{T} \int_{t_w}^t X(t, s) dC(t, s) \end{aligned} \quad (2.29)$$

Em modelos de campo médio e modelos finitos estudados via simulações se verificou que a função $X(t, s)$ depende dos tempos somente através da correlação, ou

seja, $X(t, s) = X(C(t, s))$, o que permite escrever:

$$M(t, t_w) = \frac{h}{T} \int_{C(t, t_w)}^{C(t, t)} X(C) dC \quad (2.30)$$

Se graficarmos, para cada t_w , um curva paramétrica de $T M(t, t_w)/h$ em função de $C(t, t_w)$ utilizando t como parâmetro, a função $X(t, t_w)$ é obtida como a declividade dessa curva paramétrica, ou:

$$\frac{X(C)}{T} = \frac{1}{h} \frac{dM}{dC} \quad (2.31)$$

Na figura 2.2 podemos ver a forma de um gráfico paramétrico obtido de simulações do gás de rede frustrado (FILG) e do modelo de Edwards-Anderson em $d=3$. Os resultados do FILG apontam para dois regimes no comportamento da resposta

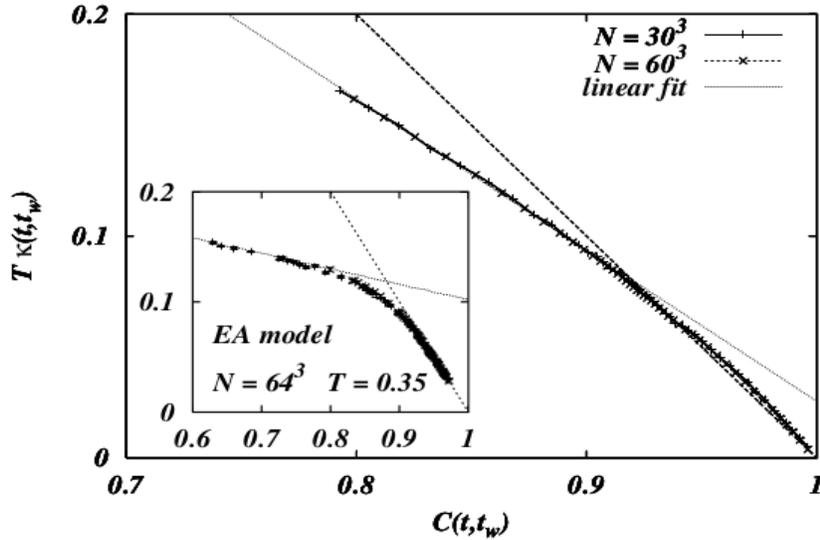


Figura 2.2: A resposta integrada versus as autocorrelações de densidade no modelo de gás de rede frustrado (FILG) [17]. No inset as curvas correspondentes para o modelo de vidro de spin de EA em $d=3$.

integrada em função da auto-correlação:

- Para $C(t, t_w) \geq q_{EA}$, ou seja, no regime de tempos tais que $t - t_w \ll t_w$, o sistema se encontra no regime de quase-equilíbrio e o TFD é satisfeito.

Neste regime se verifica $X(t, t_w) = 1$ e então da eq.(2.30) obtemos:

$$\frac{T}{h}M(t, t_w) = 1 - C(t, t_w) \quad (2.32)$$

onde se fez $C(t, t) = 1$ para spins de Ising. Ou seja, a resposta integrada de equilíbrio varia linearmente com a correlação, com uma declividade igual a $-h/T$. Esta relação deve ser satisfeita por qualquer sistema em equilíbrio.

- Quando $C(t, t_w)$ cai por debaixo de q_{EA} , ou seja no regime de tempos $t - t_w \gg t_w$, o sistema se encontra no regime de aging, fora do equilíbrio, e o TFD não é mais satisfeito. No caso do FILG se observa outro regime linear, indicando que $X(t, t_w)$ ainda é uma constante, porém diferente de 1. Uma pergunta que se coloca imediatamente é se este novo valor da função X está dando alguma informação sobre o regime de aging da dinâmica. Notemos no inset da figura que o resultado para o vidro de spin de EA em $d=3$ é semelhante, embora o segundo regime linear não está tão bem definido como no caso do FILG. A existência de dois regimes lineares é indicativo da presença de somente duas escalas de tempo importantes na dinâmica de relaxação dos sistemas, a escala da dinâmica de equilíbrio e outra escala característica da queda fora do equilíbrio. Este comportamento é típico de vidros estruturais. No entanto, num vidro de spin sabemos que existe uma distribuição de escalas temporais, associadas com a presença de barreiras de energia cuja altura também é dada por uma distribuição continua. De fato, um gráfico paramétrico para o modelo SK mostra que, além do regime de equilíbrio, onde o TFD é satisfeito, existe uma segunda região onde a curva da resposta integrada apresenta uma variação continua da declividade, indicando neste caso a presença de toda uma variedade de tempos característicos. A interpretação do resultado para o modelo EA em dimensão finita é ainda motivo de controvérsia no sentido de se existem mais de duas escalas no modelo, como no limite de campo médio (SK) ou se somente duas escalas estão presentes, como nos vidros estruturais. Outros sistemas que apresentam somente dois regimes são os sistemas que ordenam via um processo de crescimento de domínios, como um ferromagneto. Neste caso, o segundo regime tende a uma linha reta horizontal quando $t_w \rightarrow \infty$. Ou seja $\lim_{t_w \rightarrow \infty} X(t, t_w) = 0$.

Os comportamentos diferentes observados nos gráficos paramétricos para vidros, vidros de spin, sistemas com crescimento de domínios e outros permitem

definir algo semelhante as “classes de universalidade” dos sistemas, de acordo com o seu comportamento dinâmico fora do equilíbrio. Ou seja, podemos usar o gráfico paramétrico para classificar um sistema particular como pertencente a uma família de sistemas com características dinâmicas semelhantes.

Finalmente se observamos a forma da relação modificada do TFD (2.28) surge imediatamente a comparação com a forma original do teorema, no sentido de sugerir uma interpretação física para a função $X(t, t_w)$. De fato, uma possibilidade muito interessante é associar uma **temperatura efetiva** ao sistema no regime de aging, que seria definida por:

$$T_{eff}(t, t_w) = \frac{T}{X(t, t_w)} \quad (2.33)$$

Com esta definição a forma original do TFD é recuperada e se dá um sentido físico à função X . De fato, no caso de um sistema com duas escalas de tempo, tem-se demonstrado que a T_{eff} definida acima corresponde a uma temperatura física, que pode ser medida por um termômetro *acoplado aos modos lentos do sistema*. Notemos que esta temperatura efetiva depende do tempo, já que o sistema está fora do equilíbrio. No caso dos sistemas com somente duas escalas, como os vidros, o valor de X assintótico, quando $t_w \rightarrow \infty$ depois de fazer $N \rightarrow \infty$ é uma constante diferente de 1, e por tanto o sistema fica para sempre no regime de aging com um valor fixo da temperatura efetiva. No caso de um vidro de spin como o modelo SK, que apresenta uma função X não trivial, dependente de muitas escalas temporais, teríamos uma evolução temporal da temperatura efetiva, a medida que o sistema mergulha mais e mais em estados mais próximos do equilíbrio.

Capítulo 3

Sistemas em contato com reservatórios: o formalismo de Langevin

Após a descrição qualitativa da fenomenologia básica da dinâmica lenta, o próximo passo é modelar os sistemas para poder prever os comportamentos observados. De forma geral, estamos interessados em modelar a dinâmica de um sistema de partículas em contato com um banho térmico em equilíbrio. A dinâmica lenta provém da interação entre o sistema e o ambiente, ou reservatório, e da impossibilidade do sistema para se equilibrar rapidamente na temperatura do ambiente. De forma geral, desde uma perspectiva hamiltoniana, o Hamiltoniano total (sistema + reservatório) estará composto dos seguintes termos:

$$\mathcal{H}_{TOT} = \mathcal{H}_{SIS} + \mathcal{H}_{AMB} + \mathcal{H}_{INT} + \mathcal{H}_{CON} \quad (3.1)$$

Para começar a discussão vamos considerar o caso de uma única partícula de massa M em uma dimensão espacial, que chamaremos de sistema, em contato com um reservatório térmico. O conteúdo dos termos no hamiltoniano total é o seguinte:

$$\mathcal{H}_{SIS} = p^2/(2M) + V(q) \quad (3.2)$$

é o Hamiltoniano do sistema isolado, com q a coordenada generalizada da partícula e p o momento conjugado. \mathcal{H}_{AMB} é o hamiltoniano do ambiente ou reservatório. Uma escolha simples e muito comum para este hamiltoniano é considerar

ao banho térmico como um conjunto de N osciladores harmônicos independentes:

$$\mathcal{H}_{AMB} = \sum_{i=1}^N \left(\frac{p_i^2}{2m_i} + \frac{m_i w_i^2}{2} x_i^2 \right), \quad (3.3)$$

sendo m_i e w_i as massas e frequências dos osciladores. O terceiro termo representa a interação entre a partícula e o banho térmico. A escolha mais simples é uma interação bilinear entre a partícula e os osciladores, na forma:

$$\mathcal{H}_{INT} = q \sum_{i=1}^N c_i x_i \quad (3.4)$$

onde c_i 's são constantes de interação. Finalmente o quarto termo (contra-termo) se inclui normalmente para eliminar uma possível instabilidade na energia potencial do sistema como consequência do acoplamento com o banho térmico. Este termo se pode definir na forma $\frac{1}{2} \sum_i \frac{c_i^2}{m_i w_i^2} q^2$.

Uma vez definido o Hamiltoniano do sistema total, podemos notar que as equações de movimento para as partículas do banho térmico são facilmente integráveis. Após a integração, o espaço de fases fica reduzido, correspondente somente às variáveis dinâmicas do sistema, que agora estará trocando energia com o ambiente. Formalmente, a equação de movimento efetiva após integrar os graus de liberdade do ambiente é a chamada **equação de Langevin**.

O formalismo introduzido originalmente por P. Langevin em 1908 para descrever o movimento browniano de uma partícula consiste essencialmente em separar as forças como tendo duas diferentes origens: *forças deterministas*, que dão lugar ao movimento em grande escala do sistema, e *forças estocásticas*, provenientes da interação do sistema com o ambiente, que representam uma espécie de ruído na dinâmica, uma componente aleatória ou estocástica. Além das forças deterministas (externas) e estocásticas, a descrição de Langevin inclui também um termo dissipativo, em geral proporcional à velocidade de deriva do sistema, que provém também da interação com o ambiente e da lenta troca de energia com o mesmo enquanto o sistema tenta se equilibrar na temperatura do banho térmico. Finalmente, a dinâmica de Langevin descreve as propriedades *estatísticas* do sistema, já que, como veremos, o ambiente é considerado em termos de suas propriedades estatísticas, e não com sua dinâmica hamiltoniana exata, já que se considera o banho térmico como sendo um sistema em equilíbrio termodinâmico a uma temperatura fixa.

Com os termos definidos acima, o Hamiltoniano total (sistema + banho) é dado por:

$$\mathcal{H} = \frac{p^2}{2M} + V(q) + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \frac{c_i^2}{m_i w_i^2} q^2 + \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m_i} + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N m_i w_i^2 x_i^2 - \sum_{i=1}^N c_i q x_i \quad (3.5)$$

As equações de Hamilton para a partícula são:

$$\begin{aligned} \dot{q}(t) &= \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p} = \frac{p(t)}{M} \\ \dot{p}(t) &= -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q} = -\frac{dV(q)}{dq(t)} - \sum_{i=1}^N \frac{c_i^2}{m_i w_i^2} q(t) + \sum_{i=1}^N c_i x_i(t) \end{aligned} \quad (3.6)$$

e as correspondentes equações de movimento para cada componente do banho térmico:

$$\begin{aligned} \dot{x}_i(t) &= \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} = \frac{p_i(t)}{m_i} \\ \dot{p}_i(t) &= -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial x_i} = -m_i w_i^2 x_i(t) + c_i q(t), \end{aligned} \quad (3.7)$$

que correspondem a um conjunto de osciladores harmônicos independentes forçados. A solução geral do sistema de equações (3.7) é:

$$x_i(t) = x_i(0) \cos(w_i t) + \frac{p_i(0)}{m_i w_i} \sin(w_i t) + \frac{c_i}{m_i w_i} \int_0^t ds \sin(w_i(t-s)) q(s), \quad (3.8)$$

onde $x_i(0)$ e $p_i(0)$ as posições e momentos iniciais dos osciladores do ambiente no instante em que o sistema é posto em contato com o banho em $t = 0$. Substituindo esta última expressão na equação de movimento para o sistema (3.6) e integrando por partes, se obtém:

$$\dot{p}(t) = -\frac{dV(q)}{dq(t)} + \xi(t) - \int_0^t ds \gamma(t-s) \dot{q}(s) \quad (3.9)$$

onde o núcleo $\gamma(t)$ é dado por:

$$\gamma(t) = \sum_{i=1}^N \frac{c_i^2}{m_i w_i^2} \cos(w_i t) \quad (3.10)$$

e $\xi(t)$ é uma força dependente do tempo dada por:

$$\xi(t) = \sum_{i=1}^N \frac{c_i}{m_i w_i} p_i(0) \sin(w_i t) + \sum_{i=1}^N c_i x_i(0) \cos(w_i t) - q(0) \sum_{i=1}^N \frac{c_i^2}{m_i w_i^2} \cos(w_i t) \quad (3.11)$$

O caráter aleatório da força $\xi(t)$ é dado pela aleatoriedade nos valores iniciais das posições e momentos das partículas do ambiente, que se assumem obtidas a partir de uma distribuição de equilíbrio à temperatura T . Por tanto, considerando que os graus de liberdade do banho térmico obedecem o princípio de equipartição da energia, e que a variável $\xi(t)$ corresponde à soma de um número grande de variáveis aleatórias independentes, esta pode ser considerada como sendo uma variável aleatória com distribuição Gaussiana, com primeiro e segundo momentos dados por:

$$\begin{aligned} \langle \xi(t) \rangle &= 0 \quad \forall t, \\ \langle \xi(t) \xi(t') \rangle &= k_B T \gamma(t - t'). \end{aligned} \quad (3.12)$$

A equação (3.9) é uma **equação de Langevin generalizada**. Notamos a presença de um *atrito retardado*, dado pelo núcleo $\gamma(t - t')$. Desta forma, a evolução da partícula depende da história passada e a dinâmica não é, em geral, markoviana. Outra característica importante é que as correlações do ruído gaussiano são proporcionais ao coeficiente de atrito retardado $\gamma(t - t')$. Esta é uma forma generalizada do Teorema de Flutuação-Dissipação [19].

O comportamento de $\gamma(t - t')$, chamado **núcleo de memória**, depende da natureza das variáveis do ambiente e irá ser determinante do comportamento do sistema. O núcleo de memória é uma função que decai com o tempo, com uma escala de tempo característica τ_ξ . Quando os tempos de observação são da ordem de, ou menores que τ_ξ , o efeito do termo de memória é forte, e se diz que estamos na presença de um **ruído colorido**. No entanto se $t - t' \gg \tau_\xi$ os termos de ruído não apresentam memória, são essencialmente descorrelacionados, e estamos na presença de um **ruído branco**. Neste último caso a função $\gamma(t - t')$ pode ser aproximada por uma função delta de Dirac: $\gamma(t - t') \simeq 2\gamma\delta(t - t')$. Nesta aproximação (que é normalmente correta para sistemas clássicos) a dinâmica é markoviana.

Então, com diferentes escolhas do banho térmico de osciladores é possível se obter diferentes comportamentos dinâmicos. Uma escolha simples é considerar os osciladores acoplados com a partícula via acoplamentos idênticos $\pm c/\sqrt{N}$, mas com uma distribuição de frequências não trivial, que pode ser considerada

continua no limite $N \rightarrow \infty$. Introduzindo a densidade espectral $I(w)$, podemos escrever o núcleo de memória na forma:

$$\gamma(t - t') = \frac{c^2}{m} \int_0^\infty dw I(w) \frac{\cos(w(t - t'))}{w^2}. \quad (3.13)$$

Por exemplo, no caso de uma distribuição de frequências que cresce com o quadrado até um valor de corte ω_D , como no modelo de Debye de sólido cristalino:

$$I(w) = \frac{w^2}{w_D^3} \theta(w_D - w), \quad (3.14)$$

se obtém:

$$\gamma(t - t') = \frac{c^2}{mw_D^2} \frac{\sin(w_D(t - t'))}{w_D(t - t')}. \quad (3.15)$$

Se a frequência de corte w_D for suficientemente grande podemos aproximar γ por uma função delta de Dirac $\gamma(t - t') = 2\gamma\delta(t - t')$, com $\gamma = c^2\pi/(2mw_D^2)$, e o ruído se reduz ao caso comum de ruído branco ou descorrelacionado.

Uma vez estabelecida a equação de Langevin como um formalismo válido para tratar de sistemas em contato com reservatórios diversos, é possível estender a discussão anterior para o caso de uma partícula para tratar de um sistema de partículas em contato com um banho térmico. Neste caso, haverá uma equação de Langevin por grau de liberdade. No caso de um sistema com N partículas, a descrição será em termos de N equações de Langevin acopladas. É simples incluir na descrição outro tipo de forças, como forças dependentes do tempo, tais como as que aparecem nos problemas com forçados externos, ou ainda forças que não tem sua origem num potencial, como diferentes tipos de forças dissipativas. No caso mais geral podemos então escrever o sistema de equações de Langevin (no caso Markoviano) na forma:

$$\begin{aligned} M \ddot{q}_i(t) + \gamma \dot{q}_i(t) &= -\frac{\partial V(\vec{q})}{\partial q_i(t)} + f_i(t) + f_i^{NP} + \xi_i(t) \\ \langle \xi_i(t) \xi_i(t') \rangle &= 2\gamma k_B T \delta_{ij} \delta(t - t') \quad i = 1, \dots, N. \end{aligned} \quad (3.16)$$

Na equação de Langevin as variáveis dinâmicas são contínuas, geralmente reais. Para poder usar o formalismo dinâmico de Langevin em sistemas com variáveis discretas, como por exemplo no modelo de Ising, é possível relaxar o vínculo binário nos estados dos spins definindo spins contínuos, ou “*soft spins*”, introduzindo um termo no potencial da forma $-u \sum_i (s_i^2 - 1)^2$. A constante u se pode fazer eventualmente tender a infinito, em cujo caso o balanço energético irá favorecer valores dos spins em torno de ± 1 , se aproximando do caso discreto.

Capítulo 4

O modelo SK com vínculo esférico

4.1 Propriedades de equilíbrio termodinâmico

O modelo esférico para um ferromagneto (juntamente com o modelo gaussiano) foi introduzido por Berlin and Kac [20, 21] como uma aproximação ao modelo de Ising. Em lugar do vínculo local de Ising sobre os spins ($S_i^2 = 1$), no caso esférico estes podem tomar quaisquer valores reais $S_i \in \mathfrak{R}$ sujeitos ao vínculo global:

$$\sum_{i=1}^N S_i^2 = N \quad (4.1)$$

O Hamiltoniano do modelo é:

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij} S_i S_j, \quad (4.2)$$

onde J_{ij} são as constantes de interação de pares, e a soma é sobre todos os pares conectados em uma rede ou grafo arbitrário. Na presente discussão iremos considerar o caso completamente conectado, ou seja, com todos os pares i, j incluídos na soma. Neste caso, similar ao modelo de Sherrington e Kirkpatrick de vidro de spin, a aproximação de campo médio corresponde a solução exata do problema. As interações J_{ij} são variáveis aleatórias Gaussianas, distribuídas de acordo a:

$$P(J_{ij}) = (2\pi\sigma^2)^{-1/2} \exp[-(J_{ij} - J_0)^2/2\sigma^2] \quad (4.3)$$

onde $J_0 = J/N$ é o valor médio das interações e $\sigma^2 = J^2/N$ é a variância das mesmas. A normalização com o número de partículas N garante a extensividade da energia, por causa das interações de longo alcance.

A função de partição é [22]:

$$Z = \int_{\sum_i s_i^2 = N} ds_1 \dots ds_N \exp \left(\frac{\beta}{2} \sum_{i,j} J_{ij} s_i s_j \right) \quad (4.4)$$

A integração nas variáveis de spin sobre a hipersfera se pode realizar introduzindo o vínculo através de uma delta de Dirac, resultando em:

$$\begin{aligned} Z &= \int ds_1 \dots ds_N \exp \left(\frac{\beta}{2} \sum_{i,j} J_{ij} s_i s_j \right) \delta \left(N - \sum_i s_i^2 \right) \\ &= \int ds_1 \dots ds_N \exp \left(\frac{\beta}{2} \sum_{i,j} J_{ij} s_i s_j \right) \frac{1}{2\pi i} \int_{-i\infty}^{+i\infty} du \exp \left[u \left(N - \sum_i s_i^2 \right) \right] \end{aligned} \quad (4.5)$$

Notamos que a integral nos spins é Gaussiana, e por tanto tem solução exata. Para poder inverter a ordem das integrações temos que garantir que as integrais sejam absolutamente convergentes. Para garantir que a forma quadrática nos spins seja definida positiva fazemos $\sum_{i,j} J_{ij} s_i s_j = N\alpha - \alpha \sum_i s_i^2 + \sum_{i,j} J_{ij} s_i s_j$, que é satisfeita em virtude do vínculo esférico. Agora fazendo α real, positivo e suficientemente grande podemos garantir a convergência absoluta da integral. Trocando a ordem de integração e fazendo $u + \alpha \rightarrow z$ obtemos:

$$Z = \frac{1}{2\pi i} \int_{\alpha-i\infty}^{\alpha+i\infty} dz \exp(zN) \int ds_1 \dots ds_N \exp \left[-z \sum_i s_i^2 + \frac{\beta}{2} \sum_{i,j} J_{ij} s_i s_j \right] \quad (4.6)$$

onde $z = \alpha$ é uma linha vertical no plano complexo a direita de todas as singularidades do integrando.

Antes de realizar a integração nos spins, notamos que como a matriz de interações é simétrica pode ser diagonalizada por uma transformação ortogonal. Sejam $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_N$ os N autovalores reais da matriz de interação \mathbf{J} , e $\mathbf{V}_1, \mathbf{V}_2, \dots, \mathbf{V}_N$ os correspondentes autovetores. Os autovetores satisfazem a condição de ortogonalidade $\mathbf{V}_k^T \mathbf{V}_l = \delta_{kl}$, onde \mathbf{V}_k (\mathbf{V}_k^T) é um vetor coluna (fila). Os autovetores satisfazem o sistema linear:

$$\mathbf{J} \mathbf{V}_k = \lambda_k \mathbf{V}_k, \quad k = 1, \dots, N, \quad (4.7)$$

A matriz ortogonal cujas colunas são os autovetores $\mathbf{V} = (\mathbf{V}_1, \mathbf{V}_2, \dots, \mathbf{V}_N)$ diagonaliza \mathbf{J} :

$$\mathbf{V}^T \mathbf{J} \mathbf{V} = \mathbf{D}, \quad \mathbf{V}^T \mathbf{V} = \mathbf{V} \mathbf{V}^T = \mathbf{I}, \quad (4.8)$$

onde \mathbf{D} é a matriz diagonal cujos elementos são os autovalores $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_N$. O vetor $\mathbf{y} = \mathbf{V}^T \mathbf{s}$ é a projeção do vetor de estado \mathbf{S} na base de autovetores de \mathbf{J} . Então:

$$\sum_{i,j} s_i J_{ij} s_j = \mathbf{s}^T \cdot \mathbf{J} \cdot \mathbf{s} = \mathbf{s}^T \mathbf{V} \mathbf{V}^T \mathbf{J} \mathbf{V} \mathbf{V}^T \mathbf{s} = \mathbf{y}^T \mathbf{D} \mathbf{y} = \sum_j \lambda_j y_j^2. \quad (4.9)$$

O vínculo esférico é invariante frente ao câmbio de base $\sum_i y_i^2 = N$. Por tanto, na base que diagonaliza a matriz de interação, a integral gaussiana se factoriza, resultando:

$$\begin{aligned} \int dy_1 \dots dy_N \exp \left[\sum_j \left(-z + \frac{\beta}{2} \lambda_j \right) y_j^2 \right] &= \prod_{j=1}^N \int_{-\infty}^{+\infty} dy_j \exp \left[- \left(z - \frac{\beta}{2} \lambda_j \right) y_j^2 \right] \\ &= \pi^{N/2} \left[\prod_j \left(z - \frac{\beta}{2} \lambda_j \right) \right]^{-1/2} \\ &= \pi^{N/2} \exp \left[-\frac{1}{2} \sum_j \ln \left(z - \frac{\beta}{2} \lambda_j \right) \right] \end{aligned} \quad (4.10)$$

onde $\text{Re}(z - \beta\lambda_j/2) > 0$ ou equivalentemente $\alpha > \beta|\lambda_{max}|/2$. A função de partição resulta:

$$\begin{aligned} Z_N(\beta) &= \frac{\pi^{N/2}}{2\pi i} \int_{\alpha-i\infty}^{\alpha+i\infty} dz \exp \left[N z - \frac{1}{2} \sum_j \ln (z - \beta\lambda_j/2) \right] \\ &= \frac{\pi^{N/2}}{2\pi i} \int_{\alpha-i\infty}^{\alpha+i\infty} dz e^{N g(z)} \end{aligned} \quad (4.11)$$

onde

$$g(z) = z - \frac{1}{2N} \sum_j \ln (z - \beta\lambda_j/2). \quad (4.12)$$

A integral no plano complexo pode ser resolvida pelo método do ponto de sela quando $N \rightarrow \infty$. A equação de ponto de sela $\left. \frac{\partial g}{\partial z} \right|_{z_s} = 0$ é dada por:

$$1 = \frac{1}{N} \sum_j \frac{1}{2z_s - \beta\lambda_j}. \quad (4.13)$$

Até aqui o cálculo é independente da estrutura particular da matriz de interação J_{ij} . No limite $N \rightarrow \infty$ a equação de ponto de sela fica na forma:

$$1 = \int d\lambda \frac{\rho(\lambda)}{2z_s - \beta\lambda}, \quad (4.14)$$

sendo $\rho(\lambda)$ a distribuição de autovalores da matriz de interação. No caso presente, considerando o termo constante $J_0 = 0$, \mathbf{J} é uma matriz aleatória do ensemble ortogonal Gaussiano (GOE), com elementos dados por (4.3). A densidade de autovalores no limite $N \rightarrow \infty$ é a lei semicircular de Wigner:

$$\rho(\lambda) = \frac{1}{2\pi J^2} \sqrt{(4J^2 - \lambda^2)}, \quad (4.15)$$

com autovalor máximo $\lambda_{max} = 2J$. Para esta distribuição, a equação de ponto de sela tem solução exata:

$$z_s - [z_s^2 - (\beta J)^2]^{\frac{1}{2}} = (\beta J)^2. \quad (4.16)$$

Notamos que, se $z_s \geq |\beta J|$, a equação possui solução real dada por $z_s = \frac{1}{2}[1 + (\beta J)^2]$, que corresponde à fase de alta temperatura. Com a temperatura diminuindo, βJ cresce, até o ponto em que $\beta J = z_s$. Para temperaturas menores a equação anterior não tem solução real. Por tanto, reconhecemos a temperatura da transição de fase no ponto em que $z_s = \beta_c J$. Resolvendo na equação de ponto de sela obtemos que a temperatura crítica corresponde a $T_c = J$.

Da expressão para a função de partição (4.11) podemos obter a energia livre de Helmholtz do modelo:

$$-\beta F(\beta) = \lim_{N \rightarrow \infty} \ln Z_N(\beta), \quad (4.17)$$

que é proporcional a função $g(z)$. De (4.12) notamos que $g(z)$ apresenta uma singularidade, que corresponde a um ponto de ramificação, num valor de z proporcional a metade do máximo autovalor da matriz de interação. Esta singularidade presente na energia livre corresponde a uma transição de fase, que então fica determinada pela condição $z_s = \beta_c \lambda_{max}/2 = \beta_c J$, que corresponde a $T_c = J$, como vimos segundo (4.16).

Para poder analisar o comportamento da energia livre para $T < T_c$ se define o corte sobre o eixo real entre $-\infty$ e z_c . Fora do corte, $g(z)$ é analítica e a integral de contorno solúvel. Para realizar a integral se define um contorno que passe por fora e contorne o corte. Se pode mostrar que o ponto de sela para $T < T_c$ corresponde,

em todo o intervalo de temperaturas, ao valor $z_c = \beta_c \lambda_{max}/2 = 1$. Por tanto, a solução do ponto de sela acima e abaixo da transição de fase é dada por:

$$z_s = \begin{cases} \frac{1}{2}[1 + (\beta J)^2], & T > T_c \\ 1, & T \leq T_c. \end{cases} \quad (4.18)$$

Desta forma se pode determinar a energia livre acima e abaixo da transição [24]:

$$f(T) = \begin{cases} -\frac{J^2}{4T} - \frac{1}{2}T(1 + \ln 2), & T > T_c \\ \frac{1}{2}T \ln\left(\frac{T}{2J}\right) - J + \frac{T}{4}, & T < T_c. \end{cases} \quad (4.19)$$

Incluindo no Hamiltoniano (4.2) um termo de campo magnético externo na forma $\Delta\mathcal{H} = -h \sum_i s_i$, é possível recalculer a energia livre $f(T, B)$ e calcular as médias $m_i = \langle s_i \rangle$ e $m_i^2 = \langle s_i^2 \rangle$. Para $T \geq T_c$ ambas as quantidades se anulam. Na fase vidro de spin, para $T < T_c$ se obtém:

$$\begin{aligned} m_i &= 0 \\ m_i^2 &= 1 - \frac{T}{J}, \end{aligned} \quad (4.20)$$

um resultado típico do comportamento vítreo. O quadrado da magnetização local define o *parâmetro de Edwards-Anderson*, que é o parâmetro de ordem do modelo $q_{EA} = m_i^2$. Vemos neste resultado que a transição da fase de alta temperatura para a fase vidro de spin é contínua, com expoente $\beta = 1/2$, valor correspondente a aproximação de campo médio, que para este modelo resulta exata.

Esta solução é equivalente à solução do modelo SK com simetria de réplicas. No entanto, enquanto uma análise da estabilidade da solução réplica simétrica indicou uma instabilidade no modelo SK, no caso do modelo esférico esta solução é estável. Por tanto o modelo SK esférico apresenta somente dois estados termodinâmicos simétricos a baixas temperaturas, com parâmetros de ordem $\pm q_{EA}$, em oposição ao número exponencial de estados presentes no modelo SK com spins de Ising. Neste sentido o modelo SK esférico é mais parecido a um ferromagneto desordenado e menos a um verdadeiro vidro de spin. No entanto veremos que a dinâmica do modelo é complexa, apresentando relaxações lentas e aging como em outros sistemas desordenados. Porém, da análise da violação do Teorema de Flutuação-Dissipação veremos que o comportamento do modelo se assemelha mais ao que acontece em processos de crescimento de domínios em sistemas com ordem tipo ferromagnética.

4.2 Dinâmica de Langevin

Para introduzir o vínculo esférico na dinâmica é conveniente introduzir um multiplicador de Lagrange dependente do tempo no Hamiltoniano:

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2} \sum_{i \neq j} J_{ij} s_i s_j + \frac{z(t)}{2} \left(\sum_i s_i^2 - N \right) - \sum_i h_i s_i \quad (4.21)$$

onde $z(t)$ tem que ser determinado de forma autoconsistente para impor o vínculo esférico para todo tempo t . h_i é um campo magnético externo. Vamos considerar que os graus de liberdade do banho térmico estão equilibrados na temperatura T . Para isso, é suficiente escolher um dinâmica sem retardo, um ruído branco caracterizando o banho térmico. Como estamos interessados na dinâmica de relaxação desde um estado inicial de alta temperatura para um estado de baixa temperatura o termo de inércia pode ser desprezado, e o sistema de equações de Langevin se reduz a:

$$\frac{\partial s_i}{\partial t} = -\frac{\delta \mathcal{H}}{\delta s_i(t)} + \xi_i(t), \quad i = 1, \dots, N \quad (4.22)$$

com

$$\begin{aligned} \langle \xi_i(t) \rangle &= 0, \\ \langle \xi_i(t) \xi_j(t') \rangle &= 2T \delta_{ij} \delta(t - t'), \end{aligned} \quad (4.23)$$

onde o coeficiente de amortecimento foi absorvido em T e $k_B = 1$. Para o modelo esférico obtemos:

$$\frac{\partial s_i}{\partial t} = \sum_{i \neq j} J_{ij} s_j - z(t) s_i(t) + h_i(t) + \xi_i(t). \quad (4.24)$$

Podemos notar que a expressão anterior corresponde a um sistema linear de N equações diferenciais acopladas para a dinâmica da variável de spin. Em notação matricial o sistema de equações de Langevin se escreve:

$$\frac{\partial \mathbf{S}}{\partial t} = \mathbf{J} \mathbf{S} - z(t) \mathbf{S} + \mathbf{h} + \boldsymbol{\xi}(t). \quad (4.25)$$

Como a equação é linear é conveniente trabalhar na base de autovetores da matriz de interação. Lembrando que a transformação para a base de autovetores da matriz

de interação é dada pela matriz \mathbf{V} na forma $\mathbf{Y} = \mathbf{V}^T \mathbf{S}$, nesta base o sistema se desacopla e obtemos uma equação para cada componente $y_i(t)$:

$$\frac{\partial y_i}{\partial t} = (\lambda_i - z(t)) y_i(t) + H_i(t) + \eta_i(t) \quad (4.26)$$

onde H_i e η_i são as projeções do campo magnético e do ruído na base de autovetores de J_{ij} respectivamente. O ruído na base de autovetores satisfaz:

$$\langle \eta_i(t) \rangle = \sum_{k=1}^N V_i^k \langle \xi_k(t) \rangle = 0, \quad (4.27)$$

e

$$\langle \eta_i(t) \eta_j(s) \rangle = \sum_{kl=1}^N V_i^k V_j^l \langle \xi_k(t) \xi_l(s) \rangle. \quad (4.28)$$

Usando (4.23) e a ortogonalidade dos autovetores de \mathbf{J} , concluímos que:

$$\begin{aligned} \langle \eta_i(t) \rangle &= 0, \\ \langle \eta_i(t) \eta_j(t') \rangle &= 2T \delta_{ij} \delta(t - t'), \end{aligned} \quad (4.29)$$

ou seja, as variáveis aleatórias do ruído na base de autovetores satisfazem exatamente a mesma estatística das variáveis na base original. A solução formal das equações dinâmicas (4.26) é:

$$y_i(t) = y_i(0) e^{\lambda_i(t-t_0)} e^{-\int_{t_0}^t z(s) ds} + \int_{t_0}^t dt'' e^{\lambda_i(t-t'')} e^{-\int_{t''}^t z(s) ds} (H_i(t'') + \eta_i(t'')) \quad (4.30)$$

Notamos que esta solução geral é válida para qualquer tamanho N e para qualquer sistemas com matriz de interações de pares simétrica, dados os autovalores da matriz $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_N$. Para completar a solução ainda se deve encontrar uma equação para determinar o multiplicador de Lagrange $z(t)$. Vamos ver que essa equação é dada precisamente pelo vínculo esférico.

Finalmente, a escolha da condição inicial depende do processo que queremos estudar, seja por exemplo um resfriamento rápido desde um estado desordenado ou a dinâmica de equilíbrio do sistema. Vamos ver que o estado assintótico do sistema depende da condição inicial.

4.3 Temperatura zero

A temperatura zero, e para campo externo nulo, $H_i(t) = 0 \forall i$, a dinâmica de relaxação corresponde a uma descida pelo gradiente do potencial. Assintoticamente, se espera que o sistema tenda para o estado fundamental. Fixando sem perda de generalidade $t_0 = 0$, a equação (4.30) para as componentes do vetor de estado do sistema se reduz a:

$$y_i(t) = y_i(0) \gamma(t) e^{\lambda_i t}, \quad (4.31)$$

onde

$$\gamma(t) = \exp \left[- \int_0^t z(s) ds \right]. \quad (4.32)$$

A função de auto-correlação é dada por:

$$C_N(t, t') = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N s_i(t) s_i(t'), \quad (4.33)$$

onde o subíndice N indica que estamos considerando uma realização particular do sistema. Substituindo $\mathbf{S} = \mathbf{V}\mathbf{Y}$ obtemos:

$$\begin{aligned} C_N(t, t') &= \frac{1}{N} \mathbf{S}^T(t) \cdot \mathbf{S}(t') \\ &= \frac{1}{N} \mathbf{Y}^T(t) \mathbf{V}^T \mathbf{V} \mathbf{Y}(t') = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N y_i(t) y_i(t'). \end{aligned} \quad (4.34)$$

Substituindo (4.31) na expressão anterior:

$$C_N(t, t') = \gamma(t) \gamma(t') \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N y_i^2(0) \exp [\lambda_i(t + t')] \quad (4.35)$$

O vínculo esférico implica $C_N(t, t) = 1$, o que fornece uma equação para determinar o multiplicador $z(t)$:

$$\frac{1}{\gamma^2(t)} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N y_i^2(0) \exp (2\lambda_i t). \quad (4.36)$$

Então, dado um modelo com um número fixo de variáveis dinâmicas N e uma dada matriz de interação, caracterizada pelo conjunto de autovalores λ_i , $i = 1, \dots, N$, a equação anterior determina o multiplicador de Lagrange. Este resultado inserido em (4.31) permite determinar completamente a evolução dinâmica do sistema a $T = 0$.

4.3.1 Tipos de condições iniciais

As condições iniciais $y_i(0)$ $i = 1, \dots, N$ irão determinar o estado assintótico do sistema. Vamos discutir algumas escolhas particulares que levam a diferentes estados assintóticos:

Estado inicial puro

Consideremos a condição inicial:

$$y_i(0) = \sqrt{N}\delta_{iv}. \quad (4.37)$$

Esta condição implica que o estado inicial $s_i(0)$ apresenta uma projeção finita apenas sobre o autovetor \mathbf{V}_ν :

$$\mathbf{V}_\alpha^T \mathbf{S}(0) = \sqrt{N}\delta_{\alpha\nu}. \quad (4.38)$$

Neste caso, (4.36) dá $\gamma(t) = \exp(-\lambda_\nu t)$, resultando:

$$y_i(t) = \sqrt{N}\delta_{iv} e^{(\lambda_i - \lambda_\nu)t}. \quad (4.39)$$

Notamos que, neste caso, o sistema permanece congelado no estado inicial. Isto é consequência do fato dos autovetores serem pontos críticos da superfície de energia potencial, e por tanto, se o sistema é inicializado em um destes pontos estacionários, ele permanecerá nesse ponto de equilíbrio para sempre, se $T = 0$.

Estado inicial misto

Consideremos agora o estado inicial para as variáveis projetadas:

$$y_i(0) = \sqrt{\frac{N}{n}} \sum_{k=1}^n \delta_{iv_k}, \quad (4.40)$$

onde $n \leq N$. Esta condição inicial corresponde a um estado $\mathbf{S}(0)$ que é uma combinação linear de autoestados:

$$\mathbf{S}(0) = \sqrt{\frac{N}{n}} \sum_{k=1}^n \mathbf{V}_{\nu_k}. \quad (4.41)$$

Neste caso:

$$\gamma(t) = \frac{\sqrt{n}}{\sqrt{\sum_{k=1}^n \exp(2\lambda_{\nu_k} t)}}. \quad (4.42)$$

As variáveis projetadas são dadas por:

$$y_i(t) = \sqrt{N} \left(\sum_{k=1}^n \delta_{i,\nu_k} \right) \frac{e^{\lambda_i t}}{\sqrt{\sum_{k=1}^n e^{2\lambda_{\nu_k} t}}}. \quad (4.43)$$

Por tanto, as componentes sem projeção sobre as n direções escolhidas serão nulas para todo t . As outras componentes se reduzem a:

$$y_{\nu_r}(t) = \frac{\sqrt{N}}{\sqrt{1 + \sum_{k \neq r=1}^n e^{2(\lambda_{\nu_k} - \lambda_{\nu_r})t}}}. \quad (4.44)$$

Notamos que todas as componentes, exceto a correspondente ao máximo dos autovalores $\lambda_{\nu_1}, \dots, \lambda_{\nu_n}$ vão para zero a tempos grandes. Concluimos que, com esta condição inicial, o sistema acaba condensando sobre o autovetor correspondente ao máximo λ_L dos autovalores da projeção inicial:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} y_i(t) = \sqrt{N} \delta_{i\lambda_L}. \quad (4.45)$$

Estado inicial uniforme

Este estado inicial corresponde a escolher $y_i(0) = 1$ para todas as componentes $i = 1, \dots, N$. Este estado corresponde a uma configuração inicial do estado original com a mesma projeção sobre todos os autovetores:

$$\mathbf{S}(0) = \sum_{k=1}^N \mathbf{V}_k, \quad (4.46)$$

ou seja, é um estado inicial desordenado, equivalente ao estado misto quando $n = N$. Resolvendo as equações para $\gamma(t)$ obtemos para a evolução das componentes projetadas sobre a base de autovetores:

$$y_i(t) = \frac{\sqrt{N} e^{\lambda_i t}}{\sqrt{\sum_{k=1}^N e^{2\lambda_k t}}} = \frac{\sqrt{N}}{\sqrt{1 + \sum_{k \neq i=1}^N e^{2(\lambda_k - \lambda_i)t}}}. \quad (4.47)$$

Este caso deve ser analisado com cuidado. Como o número de estados contribuindo para a condição inicial é igual ao total de estados do sistema, a condição inicial tem projeção finita sobre todas as direções correspondentes aos autovetores da matriz \mathbf{J} , então o limite $N \rightarrow \infty$ em geral não irá comutar com o limite de

tempos grandes $t \rightarrow \infty$. Se tomamos o limite de tempos grandes antes de fazer o limite termodinâmico, então a dinâmica será ergódica e o sistema irá relaxar para o equilíbrio. No entanto, se fazemos o limite termodinâmico antes do limite de tempos grandes, a ergodicidade poderá ser quebrada e o sistema ficar para sempre fora do equilíbrio. As características do estado para $t \rightarrow \infty$ nestes casos irá depender fortemente da estrutura de autovalores da matriz de interação.

4.4 A dinâmica desde um estado inicial desordenado

Como vimos na seção anterior, o único caso que leva a um comportamento assintótico não trivial para $T = 0$ é o correspondente a condições iniciais desordenadas, ou na base projetada, $y_i(0) = 1$ para todo $i = 1, \dots, N$. No limite termodinâmico, introduzindo a densidade de autovalores da matriz aleatória \mathbf{J} para fazer a média na desordem, obtemos:

$$C(t, t') = \int d\lambda \rho(\lambda) C_\lambda(t, t'). \quad (4.48)$$

Com a distribuição de autovalores dada por (4.15), fazendo $J = 1$, a equação (4.35) no limite $N \rightarrow \infty$ se reduz a:

$$\begin{aligned} C(t, t') &= \gamma(t) \gamma(t') \int_{-2}^2 \frac{d\lambda}{2\pi} \sqrt{4 - \lambda^2} e^{\lambda(t+t')} \\ &= \gamma(t) \gamma(t') \frac{I_1[2(t+t')]}{t+t'} \end{aligned} \quad (4.49)$$

onde $I_1(x)$ é uma função de Bessel generalizada [23]. Da condição para a função de auto-correlação a tempos iguais obtemos a função $\gamma(t)$:

$$C(t, t) = 1 = \gamma^2(t) \frac{I_1(4t)}{2t} \quad (4.50)$$

donde

$$\gamma(t) = \sqrt{\frac{2t}{I_1(4t)}}. \quad (4.51)$$

Desta forma temos uma solução fechada para $C(t, t')$:

$$\begin{aligned} C(t, t') &= \frac{2\sqrt{t t'}}{t+t'} \frac{I_1[2(t+t')]}{\sqrt{I_1(4t) I_1(4t')}} \\ &= \frac{2\sqrt{u}}{1+u} \frac{I_1[2(t+t')]}{\sqrt{I_1(4t) I_1(4t')}} \end{aligned} \quad (4.52)$$

onde definimos $u = t'/t$.

A função resposta a dois tempos na base de autovetores se define como:

$$R_N(t, t') = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{\delta \langle y_i(t) \rangle}{\delta H_i(t')} \Big|_{H_i=0} \quad (4.53)$$

Fazendo a variação em (4.30):

$$\begin{aligned} R_N(t, t') &= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N e^{\lambda_i(t-t')} e^{-\int_{t'}^t z(s) ds} \\ &= \frac{\gamma(t)}{\gamma(t')} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N e^{\lambda_i(t-t')} \end{aligned} \quad (4.54)$$

Fazendo a média na desordem obtemos:

$$\begin{aligned} R(t, t') &= \int d\lambda \rho(\lambda) R_\lambda(t, t') \\ &= \sqrt{\frac{t I_1(4t') I_1[2(t-t')]}{t' I_1(4t) (t-t')}} \end{aligned} \quad (4.55)$$

4.4.1 Comportamento assintótico da função de autocorrelação nos diferentes setores temporais

- *Regime de aging*

Este setor corresponde a fazer $t \rightarrow \infty$ e $t' \rightarrow \infty$ com $0 \leq u = t'/t \leq 1$. Podemos usar uma expansão assintótica da função de Bessel:

$$I_k(x) \approx \frac{e^x}{\sqrt{2\pi x}} \left\{ 1 - \frac{c-1}{8x} + O(1/x^2) \right\} \quad (4.56)$$

onde $c = 4k^2$. Então:

$$\begin{aligned} \frac{I_1[2(t+t')]}{\sqrt{I_1(4t) I_1(4t')}} &\approx \frac{(8\pi t)^{1/4} (8\pi t')^{1/4}}{[4\pi(t+t')]^{1/2}} \\ &= \sqrt{2} \frac{u^{1/4}}{(1+u)^{1/2}} \end{aligned} \quad (4.57)$$

com o que obtemos:

$$C(t, t') \simeq C(u) = 2\sqrt{2} \frac{u^{3/4}}{(1+u)^{3/2}}. \quad (4.58)$$

Vemos que, neste regime de aging, a função de autocorrelação depende somente de $u = t'/t$. Este resultado é um caso particular de um resultado geral sobre o comportamento de funções de dois tempos no regime de aging, que diz que a dependência com t e t' é sempre na forma $h(t')/h(t)$, com uma função h que depende do sistema. No presente caso $h(t) = t$.

Ainda neste regime notamos que se t' é finito, sempre existe um t suficientemente grande tal que $u \rightarrow 0$ e $C(t, t') \rightarrow 0$. Esta é uma característica da quebra fraca de ergodicidade discutida em (2.2).

- *Regime estacionário ou de quase-equilíbrio*

O regime de quase-equilíbrio se obtém fazendo que ambos os tempos $t \rightarrow \infty$ e $t' \rightarrow \infty$ de forma que $\epsilon = (t - t')/t \rightarrow 0$ e $u \rightarrow 1$. Neste regime obtemos

$$C(t, t') = \frac{(1 - \epsilon)^{3/4}}{(1 + \epsilon)^{3/2}} \quad (4.59)$$

Na ordem mais baixa em ϵ , $C(t, t') \rightarrow 1$. Então a $T = 0$ no regime estacionário a função de autocorrelação toma o valor mais alto possível.

4.4.2 Comportamento da função resposta

Se fazemos $t \rightarrow \infty$ a função resposta (4.55) fica

$$R(t, t') \approx t^{3/4} e^{-2t} \sqrt{\frac{I_1(4t')}{t'} \frac{I_1[2(t - t')]}{t - t'}} \quad (4.60)$$

- Se t' permanece finito:

$$\frac{I_1[2(t - t')]}{t - t'} \approx \frac{e^{2t}}{\sqrt{4\pi t}} \frac{1}{t} = \frac{e^{2t}}{\sqrt{4\pi} t^{3/2}} \quad (4.61)$$

com o que

$$R(t, t') \approx \frac{\sqrt{2}}{(2\pi)^{1/4}} t^{-3/4} \sqrt{\frac{I_1(4t')}{t'}} \quad (4.62)$$

e notamos que a resposta decai com uma lei de potências com expoente $3/4$.

- Se $t \rightarrow \infty$, $t' \rightarrow \infty$ e $\epsilon = (t - t')/t \rightarrow 0$ e $u = 1$,

$$\left[\frac{I_1(4t')}{t'} \right]^{1/2} \approx \left[\frac{1}{t'} \frac{e^{4t'}}{\sqrt{8\pi t'}} \right]^{1/2} = \frac{e^{2t'}}{(8\pi)^{1/4} t'^{3/4}} \quad (4.63)$$

A função resposta fica:

$$R(t, t') \approx \frac{I_1[2(t - t')]}{t - t'} e^{-2(t-t')} \quad (4.64)$$

Observamos que a função resposta, ao contrário da autocorrelação, apresenta sim um regime estacionário quando os tempos são grandes porém a diferença entre eles é finita.

- No regime de aging $t, t' \rightarrow \infty$ com $0 \leq u \leq 1$:

$$\frac{I_1[2t(1 - u)]}{t(1 - u)} \approx \frac{e^{2t(1-u)}}{\sqrt{4\pi}[t(1 - u)]^{3/2}} = \frac{e^{2(t-t')}}{\sqrt{4\pi} t^{3/2} (1 - u)^{3/2}} \quad (4.65)$$

e obtemos

$$R(t, t') \approx t^{-3/2} \left(\frac{1}{u} \right)^{3/4} \frac{1}{(1 - u)^{3/2}} \quad (4.66)$$

Para u fixo a função resposta decai com o tempo t com uma lei de potências. Notamos que o comportamento com os tempos nesta escala é mais complexa que para a função de autocorrelação, não correspondendo simplesmente a uma função de u mas dependendo explicitamente de t .

4.4.3 Relaxação da densidade de energia

Pode-se obter uma relação simples entre o multiplicador de Lagrange $z(t)$ e a densidade de energia do sistema $\varepsilon(t)$. Para obter esta relação multiplicamos ambos lados da equação de Langevin por $1/N s_i(t')$, somamos sobre o índice i e tomamos a média na desordem. Obtemos uma equação para a derivada da função de autocorrelação:

$$\frac{\partial C(t, t')}{\partial t} = \left\langle \frac{1}{N} \sum_{i \neq j} J_{ij} s_i(t') s_j(t) \right\rangle - z(t) C(t, t') \quad (4.67)$$

onde os colchetes indicam média na desordem. Fazendo agora $t' \rightarrow t$ notamos que o primeiro termo do lado direito é igual a $-2\varepsilon(t)$. Neste mesmo limite se verifica

que $\partial C(t, t')/\partial t \rightarrow 0$ já que $C(t, t) = 1$. Obtemos finalmente $z(t) = -2\varepsilon(t)$. Logo da definição da função $\gamma(t)$ obtemos:

$$\begin{aligned} 2\varepsilon(t) &= \frac{\partial \ln \gamma(t)}{\partial t} \\ &= \frac{1}{2t} - 2 \frac{I_1'(4t)}{I_1(4t)} \end{aligned} \quad (4.68)$$

Usando a relação de recorrência para as funções de Bessel:

$$x \frac{d}{dx} I_k(x) - k I_k(x) = -x I_{k+1}(x) \quad (4.69)$$

obtemos

$$\varepsilon(t) = \frac{I_2(4t)}{I_1(4t)} \quad (4.70)$$

Para tempos grandes:

$$\varepsilon(t) \approx -1 + \frac{3}{8t}. \quad (4.71)$$

A densidade de energia decai para o equilíbrio com uma lei de potências.

4.5 Temperatura finita

A partir da solução (4.30) podemos construir a função de autocorrelação a dois tempos (consideramos $t_0 = 0$):

$$\begin{aligned} \langle y_i(t) y_i(t') \rangle &= y_i^2(0) e^{\lambda_i t} e^{\lambda_i t'} e^{-\int_0^t ds z(s)} e^{-\int_0^{t'} ds z(s)} \\ &+ \int_0^t du e^{\lambda_i(t-u)} e^{-\int_u^t ds z(s)} \int_0^{t'} dv e^{\lambda_i(t'-v)} e^{-\int_v^{t'} ds z(s)} \langle \eta_i(u) \eta_i(v) \rangle \end{aligned} \quad (4.72)$$

onde os colchetes indicam uma média no ruído térmico. Realizando a média obtemos:

$$\begin{aligned} \langle y_i(t) y_i(t') \rangle &= y_i^2(0) e^{\lambda_i(t+t')} e^{-\int_0^t ds z(s)} e^{-\int_0^{t'} ds z(s)} \\ &+ 2T \int_0^{\min(t, t')} du e^{\lambda_i(t+t'-2u)} e^{-\int_u^t ds z(s)} e^{-\int_u^{t'} ds z(s)} \end{aligned} \quad (4.73)$$

Definindo:

$$\Gamma(t) = \exp \left[2 \int_0^t ds z(s) \right] \quad (4.74)$$

podemos reescrever:

$$e^{-\int_u^t ds z(s)} e^{-\int_u^{t'} ds z(s)} = \sqrt{\frac{\Gamma(u)}{\Gamma(t)}} \sqrt{\frac{\Gamma(u)}{\Gamma(t')}} = \frac{\Gamma(u)}{\sqrt{\Gamma(t)\Gamma(t')}}. \quad (4.75)$$

A função de auto-correlação a dois tempos é definida como $C(t, t') = \frac{1}{N} \sum_i \langle y_i(t) y_i(t') \rangle$. Reagrupando termos e tomando o limite $N \rightarrow \infty$ obtemos:

$$C(t, t') = \frac{1}{\sqrt{\Gamma(t)\Gamma(t')}} \left[\int d\lambda \rho(\lambda) y_\lambda^2(0) e^{\lambda(t+t')} + 2T \int_0^{t'} du \Gamma(u) \int d\lambda \rho(\lambda) e^{\lambda(t+t'-2u)} \right]. \quad (4.76)$$

Como antes, a solução exata da função de autocorrelação fica dependendo da função $\Gamma(t)$. É possível obter uma solução autoconsistente usando a condição do vínculo esférico $C(t, t) = 1$, com o que:

$$\Gamma(t) = \int d\lambda \rho(\lambda) y_\lambda^2(0) e^{2\lambda t} + 2T \int_0^t du \Gamma(u) \int d\lambda \rho(\lambda) e^{2\lambda(t-u)}. \quad (4.77)$$

Podemos escrever a equação anterior na forma:

$$\Gamma(t) = f_1(t) + 2T \int_0^t du f_2(t-u) \Gamma(u), \quad (4.78)$$

onde:

$$\begin{aligned} f_1(t) &= \int d\lambda \rho(\lambda) y_\lambda^2(0) e^{2\lambda t}, \\ f_2(t) &= \int d\lambda \rho(\lambda) e^{2\lambda t}. \end{aligned} \quad (4.79)$$

A (4.78) é uma equação integral de Volterra do segundo tipo. Se pode resolver por transformada de Laplace, que definimos como:

$$\tilde{f}(s) = \int_0^\infty f(t) e^{-st} dt. \quad (4.80)$$

Usando a propriedade da transformada respeito de uma convolução obtemos:

$$\tilde{\Gamma}(s) = \tilde{f}_1(s) + 2T \tilde{f}_2(s) \tilde{\Gamma}(s). \quad (4.81)$$

Então:

$$\tilde{\Gamma}(s) = \frac{\tilde{f}_1(s)}{1 - 2T \tilde{f}_2(s)}. \quad (4.82)$$

As transformadas das funções $f_1(t)$ e $f_2(t)$ são:

$$\begin{aligned} \tilde{f}_1(s) &= \int d\lambda \rho(\lambda) \frac{y_\lambda^2(0)}{s - 2\lambda}, \\ \tilde{f}_2(s) &= \int d\lambda \rho(\lambda) \frac{1}{s - 2\lambda}. \end{aligned} \quad (4.83)$$

A equação (4.82) se pode escrever na forma:

$$\tilde{\Gamma}(s) = \tilde{f}_1(s) \sum_{k=0}^{\infty} (2T)^k \tilde{f}_2^k(s) \quad (4.84)$$

A transformada inversa será:

$$\Gamma(t) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\gamma-i\infty}^{\gamma+i\infty} ds e^{st} \tilde{f}_1(s) \sum_k (2T)^k \tilde{f}_2^k(s) \quad (4.85)$$

com $\gamma >$ máxima parte real das singularidades do integrando. Com as definições de f_1 e f_2 obtemos:

$$\begin{aligned} \Gamma(t) &= \frac{1}{2\pi i} \int_{\gamma-i\infty}^{\gamma+i\infty} ds e^{st} \int d\lambda \rho(\lambda) \frac{y_\lambda^2(0)}{s - 2\lambda} \sum_k (2T)^k \left[\int d\lambda' \rho(\lambda') \frac{1}{s - 2\lambda'} \right]^k \\ &= \frac{1}{2\pi i} \int_{\gamma-i\infty}^{\gamma+i\infty} ds e^{st} \int d\lambda \rho(\lambda) \frac{y_\lambda^2(0)}{s - 2\lambda} \sum_k (2T)^k \prod_{i=1}^k \int d\mu_i \frac{\rho(\mu_i)}{s - 2\mu_i} \end{aligned} \quad (4.86)$$

Notamos que o integrando no plano complexo possui singularidades que são pólos simples, e por tanto, é possível resolver esta integral pelo teorema dos resíduos. Fazendo isso e resumando a série se chega ao resultado:

$$\Gamma(t) = \frac{1}{2} \int d\lambda \frac{\rho(\lambda) y_\lambda^2(0) e^{2\lambda t}}{1 - T\chi(\lambda)} + \frac{T}{2} \int d\lambda \frac{\rho(\lambda) e^{2\lambda t}}{(1 - T\chi(\lambda))^2} \int d\mu \frac{\rho(\mu) y_\mu^2(0)}{\lambda - \mu}, \quad (4.87)$$

onde definimos:

$$\chi(\lambda) = PP \int d\mu \frac{\rho(\mu)}{\lambda - \mu}. \quad (4.88)$$

onde PP indica o valor principal de Cauchy da integral.

Para ir adiante devemos especificar as condições iniciais.

4.5.1 Condição inicial desordenada

Uma condição inicial desordenada corresponde, quando projetada na base de autovetores da matriz de interação a uma projeção uniforme sobre todas as direções na base diagonal, de forma que $y_\lambda(0) = 1, \forall i$. Esta condição inicial corresponde a um estado de alta temperatura, e por tanto, a evolução dinâmica decorrente será uma evolução do sistema fora do equilíbrio, tentando se ordenar, um quench, que é uma situação experimental natural.

A equação para a função $\Gamma(t)$ fica:

$$\Gamma(t) = \frac{1}{2} \int d\lambda \frac{\rho(\lambda) e^{2\lambda t}}{1 - T\chi(\lambda)} + \frac{T}{2} \int d\lambda \frac{\rho(\lambda) \chi(\lambda) e^{2\lambda t}}{(1 - T\chi(\lambda))^2} \quad (4.89)$$

Esta equação é difícil de resolver no caso geral, no entanto, como nós estamos interessados no regime de tempos grandes, podemos notar que os fatores exponenciais em ambas integrais fazem com que, a tempos grandes, somente a contribuição correspondente ao máximo autovalor $\lambda_{max} = 2$ seja relevante. A função $\chi(\lambda) \rightarrow \chi(2)$ e é dada por:

$$\chi(2) = \int_{-2}^2 \frac{d\lambda}{2\pi} \sqrt{\frac{2+\lambda}{2-\lambda}} = 1 \quad (4.90)$$

Então fazendo $\lambda = 2 - \epsilon$ com $\epsilon \ll 1$ temos que considerar a integral:

$$\begin{aligned} \int d(2 - \epsilon) \rho(2 - \epsilon) e^{2(2-\epsilon)t} &= \frac{1}{2\pi} \int_0^4 d\epsilon (4\epsilon - \epsilon^2)^{1/2} e^{4t} e^{-2\epsilon t} = \\ \frac{e^{4t}}{2\pi} \int_0^4 d\epsilon \sqrt{4\epsilon} (1 - \epsilon/4)^{1/2} e^{-2\epsilon t} &\approx \frac{e^{4t}}{\pi} \int_0^4 d\epsilon \sqrt{\epsilon} (1 - \epsilon/8) e^{-2\epsilon t} \\ &\approx \frac{e^{4t}}{\pi} \int_0^4 d\epsilon \epsilon^{1/2} e^{-2\epsilon t} \end{aligned} \quad (4.91)$$

Quando $t \rightarrow \infty$ podemos estender o intervalo de integração para $(0, \infty)$. Cambiando variáveis $2\epsilon t = u^2/2$ obtemos:

$$\int_0^\infty d\epsilon \epsilon^{1/2} e^{-2\epsilon t} = \frac{1}{4 t^{3/2}} \int_0^\infty du u^2 e^{-u^2/2} = \frac{\sqrt{\pi}}{4 t^{3/2}} \quad (4.92)$$

Por tanto,

$$\int_{-2}^2 d\lambda \frac{\rho(\lambda) e^{2\lambda t}}{1 - T\chi(\lambda)} \stackrel{t \rightarrow \infty}{\approx} \frac{1}{4\sqrt{\pi}} \frac{e^{4t}}{t^{3/2}} \frac{1}{(1 - T)} \quad (4.93)$$

De forma semelhante,

$$\int_{-2}^2 d\lambda \frac{\rho(\lambda) e^{2\lambda t} \chi(\lambda)}{(1 - T\chi(\lambda))^2} \stackrel{t \rightarrow \infty}{\simeq} \frac{1}{4\sqrt{\pi}} \frac{e^{4t}}{t^{3/2}} \frac{1}{(1 - T)^2} \quad (4.94)$$

Substituindo estes resultados em (4.89) obtemos para o comportamento assintótico da $\Gamma(t)$:

$$\Gamma(t) \simeq \frac{1}{8\sqrt{\pi}} \frac{1}{(1 - T)^2} \frac{e^{4t}}{t^{3/2}} \quad (4.95)$$

A magnetização “staggered”

Se define a magnetização staggered neste caso como a projeção da magnetização sobre os autovetores de J_{ij} . A partir de (4.30) e fazendo a média no ruído térmico obtemos:

$$\langle y_i(t) \rangle = y_i(0) e^{\lambda_i t} e^{-\int_0^t z(s) ds} = y_i(0) \frac{e^{\lambda_i t}}{\sqrt{\Gamma(t)}}. \quad (4.96)$$

Notamos que a magnetização staggered depende da temperatura somente através da $\Gamma(t)$ e $1 - T = q_{EA}$. Usando o resultado assintótico (4.95) obtemos, para condições iniciais desordenadas:

$$\langle y_i(t) \rangle \propto q_{EA} t^{3/4} e^{(\lambda_i - 2)t} \quad (4.97)$$

Este resultado implica em dois comportamentos diferentes possíveis para tempos grandes:

i) Se $\lambda_i \neq 2$, então $\langle y_i(t) \rangle \rightarrow 0$ exponencialmente.

ii) Se $\lambda_i = 2$

$$\langle y_i(t) \rangle \propto q_{EA} t^{3/4} \quad (4.98)$$

e a magnetização staggered na direção do máximo autovetor cresce com o tempo algebricamente. Isto implica que o sistema tende a condensar no estado correspondente ao máximo autovalor da matriz de interação. Estes resultados valem para $T \leq T_c = 1$.

A resposta

A resposta a dois tempos é definida pela (4.53):

$$R_N(t, t') = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left. \frac{\delta \langle y_i(t) \rangle}{\delta H_i(t')} \right|_{H_i=0} \quad (4.99)$$

Para fazer a variação notamos que a presença de um campo externo modifica a função $\Gamma(t)$, então podemos escrever:

$$\langle y_i(t) \rangle_H = y_i(0) \frac{e^{\lambda_i t}}{\sqrt{\Gamma_H(t)}} + \int_0^t ds e^{\lambda_i(t-s)} \sqrt{\frac{\Gamma_H(s)}{\Gamma_H(t)}} H_i(s), \quad (4.100)$$

onde $\Gamma_H(t)$ indica a função calculada em presença de um campo externo $h(t)$.

Para a variação obtemos formalmente:

$$\left. \frac{\delta \langle y_i(t) \rangle}{\delta H_i(t')} \right|_{H=0} = e^{\lambda_i(t-t')} \left. \sqrt{\frac{\Gamma_H(t')}{\Gamma_H(t)}} \right|_{H=0} - \frac{1}{2} \frac{y_i(0) e^{\lambda_i t}}{[\Gamma_H^{3/2}(t)]_{H=0}} \left. \frac{\delta \Gamma_H(t)}{\delta H(t')} \right|_{H=0} \quad (4.101)$$

Fazendo o cálculo explícito se pode verificar que $\left. \frac{\delta \Gamma_H(t)}{\delta H(t')} \right|_{H=0} = 0$ e por tanto, no limite $N \rightarrow \infty$:

$$\begin{aligned} R(t, t') &= \int d\lambda \rho(\lambda) R_\lambda(t, t') \\ &= \sqrt{\frac{\Gamma(t')}{\Gamma(t)}} \int d\lambda \rho(\lambda) e^{\lambda(t-t')} \\ &= \sqrt{\frac{\Gamma(t')}{\Gamma(t)}} \frac{I_1[2(t-t')]}{t-t'} \end{aligned} \quad (4.102)$$

Notamos que a resposta pode depender da temperatura somente através da razão $\Gamma(t')/\Gamma(t)$, que por sua vez, é independente de T . Por tanto a resposta também o será, e o comportamento é o mesmo que o correspondente a $T = 0$ que foi analisado em (4.4.2).

A autocorrelação

Para o caso de condições iniciais desordenadas a autocorrelação (4.76) fica na forma:

$$C(t, t') = \frac{1}{\sqrt{\Gamma(t)\Gamma(t')}} \left\{ \frac{I_1[2(t+t')]}{t+t'} + 2T \int_0^{t'} du \Gamma(u) \frac{I_1[2(t+t'-2u)]}{t+t'-2u} \right\} \quad (4.103)$$

O decaimento das correlações desde a condição inicial é dado por:

$$C(t, 0) = \frac{1}{\sqrt{\Gamma(t)\Gamma(0)}} \frac{I_1(2t)}{t} \quad (4.104)$$

Notando que $\Gamma(0) = 1$ e usando o comportamento assintótico (4.95):

$$C(t, 0) \propto \frac{q_{EA} t^{3/4}}{e^{2t}} \frac{e^{2t}}{t \sqrt{4\pi t}} \simeq q_{EA} t^{-3/4} \quad (4.105)$$

Notamos que, embora a tempos grandes o sistema deve relaxar para um estado completamente diferente da configuração inicial desordenada, esta relaxação é lenta, algébrica, típica de relaxações fora do equilíbrio.

Para tempos t e t' grandes podemos distinguir três comportamentos assintóticos:

- t' finito e $u = t'/t \rightarrow 0$.

As aproximações necessárias na (4.103) são:

$$[\Gamma(t)]^{-1/2} \simeq q_{EA} t^{3/4} e^{-2t} \quad (4.106)$$

$$\frac{I_1[2(t+t')]}{t+t'} \simeq \frac{e^{2(t+t')}}{2\sqrt{\pi} t^{3/2}} \quad (4.107)$$

$$\frac{I_1[2(t+t'-2u)]}{t+t'-2u} \simeq \frac{e^{2(t+t'-2u)}}{2\sqrt{\pi} t^{3/2}} \quad (4.108)$$

A autocorrelação se reduz a:

$$C(t, t') \approx f(T, t') t^{-3/4} \quad (4.109)$$

onde

$$f(T, t') \propto q_{EA} \frac{e^{2t'}}{\sqrt{\Gamma(t')}} \left[1 + 2T \int_0^{t'} du \Gamma(u) e^{-4u} \right] \quad (4.110)$$

Como a função $f(T, t')$ é finita para t' finito, vemos que a autocorrelação decai a zero como $t^{-3/4}$ neste regime.

- $t, t' \rightarrow \infty$ e $0 \leq u \leq 1$ (regime de aging).

Neste regime teremos:

$$\frac{1}{\sqrt{\Gamma(t)\Gamma(t')}} \simeq q_{EA}^2 e^{-2(t+t')} t^{3/2} u^{3/4} \quad (4.111)$$

$$\frac{I_1[2(t+t')]}{t+t'} \simeq \frac{e^{2(t+t')}}{2\sqrt{\pi} t^{3/2} (1+u)^{3/2}} \quad (4.112)$$

Fazendo o cambio de variáveis na (4.103) $w = 2(t + t' - 2u)$ podemos escrever essa equação na forma:

$$C(t, t') \propto q_{EA} \frac{u^{3/4}}{(1+u)^{3/2}} \left[1 - T \int_0^\alpha dw \frac{e^{-w}}{(1-w/\beta)^{3/2}} \frac{I_1(w)}{w} \right] \quad (4.113)$$

com $\alpha = 2t(1-u)$ e $\beta = 2t(1+u)$. No regime de aging, com $u = t'/t$ finito, a integral é finita. Por tanto, na ordem dominante:

$$C(t, t') \approx q_{EA} \frac{u^{3/4}}{(1+u)^{3/2}} \approx q_{EA} u^{3/4} \quad (4.114)$$

A função de autocorrelação decai com uma lei de potências no regime de aging, e a potência $3/4$ é independente da temperatura final.

- $t, t' \rightarrow \infty$ e $\epsilon = (t - t')/t \rightarrow 0$, ou $u = 1$.
Neste regime $t - t' \ll t + t'$ ou $\alpha \ll \beta$. Então a autocorrelação fica aproximadamente:

$$C(t, t') \propto 1 - T \int_0^{2(t-t')} dw e^{-w} \frac{I_1(w)}{w} \quad (4.115)$$

Vemos que neste regime, na ordem dominante, a função de correlação é estacionária:

$$C(t, t') = C(t - t'). \quad (4.116)$$

Este é o regime de quase-equilíbrio. Podemos verificar que se $t = t'$, então $C(t, t) = 1$ como deve ser, e ainda, para tempos muito separados $t - t' \rightarrow \infty$ obtemos:

$$\int_0^{2(t-t')} dw e^{-w} \frac{I_1(w)}{w} \rightarrow 1, \quad (4.117)$$

ou seja:

$$C(t - t') \rightarrow 1 - T = q_{EA}, \quad (4.118)$$

que é o valor assintótico do plateau no gráfico de $C(t, t')$ na região de quase-equilíbrio.

Finalmente, notamos que **os resultados estão de acordo com o cenário de quebra fraca de ergodicidade**, ou seja, obtivemos que:

$$\begin{aligned} \lim_{t' \rightarrow \infty} C(t' + \tau, t') &= q_{EA} && \text{para todo } \tau \text{ finito,} \\ \lim_{\tau \rightarrow \infty} C(t' + \tau, t') &= 0 && \text{para todo } t' \text{ finito.} \end{aligned} \quad (4.119)$$

O Teorema de Flutuação-Dissipação

Lembremos que no regime de quase-equilíbrio o comportamento da função resposta é dado por (4.64):

$$R(t - t') = \frac{I_1[2(t - t')]}{t - t'} e^{-2(t-t')} \quad (4.120)$$

Agora se fazemos a derivada de $C(t, t')$ respeito de t' no resultado para a correlação no regime quase-estacionário (4.115) obtemos:

$$\frac{\partial C(t - t')}{\partial t'} = T e^{-2(t-t')} \frac{I_1[2(t - t')]}{t - t'} \quad (4.121)$$

Ou seja,

$$R(t - t') = \frac{1}{T} \frac{\partial C(t - t')}{\partial t'} \quad (4.122)$$

o que indica que o TFD se satisfaz neste regime. Consequentemente a razão de flutuação-dissipação $X(t, t') = 1$. No regime de aging a resposta é dada pela (4.66):

$$R(t, t') \approx t^{-3/2} \left(\frac{1}{u}\right)^{3/4} \frac{1}{(1-u)^{3/2}}, \quad (4.123)$$

e vimos que a autocorrelação é função somente de u , $C(t, t') = C(u)$, de forma que:

$$\frac{\partial C(t, t')}{\partial t'} = \frac{dC}{du} \frac{\partial u}{\partial t'} = \frac{1}{t} C'(u) \quad (4.124)$$

e por tanto,

$$X(t, t') = \frac{T R(t, t')}{\frac{\partial C(t, t')}{\partial t'}} \simeq T f(u) t^{-\frac{1}{2}} \quad (4.125)$$

ou seja $X(t, t') \rightarrow 0$ quando $t \rightarrow \infty$, que é um resultado peculiar. O mesmo comportamento é observado em sistemas com crescimento de domínios, com ou sem desordem. Em outros sistemas, como por exemplo vidros de spin com spins do tipo Ising ou vetoriais, e modelos para vidros estruturais, a função X tende a tempos grandes para uma função não trivial, o que permite interpretar a razão de flutuação-dissipação $X(t, t')$ em termos de uma temperatura efetiva. No presente caso essa interpretação não é natural.

A densidade de energia

Para obter a densidade de energia em função do tempo seguimos o mesmo caminho feito para o caso de temperatura zero. A equação (4.67) ainda é válida, ou seja,

$$\varepsilon(t) = -\frac{1}{2} \lim_{t' \rightarrow t} \frac{\partial C(t, t')}{\partial t} - \frac{z(t)}{2} \quad (4.126)$$

Temos que calcular, para o caso de temperatura finita o termo da derivada da correlação. Derivando explicitamente na equação (4.76) obtemos:

$$\lim_{t' \rightarrow t} \frac{\partial C(t, t')}{\partial t} = -\frac{1}{2} \frac{\Gamma'(t)}{\Gamma(t)} + \frac{1}{\Gamma(t)} \left\{ \int d\lambda \lambda \rho(\lambda) y_\lambda^2(0) e^{2\lambda t} + 2T \int_0^t du \Gamma(u) \int d\lambda \lambda \rho(\lambda) e^{2\lambda(t-u)} \right\} \quad (4.127)$$

A derivada da função $\Gamma(t)$ é:

$$\Gamma'(t) = 2 \int d\lambda \lambda \rho(\lambda) e^{2\lambda t} + 2T \Gamma(t) \int d\lambda \rho(\lambda) + 4T \int_0^t du \Gamma(u) \int d\lambda \lambda \rho(\lambda) e^{2\lambda(t-u)} \quad (4.128)$$

Então

$$\lim_{t' \rightarrow t} \frac{\partial C(t, t')}{\partial t} = -\frac{1}{2} \frac{\Gamma'(t)}{\Gamma(t)} + \frac{1}{2\Gamma(t)} [\Gamma'(t) - 2T \Gamma(t)] = -T \quad (4.129)$$

Então a densidade de energia é dada por:

$$\varepsilon(t) = \frac{1}{2} [T - z(t)] \quad (4.130)$$

Lembrando que $z(t) = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial t} \ln \Gamma(t)$, no limite de tempos grandes obtemos:

$$\varepsilon(t) \approx \frac{T}{2} - 1 + \frac{3}{8t} \quad (4.131)$$

que para $t \rightarrow \infty$ coincide com o valor obtido no cálculo estático. A densidade de energia relaxa para o valor de equilíbrio em forma algébrica.

4.5.2 Condição inicial “staggered”

Esta condição inicial está caracterizada por apresentar uma superposição macroscópica com um ou poucos dos autovetores da base diagonal da matriz de interação. Vamos ver que somente no caso de uma condição inicial staggered com uma superposição macroscópica com o autovetor correspondente ao máximo autovalor

o sistema poderá atingir o equilíbrio termodinâmico, surgindo um estado correspondente a um condensado sobre esse autoestado de λ_{max} . A condição inicial “staggered” com superposição com somente um autoestado tem a forma:

$$y_i(0) = \sqrt{N} \delta_{i,a} \quad i, a = 1 \dots N \quad (4.132)$$

A normalização com \sqrt{N} é necessária para satisfazer o vínculo esférico. Com esta condição inicial a equação (4.87) se reduz a:

$$\Gamma(t) = \frac{1}{2} \frac{e^{2at}}{(1 - T\chi(a))} + \frac{T}{2} \int d\lambda \frac{\rho(\lambda) e^{2\lambda t}}{(1 - T\chi(\lambda))^2 (\lambda - a)} \quad (4.133)$$

A integral no segundo termo será dominada, a tempos grandes, pelo máximo autovvalor. Então desenvolvendo para $\lambda = 2 - \epsilon$ obtemos:

$$\int d\lambda \frac{\rho(\lambda) e^{2\lambda t}}{(1 - T\chi(\lambda))^2 (\lambda - a)} \rightarrow \frac{e^{4t}}{\pi(1 - T)^2} \int_0^4 d\epsilon \frac{\epsilon^{1/2} e^{-2\epsilon t}}{(2 - \epsilon - a)} \quad (4.134)$$

Agora podemos distinguir entre dois casos:

Se $a = 2$:

$$\Gamma(t) = \frac{1}{2} \frac{e^{4t}}{1 - T} - \frac{2}{\sqrt{2\pi} (1 - T)^2} \frac{e^{4t}}{t^{1/2}} \rightarrow \frac{1}{2} \frac{e^{4t}}{1 - T} \quad (4.135)$$

Se $a \neq 2$:

$$\Gamma(t) = \frac{1}{2} \frac{e^{2at}}{(1 - T\chi(a))} + \frac{T}{2} \frac{1}{4\sqrt{\pi} (1 - T)^2} \frac{e^{4t}}{(2 - a)t^{3/2}} \stackrel{t \rightarrow \infty}{\propto} \frac{T}{(1 - T)^2} \frac{e^{4t}}{(2 - a)t^{3/2}} \quad (4.136)$$

A magnetização staggered

Neste caso a magnetização tem a forma:

$$\langle y_i(t) \rangle = \sqrt{N} \delta_{i,a} \frac{e^{\lambda_i t}}{\sqrt{\Gamma(t)}} \quad (4.137)$$

Como cada componente é diretamente proporcional ao seu valor inicial, todas as componentes cuja condição inicial é zero permanecerão zero para todos os tempos. Somente a componente inicialmente não nula poderá sofrer alguma evolução dinâmica. Para a componente não nula distinguimos dois casos:

i) Se $a = 2$ o sistema é inicializado com uma superposição macroscópica com o máximo autovalor. Neste caso para tempos grandes:

$$\begin{aligned} \langle y_i(t) \rangle &= 0 \quad \forall i \neq 2 \\ \langle y_2(t) \rangle &\propto \sqrt{q_{EA}} \end{aligned} \quad (4.138)$$

Ou seja todos os autoestados ficam permanentemente vazios exeto o correspondente ao máximo autovalor que relaxa até o seu valor de equilíbrio final macroscópico proporcional à raiz quadrada do parâmetro de Edwards-Anderson.

ii) Se $a \neq 2$

$$\begin{aligned} \langle y_i(t) \rangle &= 0 \quad \forall i \neq a \\ \langle y_a(t) \rangle &\propto e^{(a-2)t} t^{3/4} \end{aligned} \quad (4.139)$$

Neste caso todos os modos vão a zero assintoticamente.

A autocorrelação

Para a condição staggered a autocorrelação (4.76) toma a forma:

$$C(t, t') = \frac{1}{\sqrt{\Gamma(t)\Gamma(t')}} \left\{ e^{a(t+t')} + 2T \int_0^{t'} du \Gamma(u) \int d\lambda \rho(\lambda) e^{\lambda(t+t'-2u)} \right\} \quad (4.140)$$

Fazendo uma análise da integral do segundo termo segundo os passos feitos para o caso de c.i. desordenadas, podemos distinguir também dois comportamentos diferentes segundo $a = 2$ ou $a \neq 2$. No que seria o regime de aging, $t - t' \gg t'$ ou $0 \leq u = t'/t \leq 1$, obtemos:

$$C(t, t') \simeq q_{EA} \quad \text{se } a = 2$$

e

$$\begin{aligned} C(t, t') &\simeq q_{EA} \left[\frac{t t'}{(t + t')^2} \right]^{3/4} \\ &= q_{EA} \frac{u^{3/4}}{(1 + u)^{3/2}} \quad \text{se } a \neq 2 \end{aligned} \quad (4.141)$$

Este resultado mostra que o sistema apresenta aging somente se inicializado em um autoestado com $a \neq 2$. Neste caso a autocorrelação apresenta

assintoticamente um comportamento de escala como $u^{3/4}$, idêntico ao comportamento no regime de aging para condições iniciais desordenadas. No entanto, quando inicializado sobre o máximo autovalor o sistema relaxa dentro desse autoestado com dinâmica estacionária, numa região de tamanho típico $1 - q_{EA}$. Essa diferença de comportamento é compreensível já que $a = 2$ corresponde ao estado fundamental do sistema, então uma vez lá o sistema relaxará somente dentro desse estado com dinâmica de equilíbrio. Se inicializado em um outro estado, de maior energia, ele relaxará com dinâmica de não-equilíbrio e apresentará um regime de aging.

A resposta

A resposta é dada pela equação (4.102):

$$R(t, t') = \sqrt{\frac{\Gamma(t')}{\Gamma(t)}} \frac{I_1[2(t - t')]}{t - t'} \quad (4.142)$$

Notamos que depende das condições iniciais somente através da função $\Gamma(t)$. Então no caso em que $a \neq 2$ o comportamento da mesma será idêntico ao caso de c.i. desordenadas, já que o comportamento assintótico da função Γ é o mesmo. No caso $a = 2$ obtemos:

$$R(t, t') \propto e^{-2(t-t')} \frac{I_1[2(t - t')]}{t - t'} \quad (4.143)$$

onde vemos que o comportamento é estacionário, de acordo com os comportamentos já vistos das outras grandezas neste caso. Verificamos então que a dinâmica do sistema desde uma condição inicial com uma superposição macroscópica com a direção do máximo autovalor é uma dinâmica de equilíbrio. Se pode verificar ainda que a forma da relaxação da resposta neste caso é a mesma que a obtida para o regime estacionário com condições iniciais desordenadas. Nos outros casos o sistema nunca atinge o equilíbrio termodinâmico.

Capítulo 5

A superfície de energia do modelo SK esférico

5.1 Campo externo nulo

Como vimos, o modelo esférico apresenta uma rica dinâmica de relaxação, com regimes de dinâmica estacionária, de equilíbrio, e outros regimes de dinâmica fora do equilíbrio, que dependendo das condições iniciais, pode nunca atingir o equilíbrio termodinâmico em escalas de tempo finitas. Sendo um modelo hamiltoniano, é natural pensar que a dinâmica de relaxação esteja fortemente influenciada pela estrutura da energia potencial do sistema. A energia potencial do modelo SK esférico:

$$\mathcal{H}[S_1, S_2, \dots, S_N] = -\frac{1}{2} \sum_{i,j}^N J_{ij} S_i S_j, \quad (5.1)$$

é uma função $\mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}$, definida num espaço real N-dimensional. A medida que o sistema relaxa com uma dinâmica dissipativa, ele perde energia para o banho térmico e irá se aproximar dos pontos de equilíbrio da superfície de energia. Como a dimensão da superfície é muito grande, podemos esperar que esta apresente um número grande de *pontos críticos*, que são pontos onde as derivadas parciais se anulam. Então, esperamos obter informação relevante sobre a dinâmica a tempos grandes se conseguirmos caracterizar a topologia da superfície de energia do sistema.

Como as configurações de spins do modelo devem satisfazer o vínculo esférico $\sum_{i=1}^N S_i^2 = N$, não é todo o espaço dos números reais que as variáveis podem

tomar, mas um subconjunto que satisfaça o vínculo. Assim, para obter os pontos críticos da superfície de energia respeitando o vínculo é conveniente trabalhar com a Lagrangiana:

$$\mathcal{L}_N = \mathcal{H}_N + \frac{z}{2} \left(\sum_{i=1}^N S_i^2 - N \right). \quad (5.2)$$

Os pontos críticos da Lagrangiana são dados por:

$$\left. \frac{\partial \mathcal{L}_N}{\partial S_i} \right|_{S_i^c} = 0 \quad i = 1, \dots, N \quad (5.3)$$

ou seja, são solução do sistema de equações

$$-\sum_{j=1}^N J_{ij} S_j^c + z S_i^c = 0 \quad i = 1, \dots, N \quad (5.4)$$

Multiplicando as equações por S_i^c , somando no índice i e usando a condição de vínculo esférico se obtém uma relação direta entre o multiplicador de Lagrange e a densidade de energia do sistema, calculada no ponto crítico dado:

$$z = \frac{1}{N} \sum_{i,j} J_{ij} S_i^c S_j^c = -2 e(S^c). \quad (5.5)$$

Para obter as soluções é conveniente trabalhar na base que diagonaliza a matriz de interação:

$$\mathcal{L}_N = -\frac{1}{2} \sum_{j=1}^N \lambda_j Y_j^2 + \frac{z}{2} \left(\sum_{j=1}^N Y_j^2 - N \right). \quad (5.6)$$

As equações do pontos críticos são:

$$\left. \frac{\partial \mathcal{L}_N}{\partial Y_k} \right|_{Y_k^c} = (\lambda_k - z^c) Y_k^c = 0, \quad k = 1, \dots, N. \quad (5.7)$$

Assumindo que o espectro de autovalores da matriz \mathbf{J} é não degenerado, se $\lambda_k \neq z^c$ para todo k , então se obtém a solução trivial $Y_k^c = 0$ para todo k . As soluções não triviais correspondem aos casos em que algum dos autovalores, por exemplo $\lambda_s = z^c$. Neste caso $Y_k^c = 0$ para todo $k \neq s$, e então $Y_s^c = \pm \sqrt{N}$, para satisfazer o vínculo esférico.

Concluimos que os autovalores da matriz de interação satisfazem:

$$\lambda_k = z^c = -2e^c, \quad (5.8)$$

onde e^c é a densidade de energia no ponto crítico correspondente \mathbf{Y}^k , que é dado por:

$$\mathbf{Y}^k = \pm \sqrt{N} \mathbf{V}^k. \quad (5.9)$$

onde \mathbf{V}^k é o k -ésimo autovetor da matriz de interação. Então,

- **existem $2N$ pontos críticos na superfície de energia do modelo SK esférico, correspondentes aos autovetores da matriz \mathbf{J} .**

Para caracterizar ainda mais a superfície de energia é importante conhecer a estabilidade dos pontos críticos. A estabilidade de um ponto crítico dado em cada uma das N direções sobre a superfície de energia é dada pelos autovalores da matriz de derivadas segundas da Lagrangiana, chamada de *matriz Hessiana*, ou simplesmente Hessiano:

$$\begin{aligned} H_{ij}[S_1, S_2, \dots, S_N] &= \frac{\partial^2 \mathcal{L}_N}{\partial S_i \partial S_j} \\ &= -J_{ij} + z \delta_{ij}. \end{aligned} \quad (5.10)$$

Como no k -ésimo ponto crítico, $z^c = \lambda_k$, o Hessiano no ponto crítico k da superfície de energia é dado por:

$$H_{ij} = -J_{ij} + \lambda_k \delta_{ij}. \quad (5.11)$$

Como consequência, os autovalores do Hessiano no ponto crítico k resultam:

$$\Lambda_s = \lambda_k - \lambda_s, \quad s = 1, \dots, N. \quad (5.12)$$

Notamos que, na direção do ponto crítico k dado, o autovalor correspondente $\Lambda_k = 0$. Esta direção, paralela à direção do ponto crítico, é radial, aponta radialmente para fora da esfera, e por tanto, viola o vínculo esférico e deve ser desconsiderada. Como consequência do vínculo, existem apenas $N - 1$ direções relevantes sobre a hipersfera, tangentes a ela, e não N como seria o caso em ausência de vínculo.

Ordenando os autovalores da matriz \mathbf{J} em ordem decrescente $\lambda_N < \lambda_{N-1} < \dots < \lambda_2 < \lambda_1$, podemos ordenar os pontos críticos da superfície de energia do modelo de acordo com a sua estabilidade:

- 2 máximos (índice $N - 1$)
 $\rightarrow e_N = -\frac{\lambda_N}{2} \rightarrow \Lambda_N = \lambda_N - \lambda_s \leq 0$ para todo s .
- 2 pontos de sela de índice $N - 2$
 $\rightarrow e_{N-1} = -\frac{\lambda_{N-1}}{2} \rightarrow \Lambda_{N-1} = \lambda_{N-1} - \lambda_s \leq 0$.
-
-
-
- 2 mínimos (índice 0)
 $\rightarrow e_1 = -\frac{\lambda_1}{2} \rightarrow \Lambda_1 = \lambda_1 - \lambda_s \geq 0$ para todo s .

O **índice** de um ponto crítico se define como o *número de autovalores negativos* do ponto.

Vemos assim que a estrutura de pontos críticos da superfície de energia do modelo SK esférico é relativamente simples, ao contrário do que poderíamos esperar dada a complexidade da relaxação do modelo. Existem apenas dois mínimos, que correspondem aos estados fundamentais degenerados. Todo o resto dos pontos críticos são pontos de sela, com uma ou mais direções instáveis. Em presença de ruído térmico, é de se esperar que o sistema relaxe para estados de menor energia aproveitando a presença destas direções instáveis. No entanto, como vimos, a relaxação para condições iniciais desordenadas é lenta, o sistema fica fora do equilíbrio em escalas de tempo que divergem. Logo, não é a presença de mínimos locais que produz a quebra fraca de ergodicidade. Podemos visualizar o processo de relaxação interpretando de forma dinâmica a matriz hessiana (5.11):

$$H_{ij}(t) = -J_{ij} + \lambda_k(t) \delta_{ij} = -J_{ij} - 2e_k(t) \delta_{ij}, \quad (5.13)$$

onde $e_k(t)$ é a densidade de energia do ponto crítico k , que vai diminuindo a medida que o sistema relaxa e visita pontos críticos de energia cada vez menor. Esta expressão mostra que, para um dado instante de tempo t no qual o sistema se encontra com o estado correspondente a um dos pontos críticos, o espectro de autovalores do Hessiano é igual ao espectro da matriz de interação \mathbf{J} mais um termo proporcional à densidade de energia do ponto crítico correspondente. Se o sistema é inicializado numa configuração de alta temperatura, desordenada, a densidade de energia é inicialmente zero, e a densidade de autovalores é dada pela distribuição de Wigner para o ensemble GOE. A medida que o tempo passa, o sistema visita regiões de energia menor, o que produz uma contribuição na

densidade de autovalores do Hessiano, correspondente a um deslocamento para a direita da lei semicircular de Wigner, como mostrado na figura 5.1. Notamos que

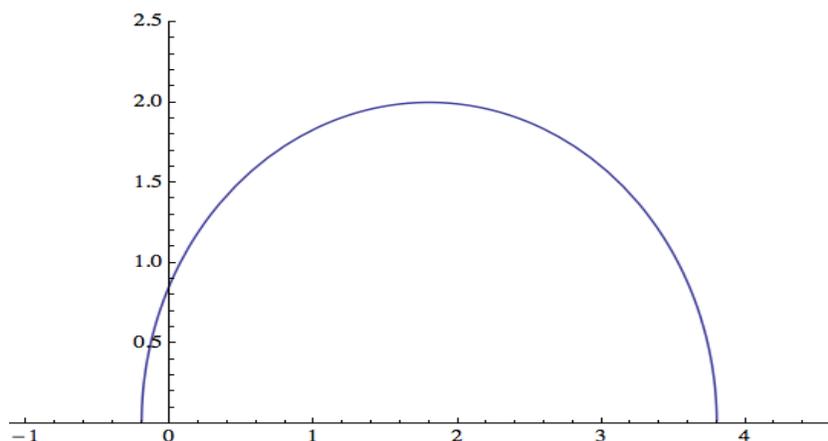


Figura 5.1: A densidade de autovalores da matriz Hessiana para tempos grandes.

a lei de Wigner apresenta sempre uma densidade finita de autovalores na vizinhança da origem. Estes autovalores, muito pequenos, correspondem a direções aproximadamente planas da superfície de energia. È por estas direções que o sistema pode escapar dos pontos críticos para tempos grandes, quando a maioria das direções possuem curvatura positiva, são estáveis. Mas, como a curvatura destas direções é muito pequena, a dinâmica ao longo delas se torna lenta.

Em conclusão, não são mínimos locais o que torna lenta a dinâmica de relaxação do modelo esférico, e sim uma densidade finita de direções com curvatura nula ou quase nula, os chamados “modos zero”, que tornam lenta a relaxação do sistema. Uma pergunta que podemos nos fazer então, é se este mecanismo, a presença de modos zero, é característico em sistemas com relaxação lenta, ou se é uma propriedade limitada ao modelo esférico. Ainda não existe uma resposta geral e definitiva para esta questão.

5.2 Campo externo aleatório

Acrescentando um campo externo aleatório h_i , a Lagrangiana do modelo se escreve na forma:

$$\mathcal{L}_N = \mathcal{H}_N - \sum_{i=1}^N h_i S_i + \frac{z}{2} \left(\sum_{i=1}^N S_i^2 - N \right), \quad (5.14)$$

onde os campos locais h_i são variáveis aleatórias Gaussianas, com valor médio nulo $\langle h_i \rangle = 0$ e variância $\langle h_i^2 \rangle = \sigma^2$. As equações para os pontos críticos neste caso são:

$$- \sum_{j=1}^N J_{ij} S_j^c - h_i + z^c S_i^c = 0 \quad i = 1, \dots, N. \quad (5.15)$$

Fazendo o mesmo procedimento do caso sem campo externo, é possível mostrar que o multiplicador de Lagrange também é proporcional a densidade de energia nos pontos críticos:

$$z^c = -e^c(2J), \quad (5.16)$$

onde $e^c(2J)$ é a densidade de energia nos pontos críticos calculada substituindo J por $2J$. Este detalhe aparece por conta da presença do termo de campo externo (comparar com o resultado (5.5) para o caso sem campo). Notamos que o termo de campo externo não irá afetar a forma dos autovalores do Hessiano, que são dados por:

$$\Lambda_s = z^c - \lambda_s, \quad s = 1, \dots, N. \quad (5.17)$$

A diferença agora é que o valor de z^c não coincide com os autovalores da matriz \mathbf{J} . Podemos obter uma expressão para o multiplicador trabalhando na base que diagonaliza \mathbf{J} . Se escrevemos $\mathbf{S} = \mathbf{V}\mathbf{Y}$ e $\mathbf{h} = \mathbf{V}\mathbf{H}$ e usamos (5.16):

$$\begin{aligned} N z^c &= \mathbf{S}_c^T \mathbf{J} \mathbf{S}_c + \mathbf{h}^T \mathbf{S}_c \\ &= \sum_{j=1}^N \frac{z^c}{(z^c - \lambda_j)^2} H_j^2. \end{aligned} \quad (5.18)$$

No limite $N \rightarrow \infty$ a equação (5.18) se escreve:

$$\int_{\lambda} d\lambda \int_H dH \frac{H^2}{(z^c - \lambda)^2} \rho(\lambda) P(H) = 1. \quad (5.19)$$

Lembrando que os campos locais são variáveis Gaussianas descorrelacionadas que satisfazem:

$$\langle h_j^2 \rangle = \langle H_j^2 \rangle = \sigma^2, \quad (5.20)$$

a equação se reduz a:

$$\sigma^2 \int_{\lambda} d\lambda \frac{\rho(\lambda)}{(z^c - \lambda)^2} = 1. \quad (5.21)$$

Usando a lei semicircular, notamos que a integral diverge se $|z^c| \leq 2$. Para $|z^c| > 2$ a integral tem solução exata:

$$\int_{-2}^2 d\lambda \frac{\rho(\lambda)}{(z^c - \lambda)^2} = \frac{1}{2} \left(-1 + \frac{z^c}{\sqrt{(z^c)^2 - 4}} \right) = \frac{1}{\sigma^2}, \quad (5.22)$$

que tem duas soluções reais:

$$z^c = \pm \frac{2 + \sigma^2}{\sqrt{1 + \sigma^2}}. \quad (5.23)$$

Como $|z^c| > 2$, então:

$$\Lambda_s = -\lambda_s + z^c > 0 \quad \forall s \quad \text{se} \quad z^c = z_+^c, \quad (5.24)$$

que corresponde ao mínimo da energia, e

$$\Lambda_s < 0 \quad \forall s \quad \text{se} \quad z^c = z_-^c, \quad (5.25)$$

que corresponde ao máximo. Por tanto, **em presença de um campo aleatório de variância $\sigma \sim O(1)$, no limite termodinâmico, existem apenas dois pontos críticos, que correspondem a um máximo e ao mínimo de energia.** Neste sentido, se diz que a superfície de energia do modelo em presença de um campo externo é trivial.

No entanto, é possível mostrar que, para sistemas finitos, se a variância do campo externo σ^2 escalar com o tamanho do sistema, se pode transitar entre uma superfície de energia com $2N$ pontos críticos quando $\sigma^2 \sim O(N^{-1})$ até o limite de apenas dois pontos críticos quando $\sigma^2 \sim O(N^{-1/3})$) [27]. Em particular definido os parâmetros:

$$\gamma = N \frac{\sigma^2}{2J^2}, \quad \text{e} \quad \kappa = N^{1/3} \frac{\sigma^2}{J^2}, \quad (5.26)$$

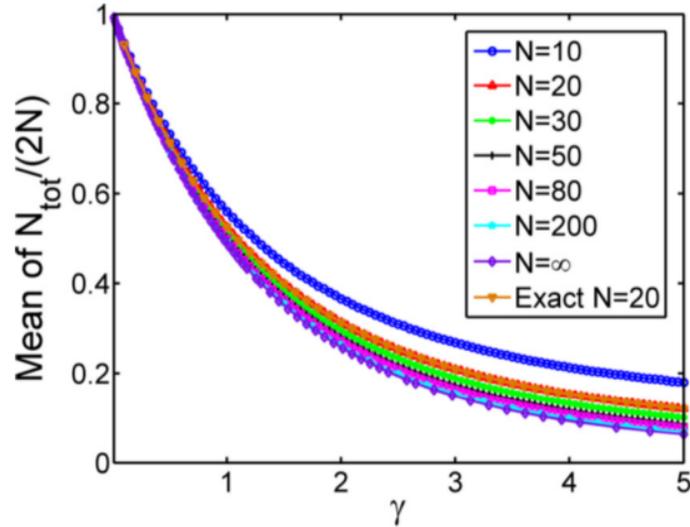


Figura 5.2: O número de pontos críticos no regime γ , ver texto para as definições.

no regime de γ finito, ou seja, se a variância do campo escala como $\sigma^2 \propto N^{-1}$, então o número de pontos críticos em função de γ é de ordem N , como mostrado na figura 5.2 [27, 28]. Já, se a variância escala como $\sigma^2 \propto N^{-1/3}$, ou seja, κ finito, o número de pontos críticos decai de $O(N)$ para $O(1)$. No caso do modelo SK esférico, como vimos, o número final é exatamente 2, como se mostra na figura 5.3.

Este cenário da variação do número de pontos críticos reais em superfícies de energia complexas, quando se inclui um campo externo aleatório, é chamado de **trivialização da topologia** [27]. É um fenômeno interessante e pode ser relevante para o problema de encontrar os estados fundamentais de sistemas com funções de energia complexas.

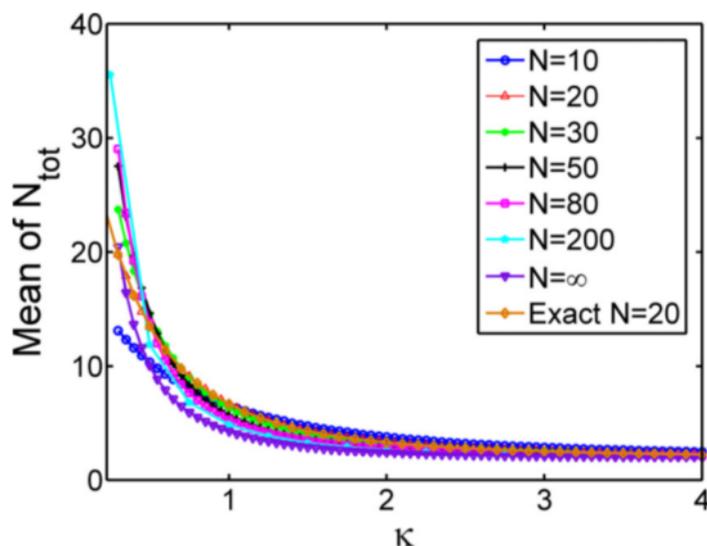


Figura 5.3: O número de pontos críticos no regime κ , ver texto para as definições.

Problemas de aplicação

1. Calcular as funções de auto-correlação e resposta a dois tempos $C(t, t')$ e $R(t, t')$ para as coordenadas de uma partícula em uma dimensão espacial, sujeita a um potencial harmônico simples, no limite súper-amortecido, ou seja desprezando o termo de inércia, sendo k a constante elástica e γ o coeficiente de amortecimento. Analisar e discutir a validade do TFD nos casos $k > 0$, $k = 0$ (ausência de potencial) e $k < 0$ (potencial sem limite inferior, instável). Notar que o caso $k = 0$ corresponde à difusão livre de uma partícula súper-amortecida.
2. Considere as funções de autocorrelação (4.52) e resposta (4.55) a dois tempos do modelo SK esférico a temperatura zero. Para diferentes tempos de espera $t' = t_w$, faça gráficos das funções em termos da diferença entre os tempos $t - t_w$, em escala linear-log. Analise o resultado para os diferentes regimes temporais. A seguir, grafique as mesmas funções em

termos da variável $u = t_w/t$ e verifique que, no regime de aging, as funções dependem somente da variável u .

Referências Bibliográficas

- [1] A. J. Bray, *Theory of phase-ordering kinetics*, Adv. Phys. **43**, 357 (1994).
- [2] P. C. Hohenberg e P. C. Halperin, *Theory of dynamic critical phenomena*, Rev. Mod. Phys. **49**, 435 (1977).
- [3] P G Debenedetti, *Metastable Liquids, Concepts and Principles*, (Princeton University Press, Princeton, 1996).
- [4] C A Angell, K L Ngai, G B McKenna, P F McMillan and S W Marint, *Relaxation in glassforming liquids and amorphous solids*, J. App. Lett. **88** (2000), 3113.
- [5] P. G. Debenedetti e F. H. Stillinger, *Supercooled liquids and the glass transition*, Nature **410**, 259 (2001).
- [6] G. Biroli e J. P. Garrahan, *Perspective: the Glass Transition*, J. Chem. Phys. **138**, 12A301 (2013).
- [7] H-M Jaeger, S. R. Nagel e R. P. Behringer, Rev. Mod. Phys. **68**, 1259 (1996).
- [8] T S Majumdar, M Sperl, S Luding and R P Behringer, *Jamming Transition in Granular Systems*, Phys. Rev. Lett. **98**, 085001 (2007).
- [9] P Charbonneau, J Kurchan, G Parisi, P Urbani, F Zamponi, *Glass and Jamming Transitions: from exact results to finite-dimensional descriptions*, Ann. Rev. Cond. Matt. Phys. **8**, 265 (2017), arXiv:1605.03008.
- [10] K Binder and A P Young, *Spin Glasses: Experimental facts, theoretical concepts and open questions*, Rev. Mod. Phys. **58** (1986), 801.

- [11] K H Fischer and J A Hertz, *Spin Glasses*, (Cambridge University Press, Cambridge, 1991).
- [12] M Mèzard, G Parisi and M A Virasoro, *Spin Glass Theory and Beyond*, (World Scientific, Singapore, 1987).
- [13] A P Young, editor, *Spin Glasses and Random Fields*, (World Scientific, Singapore, 1998).
- [14] T Nattermann, *Theory of the random field Ising model*, in [13].
- [15] V Dotsenko, *Introduction to the Replica Theory of Disordered Statistical Systems*, (Cambridge University Press, Cambridge, 2001).
- [16] D A Stariolo and J J Arenzon, *Off equilibrium dynamics of the frustrated Ising lattice gas*, Phys. Rev. E **59** (1999), R4762.
- [17] F Ricci-Tersenghi, D A Stariolo and J J Arenzon, *Two time scales and violation of the Fluctuation-Dissipation Theorem in a finite dimensional model for structural glasses*, Phys. Rev. Lett. **84** (2000), 4473.
- [18] D Fisher and D Huse, *Nonequilibrium dynamics of spin glasses*, Phys. Rev. B **38** (1988), 373.
- [19] R Kubo, M Toda and N Hashitsume, *Statistical Physics II, Nonequilibrium Statistical Mechanics*, (Springer, Berlin, 1991).
- [20] T H Berlin and M Kac, Phys. Rev. **86**, 821 (1952).
- [21] R. J. Baxter, *Exactly Solved Models in Statistical Mechanics*, Academic Press, London, 1989.
- [22] J J Binney, N J Dowrick, A J Fisher and M E J Newman, *The Theory of Critical Phenomena*, (Oxford University Press, Oxford, 1995).
- [23] I S Gradshteyn and I M Ryzhik, *Table of Integrals, series and products*, (Academic Press, New York, 1965).
- [24] J M Kosterlitz, D J Thouless e R. C. Jones, *Spherical Model of a Spin Glass*, Phys. Rev. Lett. **36**, 1217 (1976).
- [25] L. Cugliandolo e D. Dean, *Full dynamical solution for a spherical spin glass model*, J. Phys. A: Math. Gen. **28**, 4213 (1995).

- [26] J Kurchan and L Laloux, *Phase space geometry and slow dynamics*, J. Phys. A: Math. Gen. **29**, 1929 (1996).
- [27] Y Fyodorov and P Doussal, J. Stat. Phys. **154**, 466 (2013).
- [28] D Mehta, J D Hauenstein, M Niemerg, N J Simm and D A Stariolo, Phys. Rev. E **91** 022133 (2015).