

# Model d'Ising amb camps aleatoris: proprietats i aplicacions

Tesi presentada per  
**Xavier Illa i Tortós**  
per optar al títol de Doctor en Física



Departament d'Estructura i Constituents de la Matèria  
Universitat de Barcelona



# Model d'Ising amb camps aleatoris: proprietats i aplicacions

Tesi presentada per  
**Xavier Illa i Tortós**  
per optar al títol de Doctor en Física

Aquesta tesi va ser inscrita dins el programa de doctorat de Física Avançada (bienni 2001-2003) impartit pel Departament d'Estructura i Constituents de la Matèria de la Universitat de Barcelona. Ha estat dirigida pel Dr. Eduard Vives i Santa-Eulàlia, Professor titular d'aquest mateix departament.

Barcelona, desembre de 2006

Eduard Vives i Santa-Eulàlia



La realització d'aquesta tesi ha estat possible gràcies a la concessió d'una beca predoctoral per a la *Formación de Personal Investigador (FPI)* concedida per la *Dirección General de Investigación del Ministerio de Educación y Ciencia*.



*A la memòria del meu pare*





# Agraïments

Ara que falten menys de 48 hores per realitzar el dipòsit de la tesi, i que no estic prou inspirat per fer-li els últims retocs, és bon moment per recordar totes les persones, que d'una o altra forma, han fet possible la realització d'aquesta memòria.

En primer lloc vull donar les gràcies al meu director de tesi, l'Eduard Vives, pel seu suport, ajuda i confiança durant tots aquests anys de treball conjunt. Li vull agrair el tracte amigable i la seva disposició incondicional per ajudar-me davant de qualsevol dificultat, tant en el pla acadèmic com personal. La passió amb que viu la ciència i la visió optimista amb que afronta els entrebancs m'han ajudat en els moments de menys motivació. També vull estendre aquest agraïment als altres membres del grup: Antoni Planes, Lluís Mañosa i Teresa Castán. Vull donar-los les gràcies a tots ells perquè, amb el seu tracte amable i proper, creen un bon ambient de “grup” afavorint que tothom dongui el millor de si mateix. També vull agrair la tasca de tots els professors que he tingut durant la carrera, els cursos de doctorat i els treballs tutelats. Especialment vull agrair a Jordi Ortín la tutela d'un dels treballs que va desembocar, després d'intenses discussions amb l'Eduard, amb bona part dels càlculs analítics que es presenten en aquesta memòria. Ja posats a agrair tasques docents, vull agrair a tots els professors de l'Escola Pia de Calella i de l'Escola Pia de Mataró la seva contribució a la meva formació. M'agradaria mencionar especialment a la Pilar Tiers, l'Eva García i en David Cambray els quals em van influir molt positivament i em van ajudar a superar una etapa difícil. Agrair també a la Jenny les classes d'anglès que a vegades eren més una teràpia que no pas una classe.

Si passem a la secció més “junior”, primer de tot agrair a Jordi Marcos, Carles Triguero i Francisco José Pérez Reche, àlias Paco, l'acollida càlida i amigable dins del grup. També vull donar les gràcies a aquest últim per les sempre interessants discussions científiques en temes comuns i a Eduard Pauné pels bons consells de Linux i  $\LaTeX$  que em va donar durant el temps que vam treballar esquena amb esquena, i mai millor dit. Vull tenir un agraïment molt especial per la Maria Mañosas i la Mireia Torralba amb les quals he compartit tots els estadis del doctorat ja que vam iniciar conjuntament aquest camí. Recentment la incorporació de nous “personatges” com en Ramon Planet, en Xavier Moya i en Josep Maria Huguet; amb els quals he establert uns lligams més enllà dels laborals, han fet molt més amens aquests darrers anys. Tampoc em vull oblidar d'agrair els bons

moments passats amb els altres companys del grup com en Marcel Porta, l'Erell Bonnot i en Pol Lloveras.

Sense deixar l'àmbit universitari també vull mencionar els meus companys de promoció: l'Oriol, en Miquel, la Neus, l'Artur, l'Albert, en Jordi, etc...a tots ells gràcies pels magnífics anys que vam compartir durant la carrera i les mítiques partides de cartes a l'“hora del pati”.

Passem ara als agraïments internacionals, primer de tot vull agrair l'hospitalitat i amabilitat de Gianfranco Durin, Vittorio Basso i Martino LoBue durant la meva estada a l'*IEN Galileo Ferraris* de Torino. També agrair l'amabilitat de Martin-Luc Rosinberg i Gilles Tarjus durant la meva estada al *Laboratoire de Physique Théorique de la Matière Condensée* de l'*Université Pierre et Marie Curie* de París. Aquesta última estada va ser molt enriquidora tant científicament com a nivell personal, realment vaig passar uns moments inoblidables a París juntament amb en Fèlix Campelo i l'Arnau Rios et al. La volta en bicicleta a París va ser impressionant....que s'apartin les criatures!!!..bé amics sempre ens quedarà París o millor dit, sempre ens quedarà *Motorgueil*. A part dels meus moviments cap a països forans també vull fer esment de les profitoses visites de professors estrangers, vull donar les gràcies pels sempre interessants consells de Bosiljka Tadić, pel mètode “mambo jambo” de Prabodh Shukla i destacar la gran feina feta amb en Martin-Luc Rosinberg duran la seva estada a Barcelona.

En aquest apartat d'agraïments no podia faltar un reconeixement especial a totes aquelles persones amb qui he compartit altres aspectes menys científics de la vida. Vull donar les gràcies a tota la meva família que han seguit amb interès el meu treball. Sobretot destacar el recolzament constant dels meus pares –Maria Rosa i Andreu– i de la meva germana Núria. Malauradament el meu pare i el meu avi Bonaventura, dues de les persones a qui més il·lusió va fer que escollís el camí de la investigació, no podran estar presents per viure el punt i seguit que representa la defensa de la tesi. Un record molt especial per ells.

Passant a l'apartat de lligams no familiars, he d'agrair a la Sira els bons moments que vam compartir i el seu suport durant el temps que vam estar junts. També vull mencionar a “*mi primo*” Carles que sempre em fa la inquietant pregunta: “Això que fas de què serveix a l'altre gent?” que mai li he sabut respondre de forma convincent i del seu fill Òscar, un culé culé, que resulta que és el meu fillol, a qui cada any li porto la mona pel bé de la meva integritat física ja que la seva mare, la Sílvia, té molt caràcter. Destacar els meus “*tetes*” Albert i David amb els que fa més de dotze anys que comparteixo esquíades, escalades, sortides amb “bici”, etc... i també sortides amb molt de vici. Aquestes activitats no tan esportives les combino amb els de la colla del poble com en Joan Maria, la Marta, les Montse's, en Ramon, en Marc, l'Eva, els Joan's, en Salva, en Quim, la Roser etc... i la resta de la penya del “Kiki”, nom del bar on quedem normalment no penseu malament. També vull tenir un record especial pels companys d'aventures del Centre Excursionista de Calella, aquesta entitat i el grup de gent que hi he conegut, com per exemple en Narcís, en Burji, en Xevi Juhé, en Mussa, en Raül,

l'Oscar, en Dani, etc... sempre han tingut un paper molt important a la meua vida. Per anar acabant vull donar les gràcies a la resta d'amics i amigues de Vic i comarca per tots els bons moments que hem passat junts tant en les competicions amb l'equip de raids d'aventura com en altres activitats més lúdico-festives. D'entre tots ells vull mencionar especialment l'Òscar, en Joan, en Pep, la Isa, en Toni "moreno" i en Pep Redorta ja que són amb els que he viscut més "batallites".

Finalment donar-vos les gràcies a tots per haver estat al meu costat tant en els bons moments com en els dolents. Moltes gràcies !!

*Calella, 16 de desembre de 2006.*



# Índex

<b>Agraïments</b>	<b>vii</b>
<b>1 Introducció</b>	<b>1</b>
1.1 Termodinàmica dels sistemes ferromagnètics simples . . . . .	2
1.2 Aproximació de Landau . . . . .	6
1.3 Histèresi i metastabilitat . . . . .	12
1.3.1 Histèresi <i>rate-dependent</i> . . . . .	13
1.3.2 Histèresi <i>rate-independent</i> . . . . .	15
1.4 Sistemes ferromagnètics reals . . . . .	16
<b>2 Models reticulars</b>	<b>19</b>
2.1 Tipus de xarxes . . . . .	20
2.1.1 Xarxa de connectivitat $N$ (MFM) . . . . .	20
2.1.2 Xarxes de Bethe . . . . .	21
2.1.3 Xarxes hipercúbiques . . . . .	22
2.2 Model d'Ising . . . . .	23
2.2.1 Model d'Ising: MFM . . . . .	24
2.2.2 Model d'Ising sobre xarxes de Bethe . . . . .	24
2.2.3 Model d'Ising sobre xarxes hipercúbiques . . . . .	25
2.3 El model d'Ising amb camps aleatoris . . . . .	26
2.4 El RFIM en equilibri . . . . .	27
2.4.1 RFIM en equilibri: MFM . . . . .	29
2.4.2 RFIM en equilibri sobre xarxes de Bethe . . . . .	31
2.4.3 RFIM en equilibri sobre xarxes hipercúbiques . . . . .	33
2.5 El RFIM amb dinàmica metastable . . . . .	35
2.5.1 RFIM metastable: MFM . . . . .	39

2.5.2	RFIM metastable sobre xarxes de Bethe . . . . .	41
2.5.3	RFIM metastable sobre xarxes hipercúbiques . . . . .	42
2.6	Resum de resultats . . . . .	44
<b>3</b>	<b>Tractament exacte del RFIM amb dinàmica <i>1-spin-flip</i></b>	<b>47</b>
3.1	Introducció . . . . .	47
3.2	Relaxació a dos passos . . . . .	48
3.3	Quantitats bàsiques pels càlculs . . . . .	49
3.4	Imantació . . . . .	51
3.5	Energia interna . . . . .	55
3.5.1	Energia d'intercanvi . . . . .	56
3.5.2	Energia d'acoblament amb el desordre . . . . .	59
3.6	Hamiltonià . . . . .	61
3.7	Energia dissipada . . . . .	62
3.8	Trajectòries de tornada de primer ordre . . . . .	64
3.9	Connectivitat infinita . . . . .	66
3.10	Sumari i conclusions . . . . .	70
<b>4</b>	<b>Tractament exacte del RFIM amb dinàmica <i>2-spin-flip</i></b>	<b>71</b>
4.1	Introducció . . . . .	71
4.2	Model i dinàmica . . . . .	72
4.3	Equacions auto-consistents per la xarxa de Bethe . . . . .	74
4.4	Solució exacte per la cadena unidimensional . . . . .	78
4.5	Solució exacte per la xarxa de Bethe amb connectivitat $z = 3$ . . . . .	88
4.6	Comparació amb les simulacions i discussió dels resultats . . . . .	95
4.7	Sumari i conclusions . . . . .	99
<b>5</b>	<b>Generalització del desordre: el RFIM diluït</b>	<b>101</b>
5.1	Introducció . . . . .	101
5.2	Model i Simulacions . . . . .	102
5.3	Resultats numèrics . . . . .	103
5.4	Hipòtesis de FSS . . . . .	105
5.5	Variable d'escala . . . . .	108
5.6	Discussió . . . . .	112
5.7	Sumari i conclusions . . . . .	115

---

<b>6 Propietats estadístiques dels <i>pinning fields</i></b>	<b>117</b>
6.1 Introducció . . . . .	117
6.2 Model . . . . .	118
6.3 Resultats . . . . .	120
6.4 Sumari i conclusions . . . . .	122
<b>7 Model simple per l'<i>Exchange Bias</i></b>	<b>125</b>
7.1 Introducció . . . . .	125
7.2 Model . . . . .	126
7.3 Resultats numèrics . . . . .	127
7.4 Discussió . . . . .	130
7.5 Diagrames FORC's . . . . .	133
7.6 Comparació amb els experiments . . . . .	135
7.7 Sumari i conclusions . . . . .	137
<b>8 Conducció amb la imantació</b>	<b>141</b>
8.1 Introducció . . . . .	141
8.2 Model . . . . .	142
8.2.1 Dinàmica <i>H-driven</i> . . . . .	143
8.2.2 Dinàmica <i>M-driven</i> . . . . .	144
8.2.3 Fluctuacions i quantitats <i>self-averaging</i> . . . . .	146
8.3 Resultats per la xarxa de Bethe amb $z = 4$ . . . . .	147
8.3.1 Fracció d'estats metastables . . . . .	148
8.3.2 Energia interna . . . . .	150
8.3.3 Comportament estadístic del camp resposta . . . . .	154
8.4 Resultats per la xarxa cúbica . . . . .	156
8.5 Sumari i conclusions . . . . .	158
<b>9 Sumari i conclusions</b>	<b>161</b>
<b>Bibliografia</b>	<b>164</b>
Articles publicats per l'autor . . . . .	176





# Capítol 1

## Introducció

L'objectiu d'aquesta tesi és aprofundir en l'estudi dels models microscòpics que permeten estudiar la histèresi. Aquest fenomen està present en moltes àrees de la física i ha despertat l'interès de molts investigadors al llarg de la història. Encara avui en dia és un dels temes més rellevants entre la comunitat científica [1].

Entre tots els sistemes que presenten aquest fenomen ens centrarem en els sistemes que tenen un comportament atèrmic [2]. En aquests la histèresi no és conseqüència d'una competició entre la velocitat de conducció de la força externa i la velocitat de relaxació del sistema i per tant obtenim una histèresi que no depèn del ritme de variació de la força externa. En aquests la histèresi és deguda a la presència d'un escenari molt complex d'energia lliure amb un gran nombre d'estats metastables separats amb unes barreres energètiques molt altes. Aquestes barreres energètiques altes fan que el paper de les fluctuacions tèrmiques sigui negligible i que el sistema només pugui evolucionar quan el conduïm amb un camp extern. Tal i com es veurà, aquests sistemes presenten una evolució amb una dinàmica d'allaus.

Aquest comportament està present en una gran varietat de sistemes de naturalesa ben diferent com els ferromagnètics [3–6], els materials martensítics [7–9], els sistemes ferroelèctrics [10, 11], el moviment dels vòrtexs en els superconductors de tipus II [12, 13] i a la condensació de  $^4\text{He}$  en sòlids porosos [14]. Malgrat que utilitzarem el llenguatge dels sistemes ferromagnètics la majoria dels resultats són generalitzables a tots aquests sistemes que presenten aquest comportament atèrmic.

En aquesta tesi aprofundirem en un dels models microscòpics que ha servit per modelitzar el comportament dels sistemes ferromagnètics reals. Aquest model s'obté fent una extensió del model d'Ising habitual i s'anomena model d'Ising amb camps aleatoris (RFIM) que s'explicarà al capítol 2. Malgrat que es pot estudiar el comportament d'equilibri, els nostres estudis han estat enfocats a estudiar-lo amb una dinàmica metastable a temperatura zero que serveix per modelitzar el comportament dels sistemes atèrmics [15, 16]. En els capítols 3 i 4 presentarem els càlculs analítics que hem realitzat del model, en els capítols 5 i 6 estudiarem

algunes propietats del model i finalment en els capítols 7 i 8 aplicarem el model per interpretar algunes observacions experimentals.

L'objectiu final d'aquest primer capítol introductori és justificar qualitativament el comportament dels sistemes ferromagnètics reals. Per fer-ho, a la secció 1.1 introduïrem la termodinàmica dels sistemes ferromagnètics simples. A la secció 1.2 explicarem els ingredients bàsics de l'aproximació de Landau que ens permetrà donar una explicació fenomenològica del comportament dels sistemes descrits a la secció anterior. Sense abandonar el marc de l'aproximació de Landau a la secció 1.3 relacionarem la metastabilitat amb la histèresi, i finalment a la secció 1.4 explicarem qualitativament el comportament histerètic dels sistemes ferromagnètics reals.

## 1.1 Termodinàmica dels sistemes ferromagnètics simples

A nivell acadèmic la termodinàmica es formula amb sistemes hidrostàtics simples que es poden descriure amb les quantitats macroscòpiques del volum, la pressió i la temperatura  $(V, P, T)$ . En aquesta secció ens disposem a introduir la termodinàmica dels sistemes ferromagnètics simples. Aquests queden descrits per les quantitats macroscòpiques següents: la imantació, el camp magnètic aplicat i la temperatura  $(M, H, T)$ . La imantació és una quantitat extensiva directament relacionada amb l'estat intern del sistema, el camp magnètic extern és una quantitat intensiva que imposem externament i la temperatura està relacionada amb les fluctuacions tèrmiques del sistema. En equilibri termodinàmic aquestes variables compleixen una equació d'estat  $f(M, H, T) = 0$  que introdueix un lligam entre elles.

De la teoria de la termodinàmica [17, 18] és ben sabut que el coneixement d'un potencial termodinàmic en funció de les seves variables naturals ens permet trobar totes les propietats termodinàmiques del sistema. Un potencial termodinàmic està expressat en funció de les seves variables naturals quan podem relacionar directament les derivades parcials d'aquest amb les propietats termodinàmiques del sistema.

El primer potencial termodinàmic que apareix de forma natural per un sistema aïllat és l'energia interna  $\mathcal{U}$ . Utilitzant el Primer principi i el Segon principi de la termodinàmica per un procés quasi-estàtic i reversible es pot trobar la diferencial d'aquesta quantitat

$$d\mathcal{U} = +TdS + HdM, \quad (1.1)$$

on  $S$  és l'entropia del sistema,  $TdS$  és la calor bescanviada pel sistema amb l'exterior i  $HdM$  és el treball fet sobre el sistema. Per tant en un sistema aïllat en el que no varia l'entropia  $S$  ni la imantació  $M$ , l'energia interna  $\mathcal{U}(S, M)$  es manté constant.

Les variables naturals de l'energia interna són l'entropia  $S$  i la imantació  $M$ , però habitualment les condicions de treball fan que es necessitin potencials termodinàmics que s'expressin amb altres variables naturals. Aquests potencials es troben fent transformacions de Legendre de l'energia interna  $\mathcal{U}$ , i són els següents:

- L'entalpia magnètica

$$\mathcal{H}(H, S) = \mathcal{U} - HM \quad (1.2)$$

- L'energia lliure de Helmholtz

$$\mathcal{F}(M, T) = \mathcal{U} - TS \quad (1.3)$$

- L'energia lliure magnètica de Gibbs

$$\mathcal{G}(H, T) = \mathcal{H} - TS. \quad (1.4)$$

A partir de les definicions d'aquests nous potencials termodinàmics i de l'equació (1.1) es poden trobar les diferencials:

$$d\mathcal{H} = +TdS - MdH \quad (1.5)$$

$$d\mathcal{F} = -SdT + HdM \quad (1.6)$$

$$d\mathcal{G} = -SdT - MdH, \quad (1.7)$$

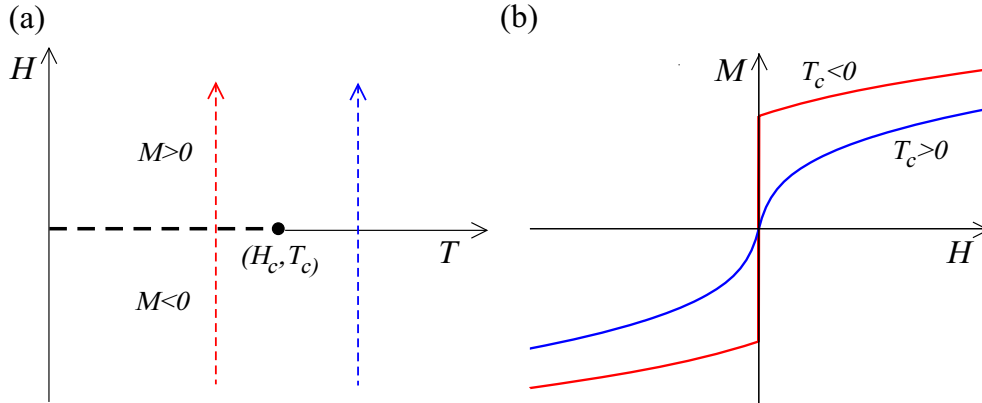
que ens permet relacionar les derivades parcials dels potencials amb les propietats termodinàmiques del sistema. Per tant som capaços de derivar totes les propietats termodinàmiques d'un sistema a partir del coneixement d'un dels potencials termodinàmics, a més, sabem que l'estat d'equilibri del sistema serà aquell que minimitzi el potencial termodinàmic considerat.

Les variables que es poden controlar amb més facilitat en l'estudi experimental de sistemes ferromagnètics són el camp aplicat  $H$  i la temperatura  $T$ . En conseqüència, el potencial termodinàmic més adient per tractar aquest tipus de sistemes és l'energia lliure magnètica de Gibbs  $\mathcal{G}(H, T)$ . A partir de l'equació (1.7) podem obtenir l'equació d'estat del sistema relacionant la imantació amb la derivada parcial del potencial  $\mathcal{G}(H, T)$  respecte  $H$ . Llavors obtenim

$$M(H, T) = -\frac{\partial \mathcal{G}(H, T)}{\partial H}, \quad (1.8)$$

que ens permet trobar la imantació  $M$  en funció del camp  $H$  i la temperatura  $T$ .

El diagrama de fases d'un sistema ferromagnètic simple en equilibri termodinàmic, que es mostra a la figura 1.1(a), presenta una línia de transició de primer ordre a camp  $H = 0$  i rang de temperatures  $T \in (0, T_c)$ . Aquesta línia de transició acaba en un punt crític  $(H_c, T_c)$  on  $T_c$  és la temperatura de Curie i  $H_c = 0$ . Aquest punt crític controla una transició de fase de segon ordre que separa dos comportaments ben diferenciats del sistema que es representen a la figura 1.1(b):



**Figura 1.1:** La figura (a) mostra el diagrama de fases d'equilibri per un sistema ferromagnètic simple on es representen les trajectòries de camp que produeixen les corbes d'imantació que es mostren en la figura (b).

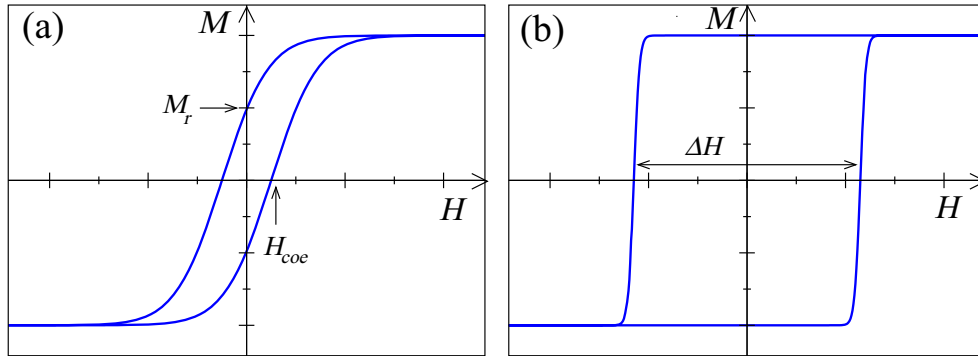
- Per una banda tenim el comportament ferromagnètic per ( $T < T_c$ ). En aquest comportament el sistema pateix una transició de primer ordre a  $H = 0$  donant lloc a un salt discontinu en la imantació. Per tant, a l'aplicar al sistema un camp extern des de  $H = -\infty$  fins  $H = +\infty$ , aquest presentarà una corba d'imantació discontinua i no derivable.
- Per altra banda tenim el comportament paramagnètic per ( $T > T_c$ ). En aquest comportament el sistema no presenta cap transició de primer ordre. Per tant, a l'aplicar al sistema un camp extern des de  $H = -\infty$  fins  $H = +\infty$ , aquest presentarà una corba d'imantació contínua i derivable.

Els sistemes ferromagnètics reals no presenten aquest comportament senzill descrit fins ara sinó que presenten un comportament més complex. Aquests sistemes presenten histèresi i per tant quan es fa un escombrat amb el camp extern obtenim els cicles d'histèresi. La forma qualitativa d'aquests cicles es pot veure a la figura 1.2. Aquests cicles estan formats per dues branques: la branca superior  $m_u(H)$ , que s'obté quan es disminueix el camp extern des de l'estat de saturació positiva ( $H = +\infty$ ) fins a l'estat de saturació negativa ( $H = -\infty$ ); i la branca inferior  $m_l(H)$ , que s'obté quan s'augmenta el camp extern des de l'estat de saturació negativa fins a l'estat de saturació positiva. En general els cicles d'histèresi [1] són simètrics respecte l'origen <sup>1</sup> i es compleix que

$$m_l(H) = -m_u(-H). \quad (1.9)$$

Els cicles poden presentar gran varietat de formes i els dos paràmetres que els caracteritzen són:

<sup>1</sup>Malgrat que en general els cicles són simètrics respecte l'origen, existeixen casos peculiars en que no ho són. Per exemple en el capítol 7 s'estudia un model microscòpic pel fenomen de l'*Exchange Bias* que provoca una asimetria en els cicles. En aquest cas s'han d'usar uns altres paràmetres per definir els cicles.



**Figura 1.2:** Cicles d'histèresi qualitius per sistemes ferromagnètics tous (a) sistemes ferromagnètics durs (b). Es mostren gràficament les definicions de la imantació romanent  $M_r$ , el camp coercitiu  $H_{coe}$  i l'amplada del cicle (coercitivitat)  $\Delta H = 2H_{coe}$ .

- La imantació romanent  $M_r$  és la imantació que té el sistema a  $H = 0$  quan es disminueix el camp  $H$  des de l'estat de saturació obtingut a l'aplicar un camp molt positiu ( $H = +\infty$ ). Si partim de l'estat de saturació que s'obté a l'aplicar un camp molt petit ( $H = -\infty$ ) i augmentem el camp, la imantació que té el sistema a  $H = 0$  és  $-M_r$ .
- El camp coercitiu  $H_{coe}$  és el camp que es necessita per portar el sistema a  $M = 0$  des de la imantació  $-M_r$ . El camp coercitiu ens permet definir l'amplada del cicle  $\Delta H = 2H_{coe}$ .

Segons els valors que prenen el camp coercitiu  $H_{coe}$  i la imantació romanent  $M_r$ , els materials ferromagnètics s'acostumen a classificar en ferromagnètics tous i ferromagnètics durs:

- Els ferromagnètics tous són materials fàcils d'imantar que presenten valors baixos tant de camp coercitiu com d'imantació romanent.
- En canvi, els ferromagnètics durs són materials difícils d'imantar que presenten valors alts tant de camp coercitiu com d'imantació romanent.

Per entendre aquest comportament més complex cal fer una extensió de la termodinàmica d'equilibri a la termodinàmica de fora l'equilibri. Una de les maneres més senzilles, i alhora potents, és la teoria de Landau homogènia amb camp extern. Aquesta teoria permet explicar fenomenològicament tant el comportament d'equilibri dels sistemes ferromagnètics com interpretar el seu comportament histerètic fora de l'equilibri.

## 1.2 Aproximació de Landau

En aquesta secció farem una breu introducció a l'aproximació de Landau [19]. Aquesta ens permetrà trobar una explicació fenomenològica del comportament dels sistemes ferromagnètics simples.

A partir de la mecànica estadística relacionem l'energia lliure de Gibbs magnètica  $\mathcal{G}(H, T)$  amb la funció de partició generalitzada  $Z(H, T)$  [20, 21]

$$e^{-\beta\mathcal{G}(H, T)} = Z(H, T), \quad (1.10)$$

on  $\beta = 1/k_B T$  amb  $k_B$  la constant de Boltzmann.

Suposem ara un sistema de volum  $V$  al que li apliquem un camp  $H$  i pel que podem trobar, a partir d'un *coarse-graining*,<sup>2</sup> una densitat de paràmetre d'ordre  $m(\vec{x})$ . Llavors, l'entalpia magnètica microscòpica del sistema  $\mathcal{H}$  es podrà calcular a partir de la densitat del paràmetre d'ordre  $m(\vec{x})$  i del camp aplicat  $H$

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}[m(\vec{x}), H]. \quad (1.11)$$

Obtenim la funció de partició del sistema a partir d'una integral funcional ( $Dm$ ) que s'estén sobre totes les possibles densitats del paràmetre d'ordre  $m(\vec{x})$  [22]:

$$Z(H, T) = \int (Dm) e^{-\beta\mathcal{H}[m(\vec{x}), H]}. \quad (1.12)$$

Podem fer aquesta integral funcional en dos passos, primer fem la integral funcional ( $Dm^*$ ) d'aquelles densitats  $m^*(\vec{x})$  tals que

$$\int_V d\vec{x} m^*(\vec{x}) = m, \quad (1.13)$$

i després integrem sobre tots els possibles valors de  $m$ . El resultat de la integral funcional sobre les densitats  $m^*(\vec{x})$  ens dóna la definició de l'energia lliure de Landau  $\psi$ :

$$Z(H, T) = \int dm \int (Dm^*) e^{-\beta\mathcal{H}[m^*(\vec{x}), H]} = \int dm e^{-\beta V \psi(m, H, T)}. \quad (1.14)$$

Combinant les equacions (1.10) i (1.14) trobem una expressió que ens permet relacionar l'energia lliure magnètica de Gibbs a partir de l'energia lliure de Landau

$$e^{-\beta\mathcal{G}(H, T)} = \int dm e^{-\beta V \psi(m, H, T)}. \quad (1.15)$$

En el límit termodinàmic ( $V \rightarrow \infty$ ) el valor de l'integral sobre  $m$  serà, amb molt bona aproximació, el valor màxim de l'integrand. Aquest valor màxim tindrà lloc

---

<sup>2</sup>Podem entendre el *coarse-graining* com un promig a distàncies microscòpiques de la densitat de moments magnètics del sistema.

quan l'energia lliure de Landau  $\psi$  sigui mínima. Per tant l'energia lliure magnètica del sistema serà

$$g(H, T) = \frac{\mathcal{G}(H, T)}{V} \simeq \psi(m^*, H, T), \quad (1.16)$$

on valor  $m^*(H, T)$  està determinat per les condicions

$$\left. \frac{\partial \psi(m, H)}{\partial m} \right|_{m=m^*} = 0$$

$$\left. \frac{\partial^2 \psi(m, H)}{\partial m^2} \right|_{m=m^*} \geq 0.$$

En resum, l'aproximació de Landau ens permet trobar el comportament d'equilibri del sistema estudiant el(s) mínim(s) de l'energia lliure de Landau  $\psi$ . Aquesta energia es troba a partir l'integral funcional ( $Dm^*$ ), que en general no es pot fer de forma exacta<sup>3</sup>. Habitualment s'acostuma a obtenir una expressió aproximada de  $\psi$  a partir de les següents consideracions fenomenològiques:

- Suposem que volem estudiar el comportament del sistema al voltant d'un punt crític, per tant tindrem que el paràmetre d'ordre  $m$  serà petit i podrem aproximar  $\psi$  amb un desenvolupament de Taylor fins a ordre  $\mathcal{O}(m^4)$  amb uns coeficients que tindran una dependència amb la temperatura.
- Els sistemes ferromagnètics simples tenen un Hamiltonià invariant als canvis  $m \rightarrow -m$  i  $H \rightarrow -H$  i per tant s'ha de complir que  $\mathcal{H}(m, H) = \mathcal{H}(-m, -H)$ . Llavors l'energia lliure de Landau  $\psi$  també ha de complir  $\psi(m, H) = \psi(-m, -H)$  i per tant no hem de considerar termes amb potències senars del paràmetre d'ordre en el desenvolupament de Taylor.
- Suposem un acoblament lineal del paràmetre d'ordre amb el camp extern  $H$  per tal que es compleixi l'equació (1.8).

Amb aquestes consideracions tenim una energia lliure de Landau del tipus

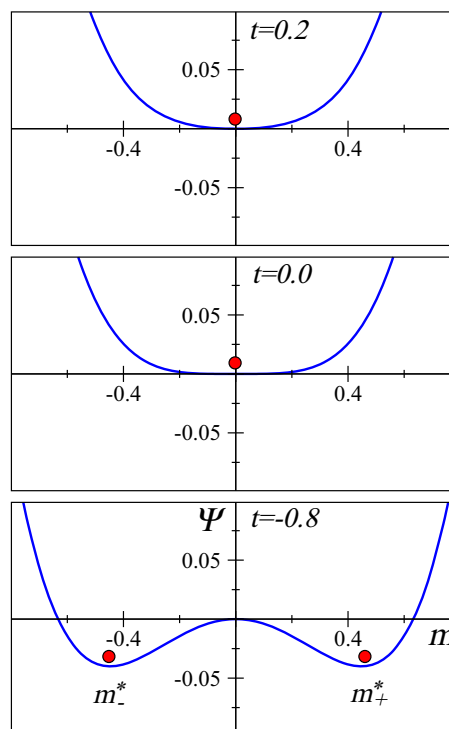
$$\psi(m, H) = \psi_o + \frac{1}{2}a_2(T)m^2 + a_4(T)m^4 - Hm, \quad (1.17)$$

en la que a partir d'ara prendrem  $\psi_o = 0$  sense perdre generalitat. Per poder explicar fenomenològicament el comportament dels sistemes ferromagnètics en tenim prou considerant que el coeficient  $a_4$  és independent de la temperatura i

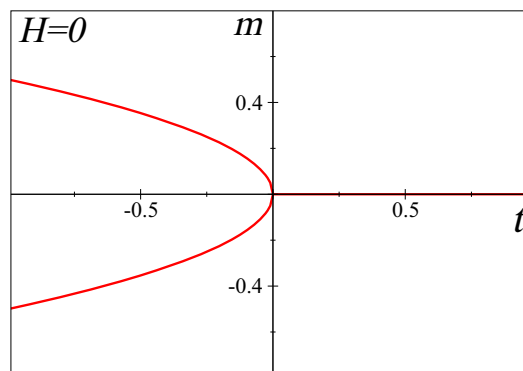
---

<sup>3</sup>A la secció 2.4.1 veurem que es pot obtenir una expressió exacta de l'energia lliure de Landau pel RFIM per la xarxa de connectivitat infinita. De fet, considerar aquest tipus de xarxes és equivalent a considerar una teoria de camp mig en la que es negligeixen les fluctuacions locals. Les teories de camp mig (Bragg-Williams pels sistemes ferromagnètics i Van der Waals pels sistemes hidrostàtics) ens permeten calcular de forma exacta l'integral funcional sobre ( $Dm^*$ ) de l'equació (1.14) i obtenir una expressió exacta de l'energia lliure de Landau.

**Figura 1.3:** Comportament de l'energia lliure de Landau (1.20) per  $a = b = 1$  i  $H = 0$  per diferents valors de  $t$ . El cercle indica l'estat del sistema.



**Figura 1.4:** Diagrama de fases d'un sistema ferromagnètic simple en el pla  $m - t$  per  $H = 0$ . Corresponent a una energia de Landau (1.20) amb  $a = b = 1$ . Observem que la imantació es bifurca per sota del punt crític  $t < 0$  on comença el règim de coexistència  $m_{\pm}^* = \pm\sqrt{-t/4}$ .





que el coeficient  $a_2$  té una dependència tal que  $a_2 > 0$  per  $T > T_c$  i  $a_2 < 0$  per  $T < T_c$ , llavors l'elecció més senzilla és:

$$a_2(T) = a \frac{T - T_c}{T_c} \quad a > 0 \quad (1.18)$$

$$a_4(T) = b \quad b > 0, \quad (1.19)$$

on definim la temperatura reduïda  $t \equiv (T - T_c)/T_c$  i l'expressió de l'energia lliure de Landau que hem d'analitzar és

$$\psi(m, H) = \frac{1}{2} a t m^2 + b m^4 - H m. \quad (1.20)$$

Analitzem el comportament de  $\psi$  per  $H = 0$  i per  $H \neq 0$ :

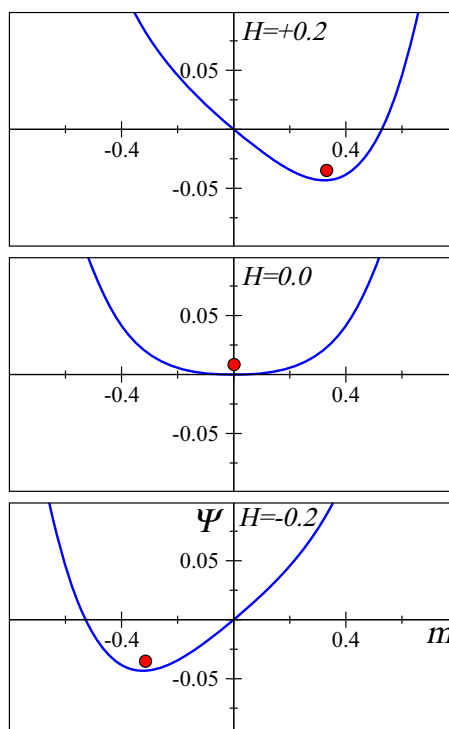
- (i) Cas  $H = 0$ . El comportament qualitatiu de  $\psi$  a  $H = 0$  per diferents valors de  $t$  es representa a la figura 1.3. Observem com l'energia lliure de Landau passa de tenir un sol mínim a  $m^* = 0$  per  $T \geq T_c$  a tenir dos mínims  $m_{\pm}^* = \pm \sqrt{-(a t)/(4 b)}$  per sota de la temperatura crítica  $T < T_c$ . Aquest trencament de simetria està associat a la transició de fase de segon ordre. Els dos mínims són completament equivalents  $\psi(m_-^*) = \psi(m_+^*)$  i el sistema pot prendre qualsevol dels dos valors del paràmetre d'ordre. Aquest fet provoca que el sistema tingui coexistència de fases, que és una característica comuna de les transicions de fase de primer ordre. El diagrama de fases  $m - t$  es mostra a la figura 1.4.
- (ii) Cas  $H \neq 0$ . Per aquest cas també hem d'analitzar com canvia el comportament de l'energia lliure de Landau per diferents valors de  $t$ :

- Per  $t > 0$  ( $T > T_c$ ) l'energia lliure de Landau  $\psi$  només té un mínim  $m^*$  que compleix  $m^* < 0$  per  $H < 0$ ,  $m^* = 0$  per  $H = 0$  i  $m^* > 0$  per  $H > 0$  tal i com s'observa en la figura 1.5. Si representem la corba  $m^*(H)$  obtenim la corba d'imantació d'un sistema amb comportament paramagnètic tal i com es pot veure a la figura 1.6.
- Per  $t < 0$  ( $T < T_c$ ) l'energia lliure de Landau presenta dos mínims  $m_-^* < 0$  i  $m_+^* > 0$  per un cert rang de camp extern  $-H_s < H < H_s$ . El camp  $H_s > 0$  s'anomena límit de metastabilitat i és el valor del camp pel qual el mínim  $m_+^* > 0$  es converteix en punt de sella. Aquest valor compleix l'equació:

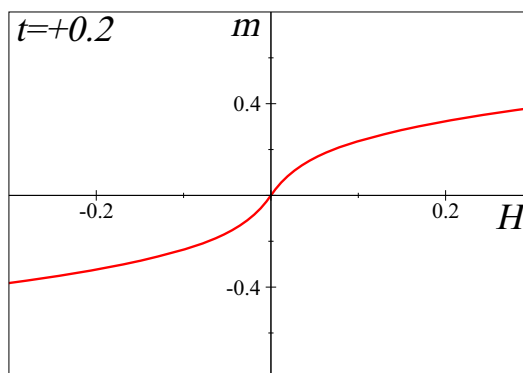
$$\left. \frac{\partial^2 \psi(m, H_s)}{\partial m^2} \right|_{m=m_+^*(H_s, T)} = 0. \quad (1.21)$$

Per valors del camp en el rang  $H \in (-H_s, 0)$  es compleix que  $\psi(m_-^*) < \psi(m_+^*)$  per tant en equilibri el sistema es situarà en l'estat  $m_-^*$ . En canvi per valors del camp en el rang  $H \in (0, H_s)$  es compleix que  $\psi(m_-^*) > \psi(m_+^*)$  i en equilibri el sistema es situarà a  $m_+^*$ . Pel cas  $H = 0$

es compleix que  $\psi(m_-^*) = \psi(m_+^*)$  que dóna lloc a una coexistència de fases tal i com s'ha explicat anteriorment. El comportament qualitatiu de  $\psi$  per  $t < 0$  es pot veure a la figura 1.7. Si considerem que el sistema sempre tendeix al mínim absolut de l'energia lliure de Landau reproduïm la corba d'imantació d'un sistema amb comportament ferromagnètic. Aquesta corba d'imantació es mostra a la 1.8 i s'hi pot veure la discontinuïtat a  $H = 0$  corresponent a la transició de primer ordre.

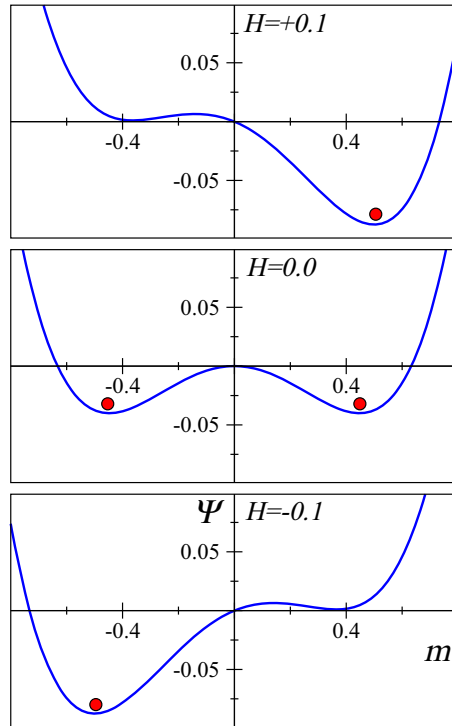


**Figura 1.5:** Comportament de l'energia lliure de Landau (1.20) per  $a = b = 1$  i  $t = 0.2$  per diferents valors del camp extern  $H$ .

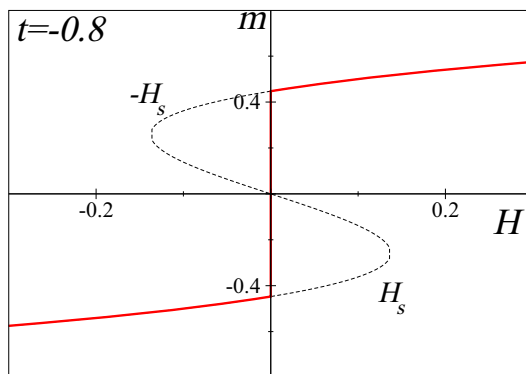


**Figura 1.6:** Corba d'imantació que s'obté a partir de representar el mínim de l'energia lliure de Landau (1.20) en funció del camp extern  $m^*(H)$ . Hem pres  $a = b = 1$  i  $t = 0.2$ .

Per tant amb l'aproximació de Landau amb camp extern hem estat capaços d'explicar fenomenològicament les transicions de fase de primer i segon ordre per un sistema ferromagnètic simple en equilibri termodinàmic. Hem considerat que el sistema sempre té temps suficient d'equilibrar-se mitjançant les fluctuacions tèrmiques i trobar el mínim de l'energia lliure.



**Figura 1.7:** Comportament de l'energia lliure de Landau (1.20) per  $a = b = 1$  i  $t = -0.8$  per diferents valors del camp extern  $H$ .



**Figura 1.8:** La línia contínua és la corba d'imantació que s'obté a partir de representar el mínim absolut de l'energia lliure de Landau de l'equació (1.20) amb  $a = b = 1$  i  $t = -0.8$  en funció del camp extern  $m^*(H)$ . La línia discontinua ens indica, per cada valor del camp extern, els valors  $m^*$  que són solució de l'equació  $\left. \frac{\partial \psi}{\partial m} \right|_{m^*} = 0$ , és a dir els valors de  $m$  pels que la funció  $\psi$  presenta un extrem.

### 1.3 Histèresi i metastabilitat

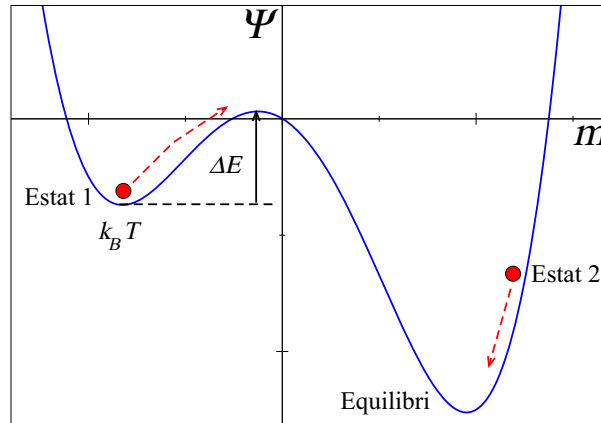
En aquesta secció farem una extensió de la termodinàmica d'equilibri per explicar de forma senzilla el fenomen de la histèresi i relacionar-lo amb la metastabilitat del sistema. Per fer-ho farem una extensió de l'aproximació de Landau introduïda a la secció anterior considerant que el sistema no està necessàriament al valor del paràmetre d'ordre que minimitza globalment l'energia lliure de Landau  $\psi$ , sinó que pot prendre qualsevol valor de  $m$ . Introduïm dos temps característics que ens serviran per explicar el que ens disposem a estudiar:

- Temps característic de variació del camp  $\tau_H$ , que el podem definir com  $\tau_H \sim \frac{\Delta H}{\dot{H}}$ , on  $\dot{H} = dH/dt$ . Aquest temps característic tendeix a infinit quan variem infinitament lent el camp extern ( $\dot{H} \rightarrow 0$ ) i tendeix a zero quan variem infinitament ràpid el camp extern ( $\dot{H} \rightarrow \infty$ ).
- Temps característic de relaxació  $\tau_R$  d'un estat que està fora de l'equilibri a l'estat d'equilibri. Aquesta relaxació es pot donar tant a través de les fluctuacions tèrmiques com per la tendència dels sistemes a situar-se al mínim d'energia. Les fluctuacions tèrmiques permeten que els sistemes explorin l'espai de les fases i que trobin l'estat de mínima energia lliure, és a dir l'equilibri termodinàmic.

Per tant, en l'explicació fenomenològica dels sistemes ferromagnètics simples que hem donat a la secció anterior hem suposat que ens trobàvem en el règim  $\tau_H \gg \tau_R$  i per això el sistema sempre tenia temps suficient de relaxar a l'estat d'equilibri (mínim de l'energia lliure de Landau) a mesura que anàvem canviant el valor del camp extern  $H$ .

Estudiem ara com es comporta el temps de relaxació a l'equilibri per sistemes que no es troben al valor  $m^*$  que minimitza l'energia lliure de Landau. Per veure-ho, suposem dos estats fora de l'equilibri com els que es mostren a la figura 1.9. L'estat 1 és un estat fora de l'equilibri metastable ja que el sistema es troba en un mínim relatiu de l'energia lliure, en canvi l'estat 2 és un estat fora de l'equilibri no metastable. El temps característic de relaxació de l'estat 1 va com  $\tau_R^{(1)} = \tau_0 e^{\beta \Delta E}$  on  $\Delta E$  és l'alçada de la barrera que el sistema ha de superar per arribar a l'equilibri [1]. Degut a l'existència d'aquesta barrera energètica es complirà que  $\tau_R^{(1)} \gg \tau_R^{(2)}$ .

Per tant, hem justificat dins el marc de l'aproximació de Landau, que en els sistemes que presenten una energia lliure de Landau amb estats metastables es donarà més fàcilment la condició  $\tau_H \sim \tau_R$  i per tant es podrà produir una competició entre el temps de conducció del camp extern i el temps de relaxació a l'equilibri.



**Figura 1.9:** Es mostren dos estats fora de l'equilibri. L'estat 1 està en un estat metastable i per arribar a l'estat d'equilibri les fluctuacions tèrmiques l'han de fer superar una barrera energètica  $\Delta E$ . Degut a l'existència d'aquesta barrera els temps característics de relaxació compleixen  $\tau_R^{(1)} \gg \tau_R^{(2)}$

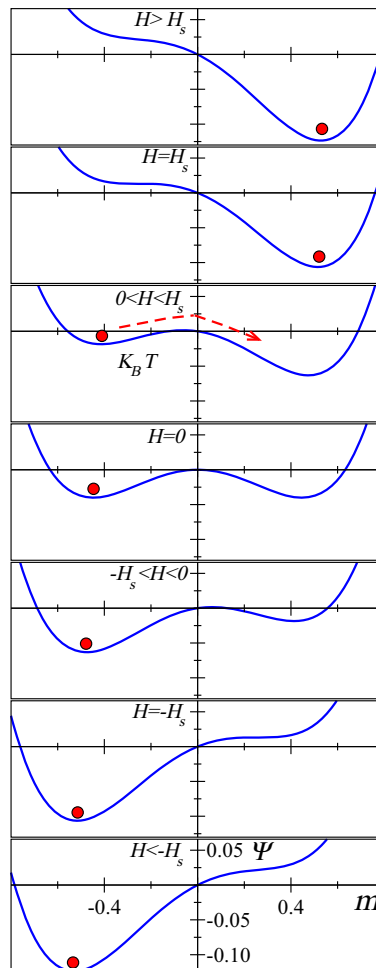
### 1.3.1 Histèresi *rate-dependent*

Suposem doncs que ens trobem en el règim en que els dos temps característics són del mateix ordre  $\tau_H \sim \tau_R$ . En aquest règim es pot donar que el sistema no tingui temps suficient de relaxar a l'equilibri a mesura que es va canviant el camp extern i que segueixi una trajectòria fora de l'equilibri. Aquest fenomen és el que anomenem histèresi.

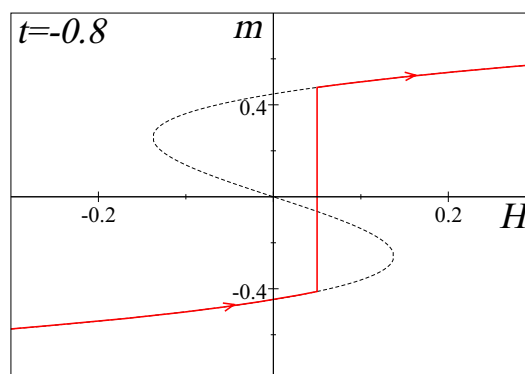
Degut a la competició entre les fluctuacions tèrmiques i el ritme de variació del camp, aquesta histèresi dependrà fortament del ritme de variació del camp extern i per això se l'anomena histèresi *rate-dependent*.

Estudiem el comportament de l'energia lliure de Landau  $\psi$  al anar canviant el camp extern pel cas  $t < 0$  que es mostra a la figura 1.10. Suposem que variem el camp extern des de  $H = -\infty$  a  $H = 0^-$ , en aquest procés el sistema sempre està en el mínim absolut de  $\psi$ . A partir d'aquest valor, si variem el camp extern des de  $H = 0^+$  a  $H = H_s$ , el sistema roman en un mínim relatiu (estat metastable) a no ser que les fluctuacions tèrmiques el facin saltar al mínim absolut. En el rang  $H \in [0, H_s]$ , el sistema pot saltar per qualsevol valor del camp extern degut a les fluctuacions tèrmiques. El valor pel qual el sistema pateix la transició depèn fortament del ritme de variació del camp extern, obtenint la histèresi *rate-dependent*, tal i com es pot veure a la figura 1.11. En el rang  $H > H_s$  el sistema torna a estar en l'únic mínim que té  $\psi$ .

**Figura 1.10:** Comportament de l'energia lliure de Landau (1.20) per  $a = b = 1$  i  $t = -0.8$  per diferents valors del camp extern  $H$ . Es pot observar que en els límits de metastabilitat  $\pm H_s$  desapareixen els mínims relatius, convertint-se en punts de sella. Si conduïm el sistema des de  $H = -\infty$  a  $H = +\infty$  i estem en el règim  $\tau_R \sim \tau_H$  el sistema pot patir la transició per qualsevol valor de  $H \in [0, H_s]$ .



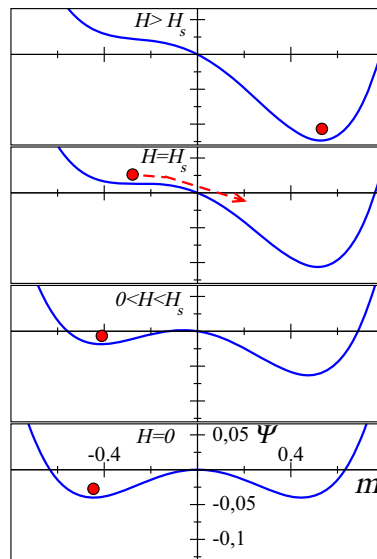
**Figura 1.11:** La línia contínua és la corba d'imantació per una energia lliure de Landau (1.20) amb  $a = b = 1$  i  $t = -0.8$ . Hem suposat que estem en el règim  $\tau_R \sim \tau_H$  i que el sistema pateix la transició degut a les fluctuacions tèrmiques al camp  $H = 0.05$ .



### 1.3.2 Histèresi *rate-independent*

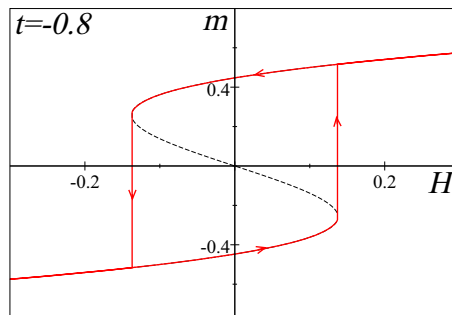
Suposem ara que ens trobem en el règim en el qual el temps característic de relaxació i el de variació del camp compleixen  $\tau_H \ll \tau_R$ . En aquest règim el sistema no pot relaxar degut a les fluctuacions tèrmiques i roman en l'estat metastable (mínim relatiu) fins que s'arriba al seu límit de metastabilitat. El sistema també presentarà histèresi, però en aquest cas independent del ritme de variació del camp (histèresi *rate-independent*).

Estudiem el comportament de l'energia lliure de Landau  $\psi$  al anar canviant el camp extern pel cas  $t < 0$  que es mostra a la figura 1.12. Observem que si canviem el camp extern des de  $H = -\infty$  fins a  $H = +\infty$  el sistema pateix la transició de fase al límit de metastabilitat  $H = H_s$ , on l'estat metastable on es troba desapareix. Per la simetria de l'energia lliure de Landau si canviem el camp extern des de  $H = +\infty$  fins a  $H = -\infty$  el sistema pateix la transició de fase a  $H = -H_s$ . Aquest comportament dóna un cicle d'histèresi tal com el que es mostra a la figura 1.13.



**Figura 1.12:**

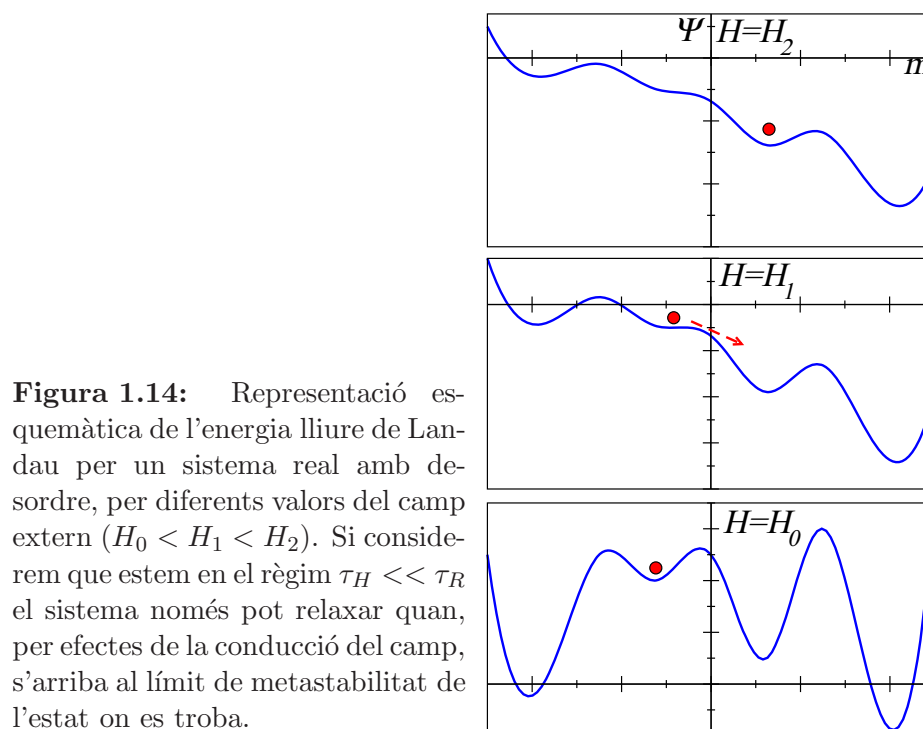
Comportament de l'energia lliure de Landau (1.20) per  $a = b = 1$  i  $t = -0.8$  per diferents valors del camp extern  $H$ . Es pot observar que en el límit de metastabilitat  $H_s$  desapareix el mínim relatiu, convertint-se en punt de sella. Si conduïm un sistema que es troba en el règim  $\tau_H \ll \tau_R$  aquest pateix la transició en els límits de metastabilitat  $H = \pm H_s$ .



**Figura 1.13:** Cicle d'histèresi corresponent a una energia lliure de Landau (1.20) per  $a = b = 1$  i  $t = -0.8$ . Estem en el règim  $\tau_H \ll \tau_R$  on el sistema pateix la transició en els límits de metastabilitat.

## 1.4 Sistemes ferromagnètics reals

Utilitzant les consideracions fetes en l'aproximació de Landau podem intentar interpretar el comportament dels sistemes ferromagnètics reals. Aquests tindran un comportament més complicat degut a, entre altres factors, les interaccions de llarg abast i l'existència de desordre en el sistema com per exemple: vacants, dislocacions, defectes intersticials, etc. Aquests factors provoquen que l'energia lliure de Landau  $\psi$  del sistema presenti un comportament molt complex en funció del paràmetre d'ordre generalitzat  $m$  i presenti barreres energètiques molt altes i multitud d'estats metastables. Dins aquest escenari complex d'energia lliure negligir les fluctuacions tèrmiques davant l'alçada de les barres energètiques que el sistema ha de superar per arribar a l'estat d'equilibri és una aproximació prou bona quan la temperatura és suficientment baixa. Per tant considerem que aquests sistemes estan desactivats tèrmicament i que es troben en el règim  $\tau_H \ll \tau_R$ . Llavors, el sistema romandrà en un estat metastable fins que s'arribi al límit de metastabilitat d'aquest i pugui accedir a un altre estat metastable. Igual que abans, s'arriba a aquests límits de metastabilitat gràcies a la conducció amb el camp extern que permet variar l'escenari d'energia lliure  $\psi$ , tal i com es pot veure esquemàticament a la figura 1.14.

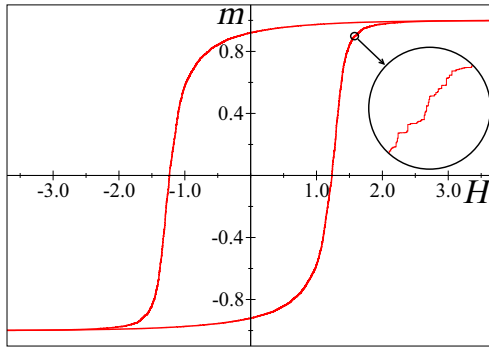


**Figura 1.14:** Representació esquemàtica de l'energia lliure de Landau per un sistema real amb desordre, per diferents valors del camp extern ( $H_0 < H_1 < H_2$ ). Si considerem que estem en el règim  $\tau_H \ll \tau_R$  el sistema només pot relaxar quan, per efectes de la conducció del camp, s'arriba al límit de metastabilitat de l'estat on es troba.

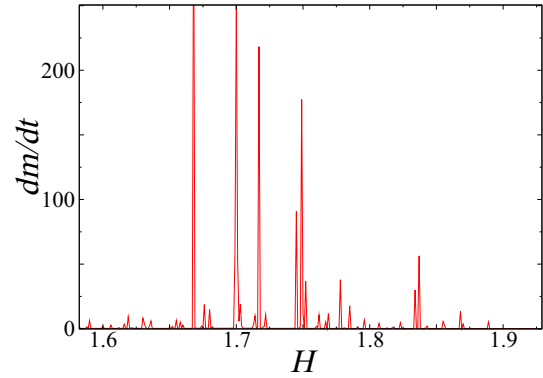
Aquesta dinàmica metastable fora de l'equilibri provoca una evolució a salts de la imantació  $m$  a mesura que es va variant el camp extern  $H$  de forma contínua. Aquesta evolució amb allaus tèrmicament desactivada comporta que els sistemes ferromagnètics reals a temperatures prou baixes presentin una histèresi *rate-independent* i uns cicles d'histèresi amb petites discontinuïtats. Tal i com es



representa a la figura 1.15 aquests salts (allaus) són visibles quan ens mirem els cicles d'histeresi amb suficient detall. Aquestes allaus es poden detectar experi-



**Figura 1.15:** Evolució típica d'un sistema ferromagnètic real. El sistema evoluciona amb una dinàmica d'allaus que produeixen el soroll Barkhausen.



**Figura 1.16:** Forma típica del soroll Barkhausen. Ens dona  $dm/dH$  en funció del camp extern  $H$ . Aquest té una dependència temporal ja que es va variant externament.

mentalment i normalment s'estudia la variació de la imantació  $dm/dH$  en funció del camp extern  $H$ , tal com mostra esquemàticament la figura 1.16. Aquest tipus de senyals s'anomenen soroll Barkhausen i les va detectar per primera vegada H. Barkhausen l'any 1919 [23]. Tal i com es pot veure a la figura 1.16 el soroll Barkhausen està format per diferents pics que corresponen a les diferents allaus que pateix el sistema. El temps que transcorre entre que el senyal es fa diferent de zero i que aquest torna a zero, és a dir entre on comença i s'acaba el pic, és el que anomenem durada de l'allau. Per altra banda, l'àrea que engloba un pic serà la mida de l'allau. Per caracteritzar els materials s'estudien les propietats estadístiques del seu soroll Barkhausen. Normalment s'analitza la distribució de mides i durades de les allaus i s'observa que aquestes distribucions segueixen una llei de potències [1, 5, 6].

A part dels sistemes ferromagnètics, existeix una gran varietat de sistemes de diferent naturalesa que presenten aquesta dinàmica amb allaus. Tal i com ja s'ha explicat a la introducció del capítol, aquest comportament està present en els sistemes ferroelèctrics [10, 11], els materials martensítics [7, 9], al moviment dels vòrtexs als superconductors de tipus II [13] i a la condensació de  $^4\text{He}$  en sòlids porosos [14].



# Capítol 2

## Models reticulars

Al llarg de la història s’han proposat diferents tipus de models microscòpics per intentar modelitzar el comportament dels sistemes ferromagnètics [1]. Els models de spins [24] tenen aquesta finalitat i es basen en una discretització del sistema real. Aquesta discretització s’obté definint unes variables de spin, que representen els diferents graus de llibertat magnètics dels constituents del sistema, sobre els nusos d’una xarxa reticular. El model de spins més senzill per reproduir el comportament crític dels sistemes ferromagnètics simples és el model d’Ising.

Com ja s’ha explicat, els sistemes reals tenen un comportament més complicat que els sistemes ferromagnètics simples degut a l’escenari complex d’energia lliure que presenten. Aquest comportament de l’energia lliure es deu, entre altres factors, a les interaccions de llarg abast i a la presència de desordre dins el sistema. Per tant podem incloure a l’Hamiltonià del model d’Ising aquests ingredients per intentar modelitzar el comportament dels sistemes ferromagnètics reals. Malgrat que existeixen estudis del model amb forces dipolars de llarg abast [25] en aquesta tesi no les considerem ja que aquestes interaccions provoquen que tant les simulacions numèriques com els tractaments analítics es facin molt més complicats sense una millora substancial del comportament suficientment ric que presenta el sistema només amb la presència de desordre. Per tant, la forma més senzilla i al mateix temps eficient de modelitzar els sistemes ferromagnètics reals és afegir a l’Hamiltonià del model d’Ising un terme que contingui el desordre del sistema. El sistema pot presentar diferents tipus de desordre: el desordre *annealed*, que no és constant en el temps sinó que presenta una evolució temporal lligada a l’evolució del sistema; i el desordre *quenched*, que no varia en el temps i també se l’anomena desordre “congelat”. En general considerar únicament el desordre congelat és una aproximació prou bona per sistemes a temperatures suficientment baixes. Existeixen diferents formes d’introduir desordre congelat en el model d’Ising. Una d’elles és considerar la presència d’un camp local aleatori a cada nus de la xarxa. Aquest model se’l coneix com el **model d’Ising amb camps aleatoris** que també l’anomenem RFIM, acrònim provinent del nom en anglès *Random Field Ising Model*.

El RFIM es pot estudiar en l'estat d'equilibri seguint el formalisme de la mecànica estadística. Tal i com es veurà, per fer aquest estudi haurem de calcular el promig sobre desordre del logaritme de la funció de partició. L'estudi de l'estat d'equilibri pels sistemes amb desordre es fa complicat degut a l'acoblament entre les fluctuacions tèrmiques i el desordre del sistema. En particular cal distingir entre els promitjos tèrmics habituals i els promitjos sobre desordre.

Un segon tipus d'estudi és analitzar la dinàmica metastable del model. Tal i com s'ha vist al capítol 1 els sistemes que presenten desordre tenen un comportament complex i la seva energia lliure presenta una gran quantitat d'estats metastables separats per barreres energètiques molt altes. Llavors considerar que les fluctuacions tèrmiques que pateix el sistema són molt més petites que l'alçada de les barreres no es mala aproximació. Per tant les podem negligir i considerar que el RFIM evoluciona amb una dinàmica metastable. Malgrat que es poden considerar models amb dinàmica metastable que permetin certa relaxació tèrmica local [26] típicament s'ha estudiat el RFIM amb dinàmica metastable a temperatura zero [15, 16].

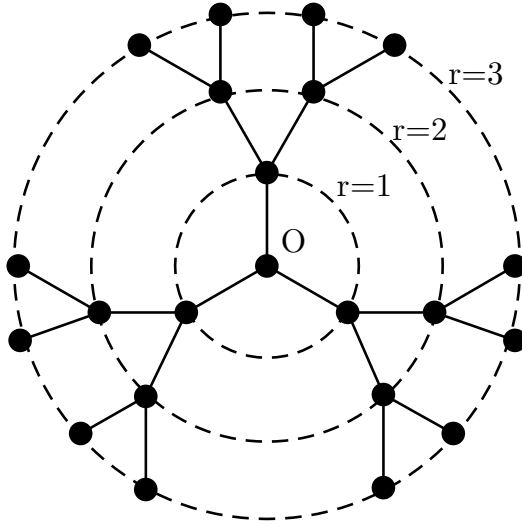
Aquest capítol es distribueix de la forma següent: a la secció 2.1 introduïm els diferents tipus de xarxes que es consideren, a la secció 2.2 s'explica breument el model d'Ising, a la secció 2.3 s'expliquen els ingredients bàsics del RFIM, a la secció 2.4 ens centrarem en els estudis del RFIM a l'equilibri, a la secció 2.5 s'introdueixen les dinàmiques metastables. Finalment a la secció 2.6 es fa un petit resum.

## 2.1 Tipus de xarxes

El model d'Ising habitual i el RFIM són models reticulars que es defineixen sobre una xarxa de  $N$  nusos. Les propietats del model dependran de les característiques topològiques de la xarxa utilitzada. També depèn d'aquestes propietats topològiques el fet que el model permeti un tractament analític. Definim la connectivitat  $z_i$  del nus  $i$  de la xarxa com el número de nusos que estan connectats directament (primers veïns) a aquest nus. Considerarem xarxes en que tots els nusos tenen la mateixa connectivitat  $z_i = z \ \forall i$ .

### 2.1.1 Xarxa de connectivitat $N$ (MFM)

La teories de camp mig són un mètode per obtenir resultats aproximats dels models. Aquest mètode aproximat es converteix en exacte si considerem models sobre xarxes en que tots els nusos estan connectats amb tots, és a dir per xarxes de connectivitat  $N$ . Tal i com es veurà més endavant per evitar problemes en el límit termodinàmic ( $N \rightarrow \infty$ ) haurem de considerar unes interaccions que vagin com  $\sim \frac{1}{N}$ . Els models definits sobre aquestes xarxes s'anomenen models de camp mig o MFM, acrònim de l'anglès *Mean Field Model*.



**Figura 2.1:** Arbre de Cayley amb connectivitat  $z = 3$  i amb tres capes  $n = 3$ .

### 2.1.2 Xarxes de Bethe

Primer de tot considerem un arbre de Cayley. Per construir-lo comencem amb un nus central  $O$  al que li connectem  $z \geq 2$  nusos nous que formen la primera capa de la xarxa  $r = 1$ . Ara augmentem el número de nusos de la xarxa afegint noves capes, si connectem  $z - 1$  nusos a tots els nusos de la capa  $r$  obtenim la capa  $r + 1$ . Anem afegint nusos a la xarxa fins que completem la capa  $n$ . Un exemple d'arbre de Cayley es pot veure a la figura 2.1. El número de nodes que té un arbre de Cayley a la capa  $r$  és

$$N_r = z(z - 1)^{r-1} \quad r = 1 \dots n, \quad (2.1)$$

que ens permet calcular el número total de nodes

$$N = 1 + \sum_{r=1}^n N_r = 1 + \sum_{r=1}^n z(z - 1)^{r-1} = \begin{cases} 1 + 2^n & z = 2 \\ \frac{z(z-1)^n - 1}{z-2} & z > 2 \end{cases} \quad (2.2)$$

A partir de (2.1) i (2.2) podem calcular, en el límit en que el número total de capes  $n$  tendeix a infinit, la ràtio entre el número de nodes de l'última capa i el número total de nodes:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{N_n}{N} = \frac{z - 2}{z - 1}. \quad (2.3)$$

El fet que aquest límit no sigui zero per  $z > 2$  ens indica que en els arbres de Cayley els efectes de la frontera són molt rellevants i per tant aquestes xarxes no són bones candidates per fer càlculs en el límit termodinàmic  $N \rightarrow \infty$ .

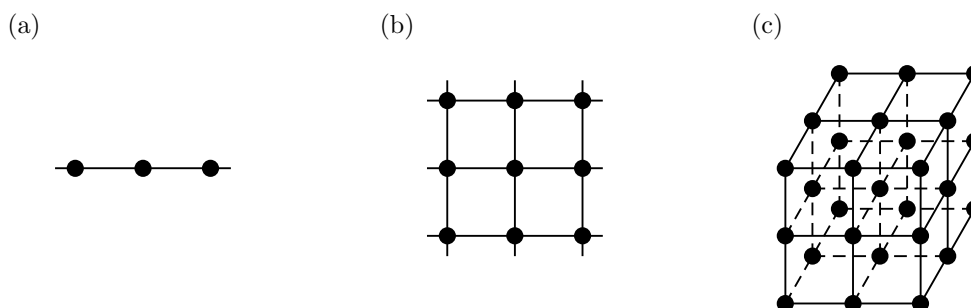
Definim una xarxa de Bethe de connectivitat  $z$  com la part interior d'un arbre de Cayley de connectivitat  $z$  i  $n \rightarrow \infty$ . Hem d'escollir aquesta part interior de l'arbre adequadament [27] per poder negligir els efectes de la frontera. Per tant les xarxes de Bethe tenen dues característiques importants: no presenten cicles tancats i tots els nusos de la xarxa són completament equivalents. Aquestes dues característiques topològiques permeten tractar analíticament la majoria de

models considerats sobre aquestes xarxes [28]. De fet tots els models que es poden solucionar analíticament en una cadena unidimensional es poden generalitzar a les xarxes de Bethe (una cadena unidimensional és completament equivalent a una xarxa de Bethe amb  $z = 2$ ). En els capítols 3 i 4 s'utilitzaran aquestes xarxes per dur a terme càlculs analítics del RFIM amb dinàmica metastable.

### 2.1.3 Xarxes hipercúbiques

Podem caracteritzar les xarxes hipercúbiques amb el número de dimensions  $d$  i amb la connectivitat  $z$  que tenen. En aquesta tesi es consideren les xarxes hipercúbiques primitives<sup>1</sup> en les que podem relacionar la connectivitat amb el número de dimensions de la forma següent  $z = 2d$ .

Utilitzem xarxes hipercúbiques amb la mateixa longitud lineal  $L$  per totes les dimensions. Llavors el número de nusos de la xarxa es pot expressar com  $N = L^d$ . La longitud lineal  $L$  és la variable que s'utilitza per fer els estudis d'escalat amb la mida finita o FSS, acrònim de l'anglès *Finite Size Scaling*. Aquests estudis serveixen per obtenir resultats en el límit termodinàmic ( $N \rightarrow \infty$ ) a partir de les simulacions numèriques sobre xarxes de mida finita. Tant en les simulacions com en els tractament analítics aquestes xarxes es complementen amb les anomenades condicions periòdiques de contorn per evitar els efectes de la frontera.



**Figura 2.2:** Diferents xarxes hipercúbiques que s'utilitzen tant pel model d'Ising com pel RFIM: (a) cadena unidimensional (xarxa hipercúbica amb  $d = 1$ ), (b) xarxa quadrada (xarxa hipercúbica amb  $d = 2$ ) i (c) xarxa cúbica (xarxa hipercúbica amb  $d = 3$ ).

Les xarxes hipercúbiques que considerarem en les següents seccions són:

- Xarxa hipercúbica  $d = 1$  o cadena unidimensional (figura 1.1(a)). És un cas acadèmic ja que en general no serveix per modelitzar sistemes reals. Aquest tipus de xarxa és completament equivalent a una xarxa de Bethe amb  $z = 2$  i en general els models sobre aquesta xarxa es poden solucionar analíticament.

<sup>1</sup>No es consideren, per exemple, les xarxes BCC (*Body Centred Cubic*) ni les xarxes FCC (*Face Centred Cubic*).

- Xarxa hipercúbica  $d = 2$  o xarxa quadrada (figura 1.1(b)). Aquestes xarxes es poden fer servir per modelitzar sistemes bidimensionals com per exemple capes fines.
- Xarxa hipercúbica  $d = 3$  o xarxa cúbica (figura 1.1(c)). Aquestes xarxes són les que s'utilitzen habitualment per modelitzar els sistemes reals i presenten una complexitat que impedeix la solució analítica.

## 2.2 Model d'Ising

El model d'Ising és un model microscòpic que va ser proposat per E. Ising l'any 1925 [29]. És un model senzill que s'utilitza per modelitzar els sistemes ferromagnètics simples (de fet serveix per modelitzar un domini d'aquests) des d'un punt de vista microscòpic. Aquest model considera un *coarse-graining* que permet descriure el sistema continu amb una xarxa discreta de  $N$  nusos. Sobre cada nus de la xarxa es defineix una variable de spin  $\{S_1 \cdots S_N\}$ . Aquestes variables de spin determinen completament l'estat del sistema i es poden interpretar com un promig a distàncies microscòpiques de la densitat de moments magnètics del sistema continu<sup>2</sup>. El cas més senzill és considerar que les variables de spin només poden prendre dos valors  $S_i = \pm 1$ , llavors l'Hamiltonià (entalpia magnètica microscòpica) del model d'Ising amb camp extern és:

$$\mathcal{H}(\{S_i\}, H) = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - H \sum_i S_i. \quad (2.4)$$

El sumatori del primer terme d'aquest Hamiltonià s'estén sobre totes les parelles de primers veïns<sup>3</sup> de la xarxa i té en compte l'energia d'intercanvi ferromagnètica del sistema. Totes les parelles  $\langle ij \rangle$  tenen la mateixa integral d'intercanvi  $J_{ij} = J > 0$  ja que considerem sistemes amb interaccions isotròpiques i homogènies. El segon terme d'aquest Hamiltonià té en compte l'acoblament del sistema amb el camp extern  $H$ .

Usant el formalisme de la mecànica estadística obtenim, a partir de l'Hamiltonià (2.4), la funció de partició generalitzada del sistema

$$Z(H, T) = \sum_{S_1} \cdots \sum_{S_N} e^{-\beta \mathcal{H}(\{S_i\}, H)}, \quad (2.5)$$

que hem obtingut al sumar els factors de Boltzmann de tots els estats microscòpic. Utilitzant l'expressió (1.10), que relaciona la mecànica estadística amb la termodinàmica, podem trobar l'energia lliure de Gibbs magnètica del sistema

$$\mathcal{G}(H, T) = -\frac{1}{\beta} \ln Z(H, T), \quad (2.6)$$

<sup>2</sup>Les variables  $\{S_i\}$  són una discretització de la densitat paràmetre d'ordre  $m(\vec{x})$  que s'ha utilitzat a la secció 1.2

<sup>3</sup>El nombre de termes d'aquest sumatori és  $\frac{1}{2}Nz$  on  $N$  és el número de nusos de la xarxa i  $z$  és la connectivitat de la xarxa que utilitzem.

que ens permetrà obtenir les seves propietats termodinàmiques. Tal i com s'ha vist a l'equació (1.8) per obtenir la imantació hem de calcular

$$M = -\frac{\partial \mathcal{G}}{\partial H}, \quad (2.7)$$

i a partir de l'equació (1.4) podem obtenir l'energia (entalpia magnètica):

$$\mathcal{H} = \frac{\partial}{\partial \beta} (\beta \mathcal{G}). \quad (2.8)$$

És important remarcar que la funció de partició  $Z(H, T)$  també té una dependència amb la mida del sistema  $N$ . Per obtenir les propietats termodinàmiques del sistema en el límit termodinàmic hem de considerar el límit  $N \rightarrow \infty$ .

Aquest model presenta una transició de fase a  $T_c$  on es passa d'un comportament ferromagnètic per  $T < T_c$  a un comportament paramagnètic per  $T > T_c$ , presenten un diagrama de fases qualitativament igual al descrit a la figura 1.2. Tant el valor de la temperatura crítica  $T_c$  com el valor dels exponents crítics, que caracteritzen el comportament crític del model, depenen de la xarxa reticular que es considera [22].

### 2.2.1 Model d'Ising: MFM

L'Hamiltonià del model d'Ising en una xarxa de connectivitat  $N$  es pot escriure com

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2} \frac{J}{N} \sum_{i,j} S_i S_j - H \sum_i S_i, \quad (2.9)$$

on hem considerat que les interaccions entre els spins decreixen amb la mida del sistema. Aquest model es pot solucionar exactament i el valor de la temperatura crítica és:

$$k_B T_c = J \quad (2.10)$$

A partir de la solució exacte del MFM podem obtenir el que es coneix com l'aproximació d'ordre zero (camp mig) o aproximació de Bragg-Williams [22, 30] per una xarxa qualsevol de connectivitat  $z$  fent el canvi  $J \rightarrow zJ$ .

### 2.2.2 Model d'Ising sobre xarxes de Bethe

Degut a les propietats topològiques de les xarxes de Bethe podem escriure unes relacions de recurrència per la funció de partició del sistema que ens permeten obtenir la solució exacta [20, 28, 31, 32]. El valor de la temperatura crítica pel model d'Ising en una xarxa de Bethe amb connectivitat  $z$  és:

$$k_B T_c = \frac{2J}{\ln \frac{z}{z-2}} \quad (2.11)$$



La solució exacte per les xarxes de Bethe és el que es coneix com l'aproximació a primer ordre o aproximació de Bethe-Peierls [22] per una xarxa qualsevol de connectivitat  $z$ . Aquesta aproximació representa una millora a l'aproximació d'ordre zero.

### 2.2.3 Model d'Ising sobre xarxes hipercúbiques

Per aquest tipus de xarxes el resultat dependrà de la dimensió de la mateixa:

- Cadena unidimensional ( $d = 1$ ): Aquest cas ja el va solucionar Ising [29] quan va presentar el model. Malgrat que és un cas que es pot tractar analíticament no és gaire rellevant ja que el sistema no presenta transició de fase

$$k_B T_c = 0, \quad (2.12)$$

i presenta un comportament paramagnètic per qualsevol valor de la temperatura. El model es troba solucionat a la majoria de llibres de mecànica estadística [22, 28]. Tal i com ja s'ha explicat la solució per la cadena unidimensional coincideix amb la solució del model sobre una xarxa de Bethe amb  $z = 2$ .

- Xarxa quadrada ( $d = 2$ ): L'any 1941 Kramers i Wannier [33, 34] van proposar la formulació matricial del model d'Ising en el cas unidimensional. L'any 1994 Onsager [35] va solucionar el model d'Ising en absència de camp aplicat ( $H = 0$ ) utilitzant la formulació matricial que van introduir Kramers i Wannier. L'any 1949 Kaufmann [36] va utilitzar un mètode més senzill per diagonalitzar la matriu de transferència. La solució per aquest cas es pot trobar en diferents llibres [22, 28, 37] i el valor del seu punt crític és

$$k_B T_c = \frac{2J}{\ln(1 + \sqrt{2})} \quad (2.13)$$

El model d'Ising en una xarxa quadrada és un cas rellevant ja que és un dels únics casos en que es pot tractar analíticament una transició de fase a l'equilibri.

- Xarxa cúbica ( $d = 3$ ): Aquest cas no es pot solucionar analíticament i s'ha de tractar amb mètodes aproximats. Es pot utilitzar tècniques de grup de renormalització (RG) [38] per intentar trobar una aproximació del comportament crític. També es poden utilitzar simulacions de Montecarlo [39] sobre xarxes finites. Per obtenir resultats en el límit termodinàmic a partir de les simulacions sobre xarxes finites s'han d'utilitzar tractaments d'escalat amb la mida finita (FSS) [40]. El model d'Ising en una xarxa cúbica també presenta una transició entre un comportament ferromagnètic i comportament paramagnètic, i el valor de la temperatura crítica és aproximadament [41, 42]:

$$k_B T_c \simeq 4.511J \quad (2.14)$$

## 2.3 El model d'Ising amb camps aleatoris

El model d'Ising amb camps aleatoris (RFIM) consisteix en fer una extensió del model d'Ising explicat a la secció 2.2 introduint-hi desordre congelat. Aquest desordre s'introdueix a través d'un camp local aleatori  $h_i$  a cada nus de la xarxa. Llavors l'Hamiltoniana del RFIM pren la forma següent:

$$\mathcal{H}(\{S_i\}, H) = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - \sum_i h_i S_i - H \sum_i S_i. \quad (2.15)$$

El primer terme de l'Hamiltoniana té en compte l'energia d'intercanvi ferromagnètica del sistema ( $J > 0$ ) i s'estén sobre totes les parelles de primers veïns de la xarxa. El segon terme té en compte l'acoblament del sistema amb el desordre congelat i l'últim és l'acoblament del sistema amb el camp extern.

Els camps  $\{h_i\}$  que apareixen al segon terme de l'Hamiltoniana són variables aleatòries independents idènticament distribuïdes segons una densitat de probabilitat  $f(h_i)$ . Les densitats de probabilitat que s'utilitzen tenen mitjana zero  $\langle h_i \rangle = 0$  i un paràmetre que permet controlar la quantitat de desordre que introduïm al sistema. Les densitats de probabilitat més utilitzades són:

- (i) Densitat de probabilitat bimodal del tipus

$$f(h_i) = \delta(h_i - h_o) + \delta(h_i + h_o) \quad (2.16)$$

on el paràmetre  $h_o > 0$  controla la quantitat de desordre introduïda al sistema. Un exemple d'aquesta densitat de probabilitat es pot veure a la figura 2.3(a).

- (ii) Densitat de probabilitat plana del tipus

$$f(h_i) = \begin{cases} \frac{1}{2\Delta} & h_i \in [-\Delta, +\Delta] \\ 0 & h_i \notin [-\Delta, +\Delta] \end{cases} \quad (2.17)$$

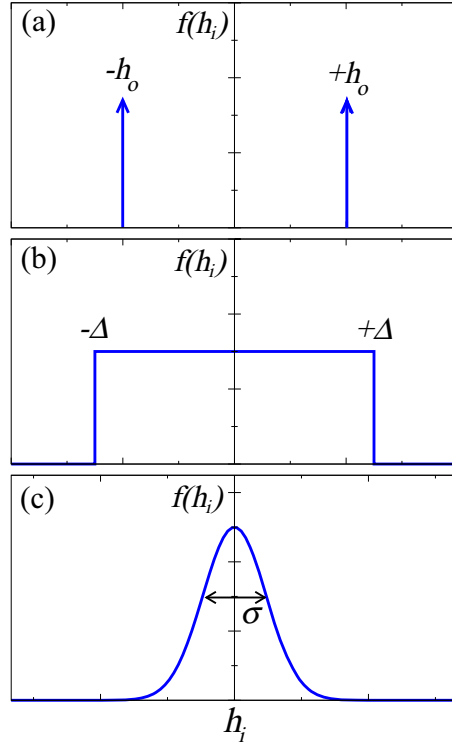
on el paràmetre  $\Delta > 0$  controla la quantitat de desordre del sistema. Un exemple d'aquesta densitat de probabilitat es pot veure a la figura 2.3(b).

- (iii) Densitat de probabilitat Gaussiana del tipus

$$f(h_i) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{h_i^2}{2\sigma^2}} \quad (2.18)$$

on  $\sigma > 0$  és la desviació estàndard de la distribució i és el paràmetre que controla la quantitat de desordre que introduïm al sistema. Un exemple d'aquesta densitat de probabilitat es pot veure a la figura 2.3(c).

En aquesta tesi també es tindran en compte algunes possibles extensions del RFIM:



**Figura 2.3:** Diferents densitats de probabilitat  $f(h_i)$  pels camps aleatoris  $\{h_i\}$ . A la figura (a) es mostra una distribució bimodal, a la figura (b) es mostra una distribució plana i a la figura (c) un distribució Gaussiana.

- (i) El RFIM diluït: Consisteix en diluir el RFIM mitjançant l'introducció de vacants a la xarxa. L'Hamiltonià del model és:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} c_i c_j S_i S_j - \sum_i c_i h_i S_i - H \sum_i c_i S_i, \quad (2.19)$$

on les variables  $c_i = 0, 1$  indiquen la presència d'una vacant ( $c_i = 0$ ) o d'un spin ( $c_i = 1$ ) a cada nus de la xarxa. Un ampli estudi d'aquest model es durà a terme en el capítol 5 d'aquesta tesi.

- (ii) El RFIM amb enllaços aleatoris: Consisteix en un RFIM en que no es considerem interaccions isotròpiques i homogènies entre els spins, llavors l'Hamiltonià que hem de considerar és:

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} S_i S_j - \sum_i h_i S_i - H \sum_i S_i \quad (2.20)$$

on  $J_{ij} > 0$  i  $J_{ij} = J_{ji}$  és la integral d'intercanvi entre la parella de spins  $\langle i, j \rangle$ . Un cas particular d'aquest model s'utilitzarà en el capítol 7 d'aquesta tesi per obtenir i estudiar cicles d'histèresi amb *Exchange Bias*.

## 2.4 El RFIM en equilibri

L'estudi de les propietats termodinàmiques d'equilibri pels sistemes que tenen desordre congelat és bastant més complicat que pels sistemes que no en tenen

(sistemes purs). La dificultat radica en l'acoblament entre el desordre i les fluctuacions tèrmiques que provoca que s'hagin de considerar dos tipus de promitjos: el promig tèrmic usual i el promig sobre desordre.

Considerem que tenim el RFIM en contacte amb un bany tèrmic a temperatura  $T$  i un camp aplicat  $H$ . Si ens calculem la funció de partició generalitzada a partir de l'Hamiltonià (2.15), obtenim

$$Z = Z(H, T, \{h_i\}) = \sum_{S_1} \cdots \sum_{S_N} e^{-\beta \mathcal{H}(\{S_i\}, H)}, \quad (2.21)$$

que té una dependència amb la realització de desordre particular de camps aleatoris  $\{h_i\}$ .

Per obtenir una dependència amb el paràmetre que controla el desordre introduït al sistema, ( $h_o$ ,  $\Delta$ , o  $\sigma$ ), i eliminar la dependència amb la realització concreta de camps aleatoris hem de promitjar sobre desordre. Podríem pensar en promitjar directament la funció de partició anterior, però aquesta no és una quantitat *self-averaging* i per tant no ens permetrà obtenir les propietats termodinàmiques del sistema [43]. En canvi, l'energia lliure magnètica sí que és una quantitat *self-averaging* que ens permetrà derivar tota la termodinàmica del sistema. Per tant el que ens interessa calcular és l'energia lliure magnètica promitjada sobre desordre:

$$\mathcal{G} = -\frac{1}{\beta} \langle \ln Z \rangle. \quad (2.22)$$

El promig del logaritme de la funció de partició el calculem a partir de la distribució dels camps aleatoris:

$$\langle \ln Z \rangle = \int \cdots \int \left[ \prod_{i=1}^N dh_i f(h_i) \right] \ln Z(H, T, \{h_i\}) \quad (2.23)$$

Llavors utilitzant l'equació (1.8) obtenim la imantació

$$M = \frac{1}{\beta} \frac{\partial \langle \ln Z \rangle}{\partial H}, \quad (2.24)$$

i a partir de l'equació (1.4) obtenim l'energia del sistema:

$$\mathcal{H} = -\frac{\partial \langle \ln Z \rangle}{\partial \beta}. \quad (2.25)$$

És important remarcar que, anàlogament al que succeeix en el model d'Ising pur, tenim una dependència explícita amb la mida del sistema  $N$ , llavors per obtenir les propietats termodinàmiques del sistema en el límit termodinàmic hem de considerar el límit de  $N \rightarrow \infty$ . Seguidament fem un breu resum dels estudis que s'han dut a terme del RFIM en equilibri termodinàmic en diferents xarxes. Considerarem, igual que en el cas pur, xarxes de connectivitat infinita (Model de Camp mig), xarxes de Bethe i xarxes hiperúbiques de dimensió  $d$ .

### 2.4.1 RFIM en equilibri: MFM

Tal i com ja s'ha explicat usar el MFM consisteix en considerar una xarxa amb connectivitat  $N$ , llavors l'Hamiltonià (2.15) es pot expressar com

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2} \frac{J}{N} \sum_{i,j} S_i S_j - \sum_i h_i S_i - H \sum_i S_i. \quad (2.26)$$

En aquest cas tots els spins interactuen amb tots amb una energia d'intercanvi ferromagnètica  $J/N$  i considerem els camps aleatoris  $\{h_i\}$  distribuïts segons una densitat de probabilitat  $f(h_i)$ . Aquest model es pot solucionar analíticament a l'equilibri usant un càlcul de rèpliques anàleg al utilitzant per Sherrington i Kirkpatrick [44] per solucionar els *spin-glass* [43]. Tal i com s'ha vist a l'apartat anterior hem de calcular el promig del logaritme de la funció de partició  $\langle \ln Z \rangle$ . El càlcul de rèpliques utilitza la identitat

$$\ln Z = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{Z^n - 1}{n}, \quad (2.27)$$

que ens permet calcular  $\langle \ln Z \rangle$  a partir de  $\langle Z^n \rangle$ , que en general és més fàcil d'obtenir.

Aquest càlcul el van dur a terme Schneider i Pytte l'any 1977 [45], i van obtenir l'energia lliure de Landau del sistema en el límit termodinàmic ( $N \rightarrow \infty$ )

$$\psi(m, H, T) = \frac{1}{2} J m^2 - \int dh_i f(h_i) \ln \{2 \cosh [\beta(Jm + h_i + H)]\} \quad (2.28)$$

que permet trobar l'energia lliure per partícula del sistema

$$g(H, T) = \psi(m^*, H, T) \quad (2.29)$$

on  $m^*$  és la posició del mínim de l'energia lliure de Landau per  $H$  i  $T$  fixats. Aquest valor es troba localitzant els extrems de l'energia de Landau (veure secció 1.2) i compleix

$$m^* = \int dh_i f(h_i) \tanh [\beta(Jm^* + h_i + H)] \quad (2.30)$$

Podem calcular l'energia del sistema (entalpia magnètica) a partir de la definició del potencial termodinàmic de l'energia lliure magnètica de Gibbs (1.4):

$$\begin{aligned} \frac{\mathcal{H}}{N} &= \frac{\partial}{\partial \beta} [\beta g(H, T)] = \\ &= -\frac{1}{2} J m^{*2} - H m^* - \int dh_i h_i f(h_i) \tanh [\beta(Jm^* + h_i + H)] \end{aligned} \quad (2.31)$$

Igual que pel cas del model d'Ising pur, a partir d'aquests resultats exactes pel MFM podem obtenir l'aproximació de camp mig (d'ordre zero) del RFIM per una xarxa qualsevol de connectivitat  $z$  fent el canvi  $J \rightarrow zJ$ .

Aquests càlculs analítics corresponents al MFM permeten estudiar el comportament crític del model per diferents distribucions de camps aleatoris. Per exemple, Aharony l'any 1978 [46] va utilitzar distribucions bimodals i va trobar que el sistema presenta un comportament complex amb un diagrama de fases que presenta un punt tricrític.

### Temperatura zero

Si fem el límit  $T \rightarrow 0$  o el que és equivalent  $\beta \rightarrow \infty$  obtenim la següent energia lliure de Landau:

$$\psi(m, H, T \rightarrow 0) = -\frac{1}{2}Jm^2 - Hm - \int dh_i |h_i| f(h_i) + 2 \int_0^{-Jm-H} dh_i h_i f(h_i) \quad (2.32)$$

els extrems de la qual els trobem solucionant:

$$m^* = 1 - 2 \int_{-\infty}^{-Jm^*-H} dh_i f(h_i) \quad (2.33)$$

A temperatura zero l'energia del sistema coincideix amb l'energia lliure de Gibbs i per tant:

$$\begin{aligned} \frac{\mathcal{H}}{N} &= \psi(m^*, H, T \rightarrow 0) = \\ &= -\frac{1}{2}Jm^{*2} - Hm^* - \int dh_i |h_i| f(h_i) + 2 \int_0^{-Jm^*-H} dh_i h_i f(h_i) \end{aligned} \quad (2.34)$$

Si considerem una densitat de probabilitat Gaussiana amb desviació estàndard  $\sigma$  i mitjana zero arribem a les següents expressions <sup>4</sup>

$$m^* = \operatorname{erf} \left( \frac{Jm^* + H}{\sqrt{2}\sigma} \right) \quad (2.38)$$

$$\frac{\mathcal{H}}{N} = -\frac{1}{2}Jm^{*2} - Hm^* - \frac{2\sigma}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(Jm^*+H)^2}{2\sigma^2}} \quad (2.39)$$

A la figura 2.4 es representen dues corbes d'imantació que s'han obtingut de solucionar l'equació (2.38) per  $J = 1$  i dos valors diferents de  $\sigma$ .

<sup>4</sup>Per fer aquests càlculs i altres que apareixen més endavant és de gran utilitat utilitzar la funció error

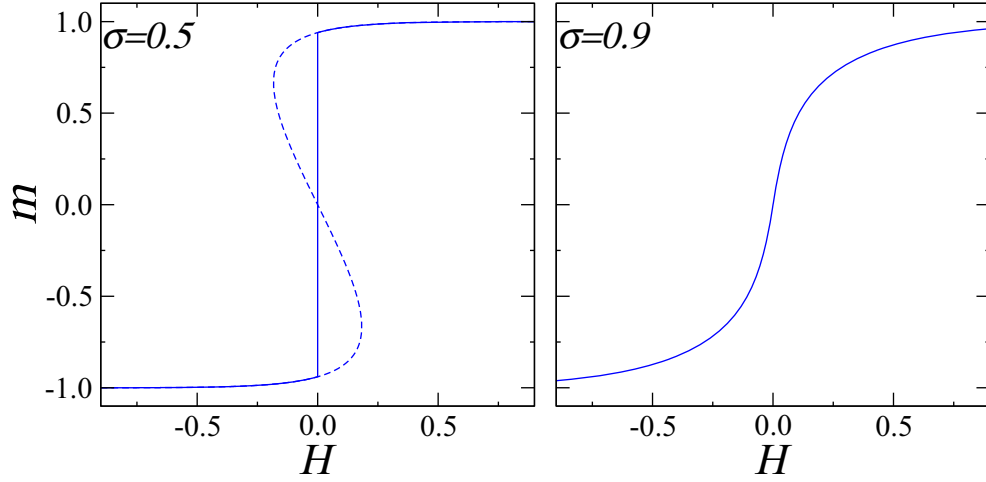
$$\operatorname{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x dt e^{-t^2}, \quad (2.35)$$

i la funció error complementària

$$\operatorname{erfc}(x) = 1 - \operatorname{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_x^\infty dt e^{-t^2}. \quad (2.36)$$

També s'ha fet servir

$$\int_{h_1}^{h_2} dh h \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{h^2}{2\sigma^2}} = -\frac{\sigma}{\sqrt{2\pi}} \left[ e^{-\frac{h^2}{2\sigma^2}} \right]_{h_1}^{h_2} \quad (2.37)$$



**Figura 2.4:** Corbes d'imantació del RFIM en equilibri a  $T = 0$  sobre MFM utilitzant una distribució Gaussiana de camps aleatoris. Es representen les corbes d'imantació corresponents a  $\sigma = 0.5 < \sigma_c$  i  $\sigma = 0.9 > \sigma_c$ . Sense pèrdua de generalitat s'ha considerat  $J = 1$ .

## 2.4.2 RFIM en equilibri sobre xarxes de Bethe

Considerem ara el RFIM sobre una xarxa de Bethe. A diferència del que passa en el model d'Ising sense desordre (model pur) on l'aproximació de Bethe-Peierls coincideix amb la solució exacte del model per la xarxa de Bethe, l'aproximació de Bethe-Peierls pel RFIM [47] no coincideix amb el resultat exacte del model sobre les xarxes de Bethe sinó que ens dóna un resultat aproximat. La solució analítica es fa molt més difícil de trobar degut a l'acoblament entre spins que introdueix el desordre.

Per fer-ho s'ha d'utilitzar un mètode que va introduir Bruinsma [48–50] per distribucions acotades, i que posteriorment s'ha utilitzat per trobar la solució del model amb una distribució Gaussiana de camps aleatoris [51]. En aquesta secció donarem els ingredients bàsics per poder calcular exactament la corba  $m(H, T)$  del RFIM en una xarxa de Bethe per qualsevol temperatura i qualsevol distribució de desordre  $f(h_i)$ . Aquests càlculs es poden obtenir gràcies a les propietats topològiques de les xarxes de Bethe, que ens permeten calcular la funció de partició del sistema recurrentment. El resultat que s'obté per la imantació és el següent:

$$m(H, T) = \int dh_i f(h_i) \int \cdots \int \left[ \prod_{k=1}^z dx_k W(x_k) \right] \tanh \left[ \beta \left( h_i + H + \sum_{k=1}^z g(x_k) \right) \right] \quad (2.40)$$

on la funció  $g(x)$  és:

$$g(x) = \frac{1}{2\beta} \ln \left[ \frac{e^{2\beta(x+J)} + 1}{e^{2\beta x} + e^{2\beta J}} \right], \quad (2.41)$$

i les distribucions  $W(x)$  compleixen la relació de recurrència

$$W^{(r)}(x) = \int dh_i f(h_i) \int \cdots \int \left[ \prod_{k=1}^{z-1} dx_k W^{(r+1)}(x_k) \right] \times \\ \times \delta \left( x - h_i - H - \sum_{k=1}^{z-1} g(x_k) \right) \quad (2.42)$$

on  $W^{(r)}(x)$  és la densitat de probabilitat de la variable  $x$  per la capa  $r$  de l'arbre de Cayley. La relació de recurrència anterior ens dóna  $W^{(r)}(x)$  de la capa  $r$  de l'arbre de Cayley en funció de  $W^{(r+1)}(x)$  de la capa  $r + 1$  de l'arbre (veure figura 2.1). Llavors per trobar  $W(x)$  per la part interior de l'arbre de Cayley on no hi ha efectes de frontera i tots els nodes són equivalents, és a dir per la xarxa de Bethe, hem d'iterar aquesta relació "infinite" vegades o equivalentment solucionar l'equació auto-consistent:

$$W(x) = \int \cdots \int \left[ \prod_{k=1}^{z-1} dx_k W(x_k) \right] f \left( x - H - \sum_{k=1}^{z-1} g(x_k) \right). \quad (2.43)$$

Per arribar a l'expressió anterior hem suprimit els superíndexs  $(r)$  i  $(r+1)$  i hem fet la integral sobre  $f(h_i)$ . Per tant l'equació auto-consistent anterior permet trobar  $W(x)$  per cada valor del camp extern  $H$ , que és la funció que s'ha d'utilitzar per calcular  $m(H)$ .

La solució del RFIM sobre la xarxa de Bethe en el límit  $z \rightarrow \infty$  tendeix a la solució del model de camp mig del RFIM [52] que s'ha presentat en la subsecció anterior.

### Temperatura zero

Si considerem el límit  $T \rightarrow 0$  ( $\beta \rightarrow \infty$ ) podem utilitzar les expressions anteriors considerant els següents límits:

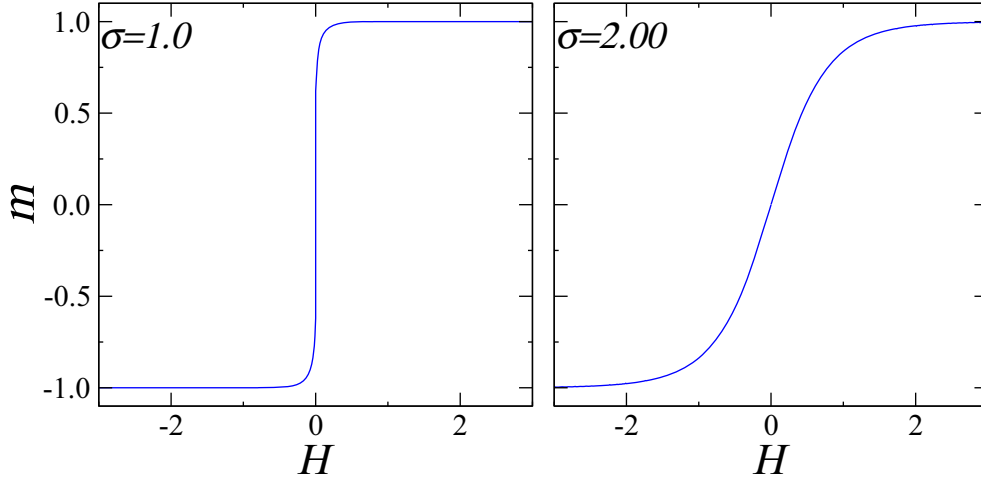
$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} g(x) = \begin{cases} -J & x < -J \\ x & -J < x < +J \\ +J & +J < x \end{cases} \quad (2.44)$$

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} \tanh[\beta x] = \text{sign}(x). \quad (2.45)$$

Si considerem els camps aleatoris distribuïts Gaussianament podem expressar la integral sobre desordre a partir de la funció error complementària introduïda anteriorment, obtenim

$$m(H) = \int \cdots \int \left[ \prod_{k=1}^z dx_k W(x_k) \right] \text{erfc} \left( \frac{-H - \sum_{k=1}^z g(x_k)}{\sqrt{2}\sigma} \right) - 1 \quad (2.46)$$





**Figura 2.5:** Corbes d'imantació del RFIM en equilibri a  $T = 0$  sobre una xarxa de Bethe  $z = 3$  utilitzant una distribució Gaussiana de camps aleatoris. Es representen les corbes d'imantació corresponents a  $\sigma = 1.0 < \sigma_c$  i  $\sigma = 2.0 > \sigma_c$ . Sense pèrdua de generalitat s'ha considerat  $J = 1$ .

D'aquests resultats s'obté que el RFIM en equilibri a  $T = 0$  presenta una transició de fase induïda per desordre per  $z \geq 3$ . En aquesta transició passem d'un comportament ferromagnètic per desordres baixos  $\sigma < \sigma_c$  a un comportament paramagnètic per desordres alts  $\sigma > \sigma_c$ . A la figura 2.5 es representen dues corbes d'imantació per diferents quantitats de desordre obtingudes de solucionar numèricament l'equació (2.46) amb  $J = 1$ . Aquests resultats els utilitzarem al capítol 4 d'aquesta tesi per comparar la corba d'imantació d'equilibri amb les corbes d'imantació obtingudes amb les dinàmiques metastables.

### 2.4.3 RFIM en equilibri sobre xarxes hipercúbiques

El model es pot solucionar analíticament en la cadena unidimensional utilitzant els resultats anteriors per les xarxes de Bethe amb  $z = 2$ . En aquest tipus de xarxa no hi ha transició de fase i el comportament del model és paramagnètic.

Per obtenir resultats exactes en dimensions superiors s'han d'utilitzar algorismes sofisticats de relaxació ja que degut a la presència de desordre congelat l'energia lliure té estats metastables on el sistema es queda clavat amb els algorismes de Montecarlo clàssics [53–56]. Malgrat la gran quantitat d'estudis que s'han realitzat durant les últimes dècades el comportament d'aquest model encara no està completament entès. El que s'ha pogut demostrar és l'existència d'una fase ferromagnètica per sota la línia crítica  $\sigma_c(T)$  quan s'utilitzen xarxes amb  $d > 2$  [57, 58].

### Temperatura zero

En el límit de temperatura zero podem utilitzar els resultats exactes de la secció 2.4.2 per les xarxes de Bethe amb  $z = 2$  per obtenir la solució de la xarxa  $d = 1$ , però no té molt d'interès ja que no presenta transició de fase.

Per les xarxes amb  $d \geq 2$  s'han d'utilitzar simulacions numèriques sobre xarxes de mida finita. Considerem una xarxa de mida  $N = L^d$  en la que hi definim una realització de camps aleatoris  $\{h_i\}$  i fixem el camp extern  $H$ . Llavors podem calcular la imantació i l'energia del sistema a partir de la funció de partició (2.21) utilitzant les següents equacions:

$$M = \frac{1}{\beta} \frac{\partial \ln Z}{\partial H} = \frac{\sum_{\{S_i\}} (\sum_i S_i) e^{-\beta \mathcal{H}(\{S_i\}, H)}}{\sum_{\{S_i\}} e^{-\beta \mathcal{H}(\{S_i\}, H)}} \quad (2.47)$$

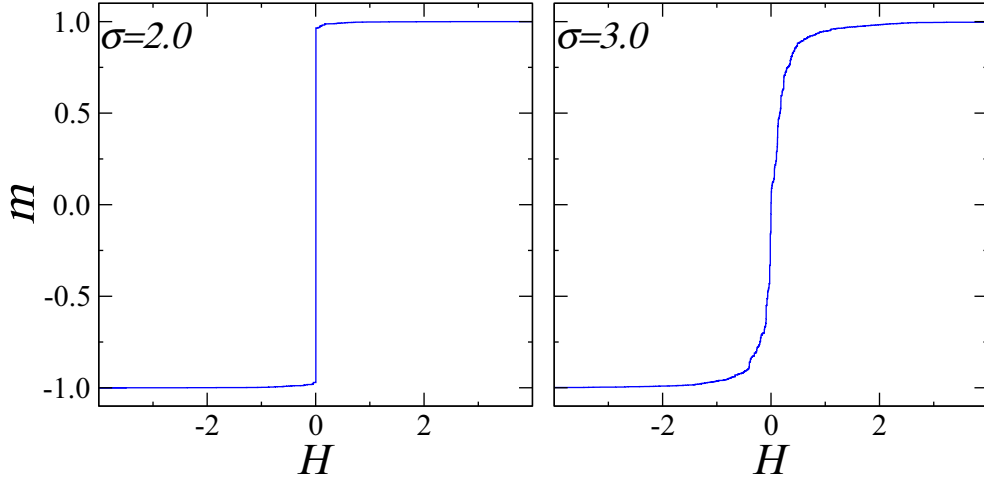
$$\mathcal{H} = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} = \frac{\sum_{\{S_i\}} \mathcal{H}(\{S_i\}, H) e^{-\beta \mathcal{H}(\{S_i\}, H)}}{\sum_{\{S_i\}} e^{-\beta \mathcal{H}(\{S_i\}, H)}}. \quad (2.48)$$

Si fem el límit a  $T \rightarrow 0$  ( $\beta \rightarrow \infty$ ) a les expressions anteriors de la imantació i de l'energia obtenim:

$$M = \sum_i S_i^* \quad (2.49)$$

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}(\{S_i^*\}, H) \quad (2.50)$$

on  $\{S_i^*\}$  és la configuració que té la mínima entalpia microscòpica  $\mathcal{H}(\{S_i\}, H)$ , és a dir l'estat fonamental (*ground state*). La configuració  $\{S_i^*\}$  dependrà de la realització de camps aleatoris  $\{h_i\}$  que hem considerat i de la mida del sistema. Per eliminar la dependència amb la realització de camps aleatoris s'han fan promitjos sobre diferents realitzacions, i per estudiar les propietats del sistema en el límit termodinàmic s'han de realitzar estudis d'escalat amb la mida finita (FSS). Per trobar l'estat fonamental  $\{S_i^*\}$  s'utilitzen simulacions numèriques. L'algorisme més senzill consisteix en explorar totes les configuracions possibles i quedar-nos amb aquella amb una energia més baixa té un temps de computació que creix exponencialment amb la mida del sistema  $t \sim \mathcal{O}(2^N)$  i per tant no és un mètode efectiu. Per millorar el temps de computació en la recerca de l'estat fonamental s'ha utilitzat l'equivalència entre aquest problema i un problema d'optimització de *Maximum-Flow* [59] el qual es pot solucionar amb algorismes que tenen un temps de computació polinòmic  $t \sim \mathcal{O}(N^\alpha)$ . El mètode més efectiu per solucionar el problema d'optimització de *Maximum-Flow* s'anomena *Push-Relabel* [60–62]. L'equivalència entre la recerca de l'estat fonamental del RFIM i els problemes d'optimització de *Maximum-Flow* ha permès la realització d'una gran quantitat d'estudis del model [63–68]. Majoritàriament els estudis anteriors s'han centrat en caracteritzar la transició de fase de primer ordre que té el model a  $H = 0$ , però també s'han realitzat estudis per veure l'evolució dels estats fonamentals del model quan conduïm el sistema amb un camp extern aplicat [69–71].



**Figura 2.6:** Corbes d'imantació del RFIM en equilibri a  $T = 0$  sobre una xarxa cúbica  $d = 3$  utilitzant una realització de camps aleatoris distribuïts Gaussiàment. Aquestes corbes han estat obtingudes a partir de simulacions numèriques, concretament s'ha utilitzat l'algorisme *Push-Relabel* sobre un sistema de mida  $L = 20$ . Es presenten les corbes d'imantació corresponents a  $\sigma = 2.0 < \sigma_c$  i  $\sigma = 3.0 > \sigma_c$ . Sense pèrdua de generalitat s'ha considerat  $J = 1$  a les simulacions.

Els estudis numèrics realitzats mostren que el sistema sobre una xarxa  $d > 2$  presenta un comportament ferromagnètic per valors de desordre menors que el valor crític  $\sigma_c$ . A la figura 2.6 es poden veure dos cicles d'histeresi obtinguts a partir de simulacions numèriques sobre una xarxa cúbica. El comportament per  $d = 2$  no està del tot clar, però sembla que per aquesta dimensió el sistema no presenta transició de fase [72–74]

## 2.5 El RFIM amb dinàmica metastable

Fins ara hem considerat el RFIM en equilibri. En aquesta secció ens disposem a estudiar el RFIM amb dinàmica metastable a temperatura zero. La dinàmica metastable consisteix en considerar una relaxació local del sistema en lloc d'una relaxació global. Es poden considerar diferents dinàmiques metastables depenen del número de spins que involucrem a la relaxació local. Aquestes dinàmiques metastables les anomenem dinàmiques *k-spin-flip*.

Per definir de forma general l'evolució del sistema amb una dinàmica metastable *k-spin-flip* hem de definir l'energia microscòpica associada a un bloc de  $k$  spins que anomenem  $\mathcal{H}_k(S_1 \cdots S_k)$  i procedir de la forma següent:

- (i) Inicialitzem el sistema en l'estat de saturació negativa  $S_i = -1 \quad \forall i$ .
- (ii) Augmentem el camp extern  $H$  amb  $\Delta H$ .

- (iii) Escombrem tot el sistema i posem tots els blocs de spins  $(S_1 \cdots S_k)$  en l'estat que minimitzi  $\mathcal{H}_k(S_1 \cdots S_k)$ .
- (iv) Repetim el pas anterior fins que tots els blocs de  $k$  spins estiguin en l'estat de mínim  $\mathcal{H}_k$  i no s'acceptin més canvis de spins. Llavors diem que el sistema està en un estat metastable segons la dinàmica  $k$ -*spin-flip* o estat  $k$ -*metastable*.
- (v) Tornem al punt (ii) fins que arribem a l'estat de saturació positiva

Amb aquest procediment obtenim la branca inferior del cicle d'histèresi, per obtenir la branca superior hem d'iniciar l'evolució en l'estat de saturació positiva  $S_i = +1 \ \forall i$  i anar disminuint el camp extern.

El RFIM a  $T = 0$  amb dinàmica metastable presenta les següents propietats [2, 75]:

- (i) Propietat abeliana. L'estat  $k$ -metastable a que arribem després de relaxar el sistema, amb un camp extern fixat  $H$ , no depèn de l'ordre en que relaxem localment els blocs de  $k$  spins.
- (ii) Histèresi *rate-independent*. Com a conseqüència del fet de treballar a temperatura zero el sistema no pot saltar barreres energètiques.
- (iii) Ordenació parcial dels estats del sistema. Aquests sistemes permeten definir una ordenació parcial que ens permet ordenar-los.
- (iv) Evolució que preserva l'ordre dels estats (*no-passing rule*). Com a conseqüència d'aquesta propietat els spins no poden tenir girs inversos, és a dir si partim de l'estat  $S_i = -1 \ \forall i$  i anem augmentant el camp extern  $H$  (branca inferior del cicle d'histèresi) quan un spin passa a l'estat  $+1$  aquest no pot tornar a l'estat  $-1$ .
- (v) Es sabut [1] que els sistemes que presenten les propietats (ii-iv) manifesten la propietat del *return-point memory*.

Per tant el RFIM a  $T = 0$  amb dinàmica metastable ens permet modelitzar els sistemes ferromagnètics reals amb histèresi *rate-independent* que tenen una evolució amb allaus (soroll Barkhausen [6]). A més aquest model compleix la propietat del *return-point memory*, propietat que mostren experimentalment alguns dels sistemes ferromagnètics reals [1].

Definim  $\tau_s$  com el temps característic que tarda un spin a girar i considerem el temps característic de variació del camp extern que hem introduït al capítol anterior  $\tau_H$ . A partir d'ara suposen que ens trobem en el règim  $\tau_s \ll \tau_H$ , en el qual es suposa que totes les allaus tenen lloc instantàniament en comparació amb el ritme de variació del camp extern  $H$ . Malgrat que aquest règim és el

que es considera habitualment, diferents autors han realitzat estudis en altres règims [76–78].

A les següents seccions es farà un breu resum dels estudis que s’han fet del RFIM amb dinàmica metastable en diferents xarxes en el règim  $\tau_s \ll \tau_H$ . Considerarem xarxes de connectivitat infinita (Model de Camp mig), xarxes de Bethe i xarxes hipercúbiques de dimensió  $d$ .

### Dinàmica 1-*spin-flip*

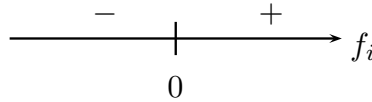
Aquesta dinàmica és la més utilitzada i la va introduir Sethna et al. l’any 1993 [2]. L’Hamiltonià local que s’ha de considerar és:

$$\mathcal{H}_1(S_i) = -f_i S_i \quad (2.51)$$

on  $f_i$  és el camp local que té el spin i pren el valor

$$f_i = J \sum_{\langle k/i \rangle} S_k + h_i + H. \quad (2.52)$$

El sumatori de l’equació anterior s’estén sobre els spins que són primers veïns del spin  $i$ , i ens referim a ells amb la notació  $\langle k/i \rangle$ . El camp local que tenim al nus  $i$  de la xarxa és  $h_i$  i  $H$  és el camp extern aplicat. Llavors l’estat que minimitza l’energia local  $\mathcal{H}_1(S_i)$  s’obté de la condició  $f_i S_i > 0$ . Aquesta condició significa que cada spin minimitza la seva energia local quan està alineat amb el seu camp local. Es pot veure aquesta condició gràficament a la figura 2.7.



**Figura 2.7:** Diagrama d’estabilitat per un spin  $S_i$  amb la dinàmica 1-*spin-flip*.

### Dinàmica 2-*spin-flip*

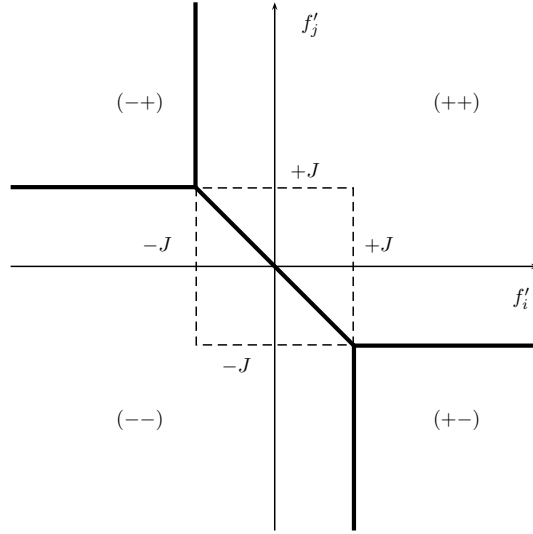
L’any 2005 Vives et al. [75] van introduir la dinàmica  $k = 2$ , en la que l’Hamiltonià local que hem de tenir en compte és

$$\mathcal{H}_2(S_i, S_j) = -f'_i S_i - f'_j S_j - JS_i S_j, \quad (2.53)$$

en la que utilitzem uns camps  $f'$  que s’obtenen a partir de la definició del camp local (2.52) a partir de les següents expressions:

$$f'_i = f_i - JS_j \quad (2.54)$$

$$f'_j = f_j - JS_i \quad (2.55)$$



**Figura 2.8:** Diagrama d'estabilitat per una parella de primers veïns  $S_i - S_j$  sota la dinàmica  $2\text{-spin-flip}$ . El requadre puntejat ens indica les zones per les quals té lloc el salt cooperatiu irreductible, tant per la branca inferior del cicle com per la superior.

Estudiant el comportament de l'Hamiltonià local  $\mathcal{H}_2(S_i, S_j)$  en funció dels camps  $f'_i$  i  $f'_j$  podem trobar el diagrama d'estabilitat de cada configuració. Aquest diagrama es pot veure en la figura 2.8. Aquesta dinàmica introdueix un mecanisme de transició que no apareix per la dinàmica  $1\text{-spin-flip}$  i anomenem salt cooperatiu irreductible. Aquest nou canal de relaxació es dona quan els dos spins que formen la parella canvien alhora d'estat per minimitzar  $\mathcal{H}_2$ , malgrat que el gir individual de qualsevol dels dos spins no està permès segons la dinàmica  $1\text{-spin-flip}$ .

Per entendre millor aquest nou mecanisme suposem que estem a la branca inferior del cicle d'histèresi. En aquest cas tenim un salt cooperatiu irreductible quan una parella pateix la transició  $(--)\rightarrow(++)$  malgrat que els dos spins no puguin saltar individualment segons la dinàmica  $1\text{-spin-flip}$ , és a dir que es compleix  $f'_i < 0$  i  $f'_j < 0$ . Aquesta transició tindrà lloc quan es compleixi que  $\mathcal{H}_2(+1, +1) - \mathcal{H}_2(-1, -1) < 0$ , llavors el conjunt de condicions que donen el salt cooperatiu irreductible són:

$$f'_i + f'_j > 0 \quad (2.56)$$

$$f'_i - J < 0 \quad (2.57)$$

$$f'_j - J < 0 \quad (2.58)$$

$$(2.59)$$

Amb un raonament anàleg a l'anterior podem trobar el conjunt de condicions del salt cooperatiu irreductible per la branca superior del cicle. Aquest salt cooperatiu consisteix en una transició  $(++)\rightarrow(--)$  d'una parella de spins i les

condicions són les següents:

$$f'_i + f'_j < 0 \quad (2.60)$$

$$f'_i - J > 0 \quad (2.61)$$

$$f'_j - J > 0 \quad (2.62)$$

$$(2.63)$$

Per tant aquesta nova dinàmica més cooperativa permet al sistema superar barreres energètiques que no pot superar amb la dinàmica *1-spin-flip*, permeten una millor relaxació cap a l'equilibri.

### Dinàmiques amb més grau de cooperació

Podem seguir augmentant el grau de cooperació de les dinàmiques, per exemple podem considerar la dinàmica *3-spin-flip*. L'Hamiltonià local per la dinàmica *3-spin-flip* és:

$$\mathcal{H}_3(S_i, S_j, S_k) = -f'_i S_i - f'_j S_j - f'_k S_k - JS_i(S_j + S_k), \quad (2.64)$$

que ens permet trobar també els dominis d'estabilitat en l'espai  $(f'_i, f'_j, f'_k)$ . Aquesta dinàmica s'utilitzarà al capítol 4 on compararem els cicles d'histèresi d'aquesta amb els cicles que s'obtenen a partir de les altres dinàmiques menys cooperatives.

Es pot anar augmentant el número de spins que s'involucren en la relaxació local, permeten relaxacions cada vegada més globals i per tant obtenint trajectòries més properes a l'equilibri amb cicles d'histèresi amb menys coercitivitat. En el límit en que considerem la dinàmica *N-spin-flip* retrobem la trajectòria d'equilibri a temperatura zero.

## 2.5.1 RFIM metastable: MFM

### Dinàmica *1-spin-flip*

L'estudi del RFIM a  $T = 0$  amb dinàmica metastable *1-spin-flip* ja el van dur a terme Sethna et. al a l'article original [2]. Com s'ha vist a la secció 2.4.1 l'Hamiltonià del RFIM en el model de camp mig és:

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2} \frac{J}{N} \sum_{i,j} S_i S_j - \sum_i h_i S_i - H \sum_i S_i. \quad (2.65)$$

Per resoldre el model amb dinàmica metastable *1-spin-flip* hem d'estimar el camp local  $f_k$  que pateix el spin  $k$  de la xarxa fent:

$$f_k = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial S_k} = \frac{J}{N} \sum_i S_i + h_k + H \quad (2.66)$$

on en el límit termodinàmic la quantitat  $\sum_i S_i/N$  serà un bon estimador de la imantació per spin promitjada sobre desordre, i per tant tenim que:

$$m = \frac{1}{N} \sum_i S_i \quad (2.67)$$

Per altra banda sabem que en la dinàmica metastable cada spin està alineat amb el seu camp local i per tant  $S_k = +1$  si  $f_k > 0$  i  $S_k = -1$  si  $f_k < 0$ . Aquest comportament local ens permet calcular la imantació per spin promitjada sobre desordre en el límit termodinàmic a partir de la distribució  $f(h_i)$  dels camps aleatoris:

$$m = \langle S_k \rangle = \int_{-Jm-H}^{+\infty} dh_k f(h_k) - \int_{-\infty}^{-Jm-H} dh_k f(h_k), \quad (2.68)$$

i per tant obtenim una equació tancada que ens dóna la imantació del sistema per cada valor del camp extern:

$$m = 1 - 2 \int_{-\infty}^{-Jm-H} dh_k f(h_k). \quad (2.69)$$

Observem que és la mateixa equació que pel cas d'equilibri (2.33), només que ara el sistema arribarà fins el límit de metastabilitat i en lloc de tenir la transició a  $H = 0$  tindrà la transició per uns camps diferents de zero.

Per la distribució Gaussiana tenim que

$$m = \operatorname{erf} \left( \frac{Jm + H}{\sqrt{2}\sigma} \right) \quad (2.70)$$

i el desordre crític és  $\sigma_c = \sqrt{\frac{2}{\pi}}J$ . L'energia del sistema (entalpia magnètica) es pot calcular amb

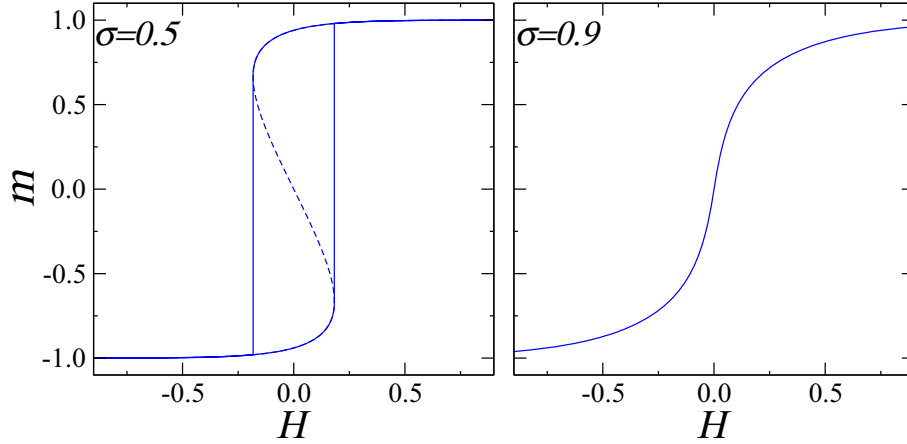
$$\frac{\mathcal{H}}{N} = -\frac{1}{2}Jm^2 - Hm - \frac{2\sigma}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(Jm+H)^2}{2\sigma^2}} \quad (2.71)$$

A la figura 2.9 es representen dues corbes d'imatció, per dues quantitats de desordre diferents, que s'han obtingut de solucionar l'equació (2.70) prenent  $J = 1$ .

### Dinàmica 2-spin-flip

Pel que fa al MFM amb dinàmica 2-spin-flip s'han dut a terme diferents càlculs per part dels autors de l'article [75] però no van arribar a cap conclusió definitiva (comunicació privada).





**Figura 2.9:** Cicles d'histèresi del RFIM amb dinàmica metastable *1-spin-flip* sobre MFM utilitzant una distribució Gaussiana de camps aleatoris. Representem el mateixos cicles que a la figura 2.4.

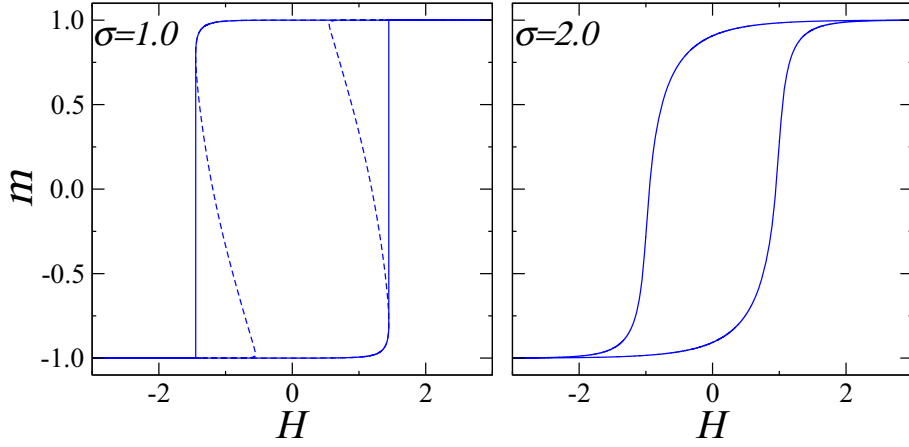
## 2.5.2 RFIM metastable sobre xarxes de Bethe

### Dinàmica *1-spin-flip*

En aquest tipus de xarxes el model amb dinàmica metastable es pot solucionar analíticament gràcies a la peculiar topologia d'aquestes. El punt clau radica en trobar una relació de recurrència per una quantitat rellevant que ens permeti trobar la solució exacte. Aquesta relació de recurrència consisteix en calcular aquesta quantitat rellevant per una capa de la xarxa Bethe en funció del valor de la mateixa quantitat per la capa immediatament més exterior. Aquestes relacions de recurrència es poden trobar gràcies al fet que no hi ha cicles tancats en les xarxes de Bethe, llavors com que en una xarxa de Bethe totes les capes són equivalents (ja hem considerat el límit termodinàmic), les relació de recurrència es converteix en una equació auto-consistent els punts fixos de la qual seran els valors que prendrà la quantitat rellevant.

Els càlculs amb la dinàmica *1-spin-flip* els va iniciar Shukla l'any 1996 calculant la imantació del model per la cadena unidimensional [79] i llavors l'any 1997 Dhar et al. [80] el van generalitzar a la xarxa de Bethe trobant una transició de fase fora de l'equilibri induïda per desordre pels casos  $z \geq 4$ . En el capítol 3 d'aquesta tesi es reproduïxen els càlculs de la imantació i es calculen analíticament els termes energètics de l'Hamiltonà. A la figura 2.10 es representen dues corbes d'imatnació que s'han obtingut de solucionar les expressions analítiques que es veuran al capítol 3.

En aquest cas també s'han pogut calcular analíticament les trajectòries de tornada de primer ordre [81, 82] que també les anomenem FORC's, acrònim de l'anglès *First Order Reversal Curves*. Aquestes trajectòries s'obtenen de la següent manera: partim de l'estat de saturació positiu (negatiu) i anem disminuint (aug-



**Figura 2.10:** Cicles d'histèresi del RFIM amb dinàmica metastable *1-spin-flip* sobre una xarxa de Bethe amb  $z = 4$  utilitzant una distribució Gaussiana de camps aleatoris. Els cicles corresponents a  $\sigma = 1.0 < \sigma_c$  i  $\sigma = 2.0 > \sigma_c$ .

mentem) el camp fins  $H_a$ , llavors canviem la direcció de conducció del camp i augmentem (disminuïm) el camp fins a  $H_b$ , obtenint la funció  $m(H_a, H_b)$ .

L'any 2000 Sabhapandit et al. va calcular analíticament la distribució de les mides de les allaus [83].

### Dinàmica *2-spin-flip*

El càlcul de la imantació del model en aquestes xarxes amb la dinàmica *2-spin-flip* es presenta al capítol 4 d'aquesta tesi. En aquest capítol també compararem els resultats obtinguts analíticament amb els resultats obtinguts a partir de simulacions numèriques.

## 2.5.3 RFIM metastable sobre xarxes hipercúbiques

### Dinàmica *1-spin-flip*

El sistema es pot solucionar analíticament per la cadena unidimensional ja que aquesta és completament equivalent a una xarxa de Bethe amb  $z = 2$ . Per la xarxa quadrada i la xarxa cúbica i en general per xarxes  $d \geq 2$  s'han d'utilitzar arguments del grup de normalització [84, 85] o simulacions numèriques. Per simular el model amb la dinàmica *1-spin-flip* en el règim  $\tau_s \ll \tau_H$  hem d'utilitzar el següent procediment:

- (i) Inicialitzem el sistema en l'estat de saturació negativa  $S_i = -1 \ \forall i$ .

- (ii) Fixem el camp extern a menys el valor màxim dels camps locals dels spins que estan avall, és a dir

$$H = -\max(\{f_i\}) \quad \text{tal que } S_i = -1. \quad (2.72)$$

Aquest valor del camp es el valor pel qual es desestabilitzarà el spin que està més inestable, i serà el spin que inicialitzarà l'allau

- (iii) Iniciem la propagació de l'allau, girant tots els spins que es desestabilitzen (és a dir aquells que tenen  $f_i \geq 0$ ). Girem el spin que provoca l'allau. Per l'elecció del camp extern aquest spin girarà amb un camp local  $f_i = 0$ . Aquest gir pot desestabilitzar els seus primers veïns, que al girar poden desestabilitzar els seus primers veïns. Per tant es van girant tots els spins fins que tots estan alineats amb el seu camp local, en aquest punt es dona per acabada l'allau.
- (iv) Tornem al punt (ii) fins que arribem a l'estat de saturació positiva  $S_i = +1 \quad \forall i$ .

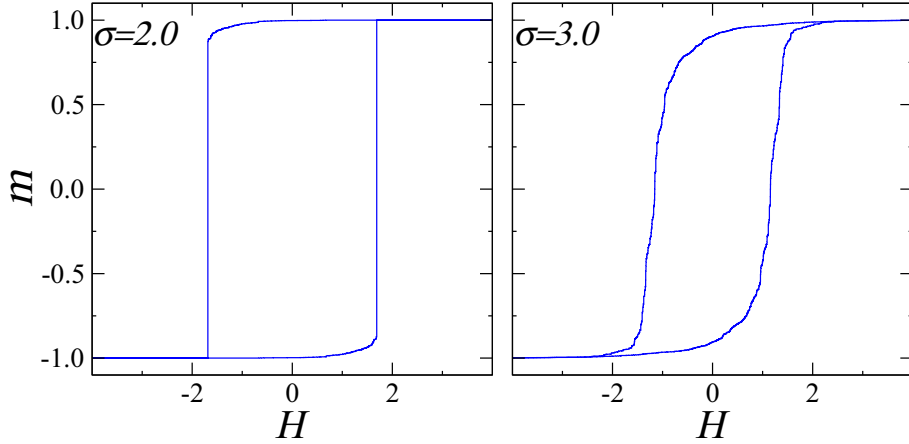
Igual que abans aquest procediment permet trobar la branca inferior del cicle, per obtenir la branca superior hem d'iniciar el procediment des de l'estat de saturació positiva  $S_i = +1 \quad \forall i$  i el valor del camp extern on es desestabilitza el següent spin s'ha de calcular amb

$$H = -\min(\{f_i\}) \quad \text{tal que } S_i = +1. \quad (2.73)$$

Un dels mètodes per trobar el camp extern on s'inicia cada allau consisteix en escombrar tot el sistema, aquest mètode s'anomena *Brute force* i si considerem que es produeixen de l'ordre de  $N$  allaus quan es condueix el sistema des de  $H = -\infty$  fins a  $H = +\infty$  el temps de computació per una branca del cicle és de  $\mathcal{O}(N^2)$ . Existeix un altre procediment que s'anomena *Sorted List* [86] que es basa en treballar sobre una llista ordenada dels camps aleatoris. Aquesta llista només es necessita ordenar una vegada i com que existeixen algorismes que permetent l'ordenació amb un temps de  $\mathcal{O}(N \ln N)$  el temps de computació per obtenir una branca del cicle és  $\mathcal{O}(N \ln N)$ .

El resultat que obtenim dependrà de la realització de camps aleatoris  $\{h_i\}$ , aquesta dependència s'elimina fent promitjos sobre realitzacions de desordre. Evidentment també tindrem una dependència amb la mida del sistema, llavors per trobar el comportament en el límit termodinàmic s'han de fer estudis d'escalat amb la mida finita (FSS).

A la figura 2.11 es poden veure dos cicles d'histèresi obtinguts a partir de simulacions numèriques sobre una xarxa cúbica. Malgrat s'han realitzat estudis en la xarxa quadrada  $d = 2$  [87, 88] no s'ha arribat a uns resultats concloents. Estudis del model en la xarxa cúbica i distribució Gaussiana [78, 87, 89, 90] han posat de manifest que el sistema presenta una transició de fase fora de l'equilibri induïda per desordre, per la que els cicles d'histèresi  $m(H)$  passen de tenir un salt discontinu a  $\sigma < \sigma_c$  a ser continus i suaus quan  $\sigma > \sigma_c$ .



**Figura 2.11:** Cicles d'histèresi del RFIM amb dinàmica metastable sobre una xarxa cúbica  $d = 3$ . Aquests han estat obtinguts a partir de simulacions numèriques sobre un sistema de mida  $L = 20$ . Considerem una distribució Gaussiana i representem els cicles corresponents a  $\sigma = 2.0 < \sigma_c$  i  $\sigma = 3.0 > \sigma_c$ .

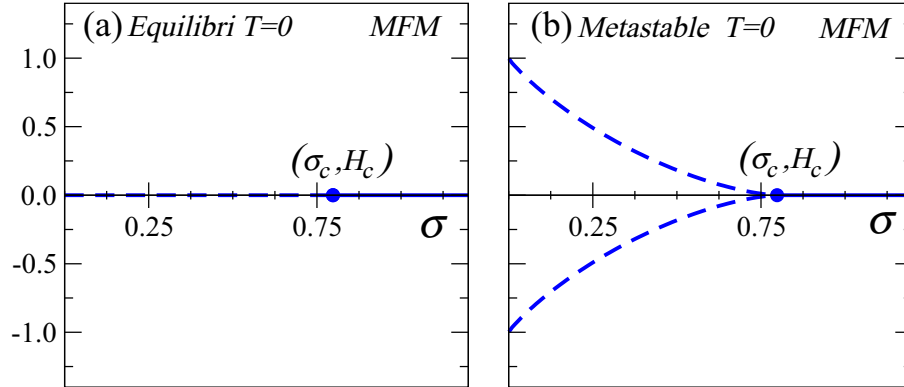
### Dinàmica *2-spin-flip*

L'estudi de la dinàmica *2-spin-flip* en una xarxa cúbica i distribució Gaussiana de camps aleatoris ha estat realitzat per Vives et al. [75]. El sistema també presenta una transició de fase fora de l'equilibri induïda per desordre.

## 2.6 Resum de resultats

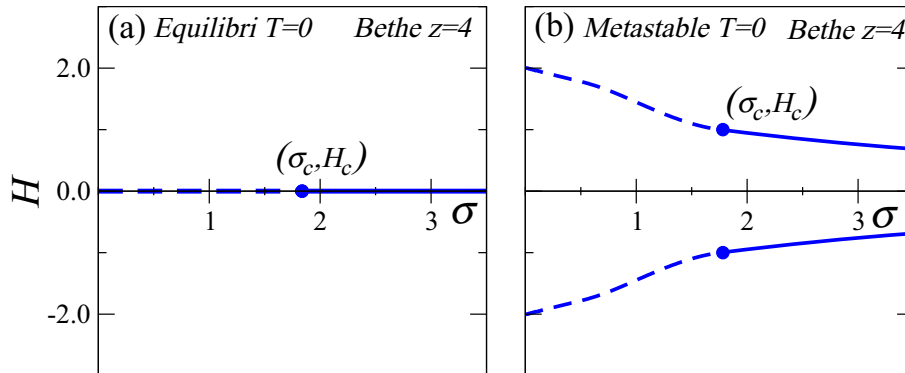
En aquesta secció resumim breument el comportament del RFIM amb una distribució Gaussiana de camps aleatoris definit sobre les diferents xarxes considerades tant pel cas d'equilibri a  $T = 0$  (*ground state*) com pel cas d'evolució amb la dinàmica metastable *1-spin-flip* a  $T = 0$ . També es donen les coordenades del punt crític del RFIM amb dinàmica metastable *2-spin-flip* sobre una xarxa cúbica [75] i i sobre una xarxa de Bethe  $z = 3$  que es calcula al capítol 4.

Per la xarxa de connectivitat infinita (MFM) el RFIM presenta una transició de fase tant per l'equilibri a  $T = 0$  com per la dinàmica metastable. En aquest tipus de xarxes els punts crítics coincideixen degut a que el comportament de la imantació s'obté d'unes equacions completament equivalents (2.38) i (2.70) però fent diferents consideracions. Pel cas d'equilibri a  $T = 0$  el sistema sempre es situa a l'estat de mínima energia i per això tenim la transició a  $H = 0$ , en canvi pel cas metastable el sistema arriba fins el límit de metastabilitat i per això la transició es produeix per un camp diferent de zero. Una altra característica rellevant del model pel cas metastable és que no presenta histèresi per sobre del punt crític. El diagrama de fases pels dos casos es pot veure a la figura 2.12.



**Figura 2.12:** Diagrama de fases en el pla  $\sigma - H$  del RFIM en una xarxa de connectivitat infinita (MFM) (a) en equilibri amb  $T = 0$  i (b) amb la dinàmica metastable  $1$ -spin-flip. Les coordenades dels punts crítics coincideixen a  $(\sigma_c, H_c) = (\sqrt{2/\pi}, 0)$ .

Per les xarxes de Bethe el RFIM Gaussià en equilibri a  $T = 0$  presenta transició de fase per les connectivitats  $z \geq 3$  i en canvi amb dinàmica metastable  $1$ -spin-flip presenta transició per  $z \geq 4$ . Per les xarxes de Bethe els punts crítics de l'equilibri i de fora l'equilibri no coincideixen. Una característica rellevant del model amb dinàmica metastable en aquest tipus de xarxes és que, a diferència del MFM, si que presenta histèresi per sobre del punt crític. Qualitativament els diagrames de fase en el pla  $\sigma - H$  seran com els de la figura 2.13. Les coordenades del punt crític per diferents connectivitats es donen a la taula 2.1.



**Figura 2.13:** Diagrama de fases en el pla  $\sigma - H$  del RFIM en una xarxa de Bethe  $z = 4$  (a) en equilibri amb  $T = 0$  i (b) amb la dinàmica metastable  $1$ -spin-flip. Les coordenades dels punts crítics són diferents segons el cas considerat, els valors numèrics es troben a la taula 2.1. A la secció 3 veurem que l'estudi detallat del diagrama de fases per les xarxes de Bethe amb dinàmica metastable posa de manifest una peculiaritat al voltant del punt crític.

Del resultat obtingut per les xarxes de Bethe amb  $z = 2$  es troba directament que el RFIM definit sobre xarxes hipercúbiques amb  $d = 1$  no tenen punt crític i

Tipus Xarxa		Metastable $T = 0$		Equilibri
		<i>1-spin-flip</i>	<i>2-spin-flip</i>	$T = 0$
MFM	$\sigma_c$	$\sqrt{2/\pi}$	–	$\sqrt{2/\pi}$
	$H_c$	0	–	0
Bethe $z = 3$	$\sigma_c$	0	1.006	1.050
	$H_c$	0	0.466	0
Bethe $z = 4$	$\sigma_c$	1.78125	–	1.8375
	$H_c$	1.000	–	0
Hiperúbica $d = 3$	$\sigma_c$	2.21	2.25	2.28
	$H_c$	1.425	0.885	0

**Taula 2.1:** Coordenades del punt crític (en unitats de  $J$ ) del RFIM definit sobre diferents tipus de xarxa pel cas d'equilibri a  $T = 0$  i per les dinàmiques metastables *1-spin-flip* i *2-spin-flip*. Aquests valors s'han obtingut de les referències [2, 51, 75, 94, 95] i de resultats del capítol 4 d'aquesta tesi.

per tant sempre es comportaran com un paramagnètic. Malgrat la gran quantitat d'estudis realitzats, no s'ha arribat a una conclusió clara en la determinació de la dimensió crítica inferior  $d_l$  per la qual no existeix transició. Diversos autors [91–93] han suggerit que el comportament ferromagnètic en el RFIM no pot aparèixer en xarxes hiperúbiques amb  $d \leq 2$  i per tant que la dimensió crítica inferior del RFIM és  $d_l = 2$ . El RFIM en xarxes hiperúbiques amb  $d = 3$  és qualitativament igual al que es mostra a la figura 2.13 i les coordenades del punt crític estan especificades a la taula 2.1.

Malgrat que l'existència d'aquest punt crític pot semblar un comportament teòric allunyat de la realitat, s'han trobat evidències experimentals de l'existència d'aquest per diferents sistemes magnètics [96, 97]. A més el RFIM amb dinàmica metastable reproduceix el comportament dels ferromagnètics reals que s'ha mostrat a la figura 1.15 on es pot veure que les trajectòries  $m(H)$  dels sistemes amb comportament atèrmic són discontinües a escales petites, degut a l'evolució amb allaus que porten el sistema des d'un estat metastable a un altre. Per altra banda la distribució de la mida de les allaus en el RFIM és una llei de potències en el punt crític [2].

Finalment és important remarcar que les propietats del RFIM a la transició de fase tant d'equilibri a  $T = 0$  com d'evolució metastable es caracteritzen per un conjunt d'exponents crítics que determinen la classe d'universalitat dels models [38]. Una gran quantitat de treballs han posat de manifest evidències clares per pensar que aquestes dues transicions pertanyen a la mateixa classe d'universalitat i estan controlades pel mateix punt fix [78, 95, 98].

# Capítol 3

## Tractament exacte del RFIM amb dinàmica *1-spin-flip*

### 3.1 Introducció

En aquest capítol ens disposem a presentar els càlculs analítics dels termes energètics del RFIM sobre una xarxa de Bethe amb dinàmica metastable *1-spin-flip* a temperatura zero. Aquests càlculs els compararem amb els resultats obtinguts a partir de simulacions numèriques realitzades sobre grafs aleatoris clàssics regulars. Aquests grafs són útils per simular xarxes de Bethe [80,99] ja que malgrat ser de mida finita no tenen efectes de frontera. L'únic inconvenient que presenten és la presència d'alguns cicles tancats. L'equivalència entre la xarxa de Bethe i els grafs aleatoris es basa en el fet que la probabilitat de tenir cicles tancats disminueix a mesura que augmentem la mida del sistema  $N$  i per tant un graf aleatori en el límit termodinàmic ( $N \rightarrow \infty$ ) és completament equivalent a una xarxa de Bethe.

Aquests càlculs exactes es poden dur a terme sobre les xarxes de Bethe gràcies a les seves propietats topològiques particulars que s'han explicat al capítol 2. Utilitzant aquestes propietats topològiques es poden escriure unes relacions de recurrència que ens permetran arribar als resultats exactes. Aquest tipus de càlculs els va iniciar Shukla l'any 1996 [79] quan va calcular el cicle d'histèresi de la xarxa unidimensional (equivalent a una xarxa de Bethe amb connectivitat  $z = 2$ ) [79,100]. L'any 1997 Dhar et al. [80] van simplificar i generalitzar el càlcul per una de xarxa de Bethe amb connectivitat  $z$  qualsevol. L'any 2000 Shukla va calcular analíticament els FORCS (trajectòries de tornada de primer ordre) per una cadena unidimensional ( $z = 2$  o  $d = 1$ ) [81] i l'any 2001 ho va generalitzar a una xarxa de Bethe [82]. L'any 2000 Sabhapandit et al. van calcular analíticament les distribucions de les mides de las allaus en una xarxa de Bethe [83].

Com ja s'ha dit els càlculs nous que es presenten en aquest capítol són els dels termes energètics. El model es defineix sobre una xarxa de Bethe de mida  $N$  i

l'Hamiltonià del model es pot escriure com

$$\mathcal{H} = +\mathcal{U}_e + \mathcal{U}_d - HM \quad (3.1)$$

on  $H$  és el camp extern,

$$M(\{S_i\}) = \sum_{i=1}^N S_i \quad (3.2)$$

és la imantació,

$$\mathcal{U}_e(\{S_i\}) = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j \quad (3.3)$$

és l'energia d'intercanvi ferromagnètica que té en compte totes les parelles de primers veïns, i

$$\mathcal{U}_d(\{S_i\}) = - \sum_{i=1}^N h_i S_i \quad (3.4)$$

és l'energia d'acoblament amb el desordre. El desordre s'introdueix posant els camps aleatoris  $\{h_i\}$  que els considerem distribuïts segons una densitat de probabilitat Gaussiana centrada al zero

$$f(h_i) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{h_i^2}{2\sigma^2}}, \quad (3.5)$$

on  $\sigma$  és la desviació estàndard i controla la quantitat de desordre que introduïm al sistema.

Per obtenir els cicles d'histèresi usem la dinàmica de relaxació local *1-spin-flip* [2] explicada al capítol 2, en la que cada spin s'alinea amb el seu camp local  $f_i$ , és a dir  $S_i = \text{sign}(f_i)$ . El camp local ve donat per

$$f_i = J \sum_{\langle j \rangle} S_j + H + h_i \quad (3.6)$$

on el sumatori s'estén als primers veïns del spin  $S_i$ .

## 3.2 Relaxació a dos passos

Aquests càlculs analítics es poden dur a terme gràcies a les característiques topològiques particulars de les xarxes de Bethe i a una propietat molt útil de les dinàmiques metastables usades. Per explicar aquesta propietat necessitem introduir el que anomenem *relaxació a dos passos*. El procediment per realitzar aquesta relaxació és el següent:

- (i) Clavem un spin qualsevol  $S_i$  del sistema a l'estat inicial, és a dir  $S_i = -1$  per la branca inferior del cicle d'histèresi o  $S_i = +1$  per la branca superior. Una manera fàcil de clavar un spin és alterar artificialment el seu camp aleatori  $h_i^{(nou)} = h_i^{(vell)} \pm \infty$ , provocant que el spin es quedi clavat a  $S_i = \pm 1$ .



- (ii) *Primera relaxació.* Apliquem les regles dinàmiques fins que s'arriba a un estat en que tots els spins estan alineats amb el seu camp local.
- (iii) Desclavem el spin  $S_i$ . Per desclavar-lo hem de fer l'operació inversa  $h_i^{(nou)} = h_i^{(vell)} \mp \infty$ .
- (iv) *Segona relaxació.* Relaxem el spin  $S_i$  alineant-lo amb el seu camp local  $f_i$ .

La propietat interessant d'aquestes dinàmiques metastables és que l'estat final del spin  $S_i$  és el mateix si usem la *relaxació a dos passos* o la relaxació directa habitual que hem explicat al capítol anterior (entenem la relaxació habitual com aquella en la que relaxem directament el sistema sense clavar cap spin).

Aquesta propietat tant rellevant es pot aplicar tant a un únic spin com a un bloc de spins qualsevol. En tots els tractaments analítics que realitzarem sobre xarxes de Bethe considerem aquesta *relaxació a dos passos*, que ens permetrà dividir el càlcul en dues parts.

### 3.3 Quantitats bàsiques pels càlculs

La primera probabilitat que necessitem calcular és  $P(S_i|n)(H)$  que ens dona la probabilitat que un spin estigui en l'estat  $S_i$  quan apliquem camp extern  $H$  donat que aquest spin té un cert ambient de primers veïns. L'ambient d'un spin està completament determinat per la variable  $n$  ( $0 \leq n \leq z$ ) que ens dona el número de primers veïns que estan en l'estat  $+1$ . Llavors com que  $J \sum_{\langle j \rangle} S_j = J(2n - z)$  podem calcular

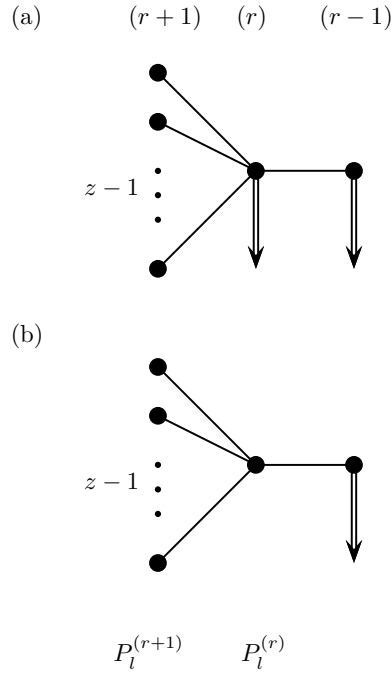
$$p_n(H) \equiv P(S_i = +1|n)(H) = \int_{-J(2n-z)-H}^{+\infty} dh_i f(h_i) = \frac{1}{2} \operatorname{erfc} \left( \frac{-J(2n-z) - H}{\sqrt{2}\sigma} \right), \quad (3.7)$$

i es compleix que  $P(S_i = -1|n)(H) = 1 - P(S_i = +1|n)(H)$ .

Per calcular la segona probabilitat ens centrem amb la branca inferior del cicle d'histèresi. Definim  $P_l^{(r)}(H)$  com la probabilitat de que un spin de la capa ( $r$ ) de la xarxa de Bethe estigui en l'estat  $+1$  després de relaxar el sistema amb un camp extern  $H$ , donat que aquest spin de la capa ( $r$ ) té un veí de la capa ( $r-1$ ) clavat avall. Les propietats topològiques de la xarxa de Bethe i la *relaxació a dos passos* ens permeten calcular la probabilitat  $P_l^{(r)}(H)$  d'un spin de la capa ( $r$ ) en funció de la probabilitat  $P_l^{(r+1)}(H)$  d'un spin d'una capa més exterior ( $r+1$ ). Per fer-ho hem de considerar el següent (veure figura 3.1):

- (i) *Primera relaxació,* clavem els spins de les capes ( $r$ ) i ( $r-1$ ) i relaxem la resta de spins de la branca (*primera relaxació*). Després d'aquesta relaxació els spins de la branca ( $r+1$ ) estaran en l'estat  $+1$  amb una probabilitat  $P_l^{(r+1)}(H)$ .

- (ii) Desclavem el spin de la capa ( $r$ ) i deixem que tingui lloc la *segona relaxació*. Llavors per calcular la probabilitat de que l'estat final d'aquest spin sigui  $+1$  hem de considerar tots els camins que ens hi porten. S'ha de considerar la probabilitat de cada ambient, que podem calcular a partir de  $P_l^{(r+1)}(H)$ , i la probabilitat de que el spin de la capa ( $r$ ) acabi en l'estat  $+1$ , *donat* l'ambient. Aquesta última probabilitat condicional, que està relacionada amb la segona relaxació, es calcula amb les integrals  $p_n(H)$ .



**Figura 3.1:** Representació esquemàtica del càlcul de la probabilitat  $P_l^{(r)}(H)$  en funció de la probabilitats  $P_l^{(r+1)}(H)$ . Representem esquemàticament una petita part d'una branca d'una xarxa de Bethe de connectivitat  $z$ . Les branques es comporten de forma independent si tenim un spin clavat avall que les separa.

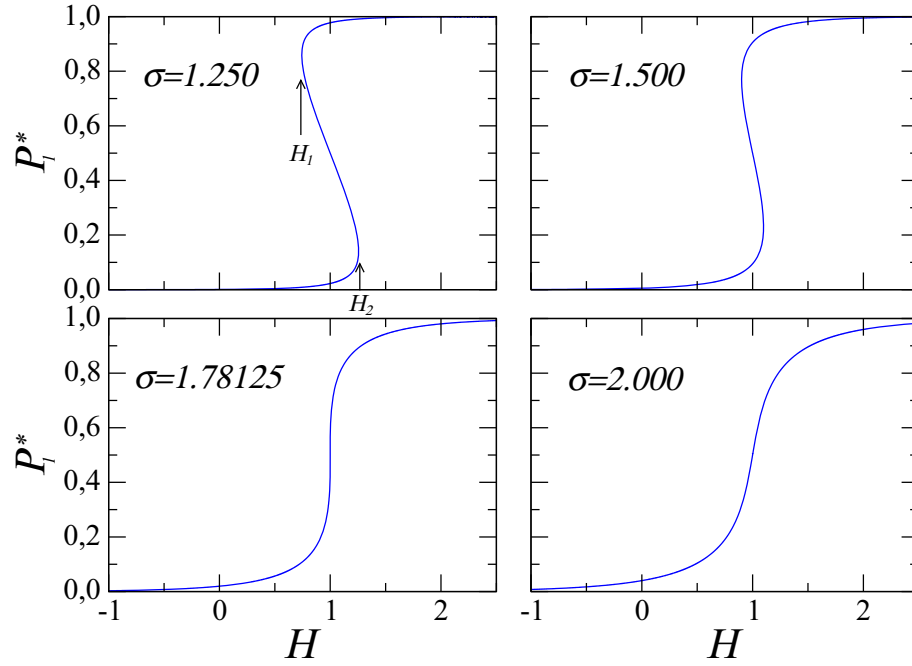
obtenint:

$$P_l^{(r)}(H) = \sum_{n=0}^{z-1} \binom{z-1}{n} [P_l^{(r+1)}(H)]^n [1 - P_l^{(r+1)}(H)]^{z-1-n} p_n(H). \quad (3.8)$$

A l'interior de l'arbre de Cayley en el límit termodinàmic (xarxa de Bethe) tots els nivells són completament equivalents i la probabilitat  $P_l^{(r)}(H) = P_l^*(H) \quad \forall r$ . Llavors la relació de recurrència anterior es converteix en

$$P_l^*(H) = \sum_{n=0}^{z-1} \binom{z-1}{n} [P_l^*(H)]^n [1 - P_l^*(H)]^{z-1-n} p_n(H), \quad (3.9)$$

que és una equació tancada que ens permet trobar els valors de  $P_l^*(H)$ . Per certs valors dels paràmetres  $z$ ,  $\sigma$  i  $H$  aquesta equació presenta varies solucions tal i com



**Figura 3.2:** Representem  $P_l^*(H)$  pel cas  $z = 4$  i diferents valors de desordre  $\sigma$ . Observem que per  $\sigma < 1.78125$  existeix una regió de camp extern  $H \in [H_1, H_2]$  pel qual tenim tres solucions possibles.

es pot veure a la figura 3.2 pel cas  $z = 4$ . Així doncs, la segona quantitat que necessitem per desenvolupar tots els càlculs a la branca inferior del cicle d'histèresi és  $P_l^*(H)$ . Aquesta és la probabilitat de que un spin estigui en l'estat  $+1$  després de relaxar el sistema amb un camp extern  $H$ , donat que aquest spin té un veí clavat avall (estat inicial de tots els spins per la branca inferior del cicle d'histèresi).

Escrivim certes propietats d'aquestes probabilitats que s'utilitzaran més endavant. A partir de la definició de  $p_n(H)$  (equació (3.7)) es pot trobar fàcilment la relació

$$p_n(2J - H) = 1 - p_{z-1-n}(H). \quad (3.10)$$

Aquesta última s'utilitza per demostrar la següent propietat de  $P_l^*(H)$ :

$$P_l^*(2J - H) = 1 - P_l^*(H). \quad (3.11)$$

### 3.4 Imantació

En aquesta secció calcularem la corba  $m(H)$  per la branca inferior del cicle d'histèresi. Ens centrem únicament en la branca inferior ja que els resultats per la branca superior estan relacionats amb els resultats de la branca inferior a partir de les simetries de l'Hamiltonià. Aquests càlculs per les xarxes de Bethe amb connectivitat  $z$  ja es van dur a terme l'any 1997 per Dhar et al, però per completesa els incorporem en aquest capítol.

Si promitgem sobre realitzacions de desordre i considerem que estem en el límit termodinàmic ( $N \rightarrow \infty$ ) podem expressar la imantació com

$$\frac{\langle M \rangle}{N} = \langle S_i \rangle \equiv m \quad (3.12)$$

Si expressem el promig de la variable de spin en funció de la probabilitat  $P(S_i)$  que un spin estigui en l'estat  $S_i$  tenim que:

$$\langle S_i \rangle = \sum_{\{S_i\}} S_i P(S_i) \quad (3.13)$$

Utilitzem la propietat de *relaxació a dos passos*, fem la primera relaxació clavant un spin qualsevol  $S_i$  i relaxem la resta del sistema. La probabilitat que un dels veïns de  $S_i$  estigui en l'estat  $+1$ , un cop s'ha acabat la primera relaxació, és  $P_l^*(H)$ . Així doncs podem calcular la probabilitat de l'ambient del spin  $S_i$  un cop s'ha acabat la primera relaxació. L'ambient del spin queda definit per  $n$ , que és el número de veïns en l'estat  $+1$  (veure figura 3.3(a)). Per tant tenint en compte totes les combinacions possibles obtenim la probabilitat de cada ambient, que és

$$P(n) = \binom{z}{n} [P_l^*(H)]^n [1 - P_l^*(H)]^{z-n}. \quad (3.14)$$

Desclavem el spin que hem clavat i permetem que tingui lloc la segona relaxació. Ens interessa calcular la probabilitat de que aquest spin relaxi a un estat qualsevol, *donat* l'ambient que té. Tal i com s'ha vist a la secció anterior aquesta probabilitat és  $P(S_i|n)(H)$  (per simplificar la notació no escrivim explícitament la dependència amb el camp extern).

En aquest punt del càlcul ja tenim tots els ingredients per calcular la probabilitat de que un spin estigui en un estat qualsevol

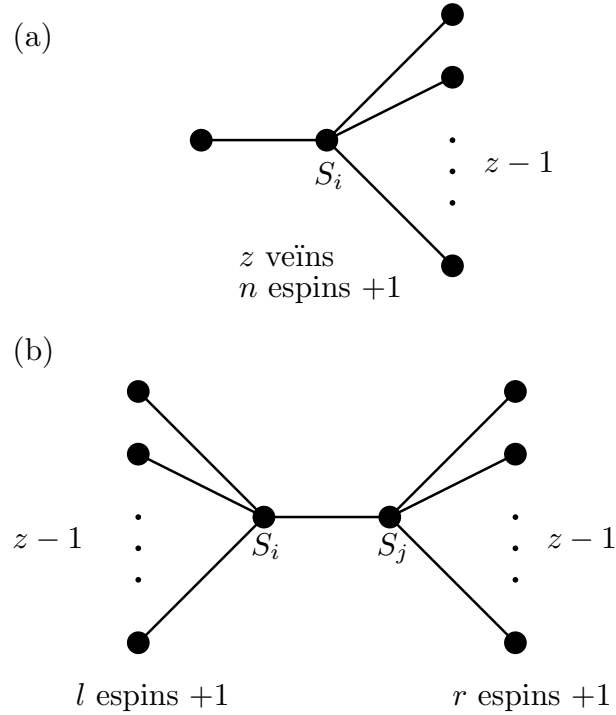
$$P(S_i) = \sum_{n=0}^z P(n) P(S_i|n). \quad (3.15)$$

Com que s'ha de complir que  $\sum_{\{S_i\}} P(S_i) = 1$ , només ens preocupem de calcular  $P(+1)$ , que és

$$P(+1) = \sum_{n=0}^z \binom{z}{n} [P_l^*(H)]^n [1 - P_l^*(H)]^{z-n} p_n(H), \quad (3.16)$$

i finalment podem relacionar fàcilment la imantació amb aquesta probabilitat utilitzant les equacions (3.12) i (3.13), obtenint

$$m = 2P(+1) - 1. \quad (3.17)$$



**Figura 3.3:** Representació esquemàtica de l'ambient de (a) un spin simple i (b) d'una parella de spins. Les variables  $n, l, r$  es refereixen al número de spins que estan en l'estat  $+1$

Tal i com s'explica a la referència [80] es troba una transició de fase fora de l'equilibri induïda per desordre per valors de  $z \geq 4$ . La discontinuïtat de la branca  $m(H)$  apareix perquè la solució de l'equació (3.9) és trivaluada per  $\sigma < \sigma_c(z)$  en un cert rang del camp  $H_1 < H < H_2$ . Aquestes tres arrels de l'equació (3.9) generen una corba en forma de essa (*S-shape*) en el diagrama  $m - H$  tal i com s'observa a la figura 3.4 per  $\sigma < \sigma_c(z)$ .

Per trobar  $\sigma_c(z)$  utilitzem les simetries de  $P_l^*(H)$ . Si avaluem l'equació (3.11) per  $H = J$  obtenim que  $P_l^*(J) = 0.5 \quad \forall z, \sigma$ . Llavors per qualsevol connectivitat  $z$ , la corba  $P_l^*(H)$  passarà pel punt  $(H = J, P_l^* = 0.5)$  per tots els valors de  $\sigma$ . Estem interessats en trobar el valor de  $\sigma$  pel qual desapareixen les tres solucions de  $P_l^*(H)$ , ja que aquest valor serà  $\sigma_c$ . Per fer-ho definim la funció

$$f(P_l^*, H) \equiv P_l^* - \sum_{n=0}^{z-1} \binom{z-1}{n} [P_l^*]^n [1 - P_l^*]^{z-1-n} p_n(H). \quad (3.18)$$

El valor de desordre crític  $\sigma_c(z)$  serà la solució de l'equació

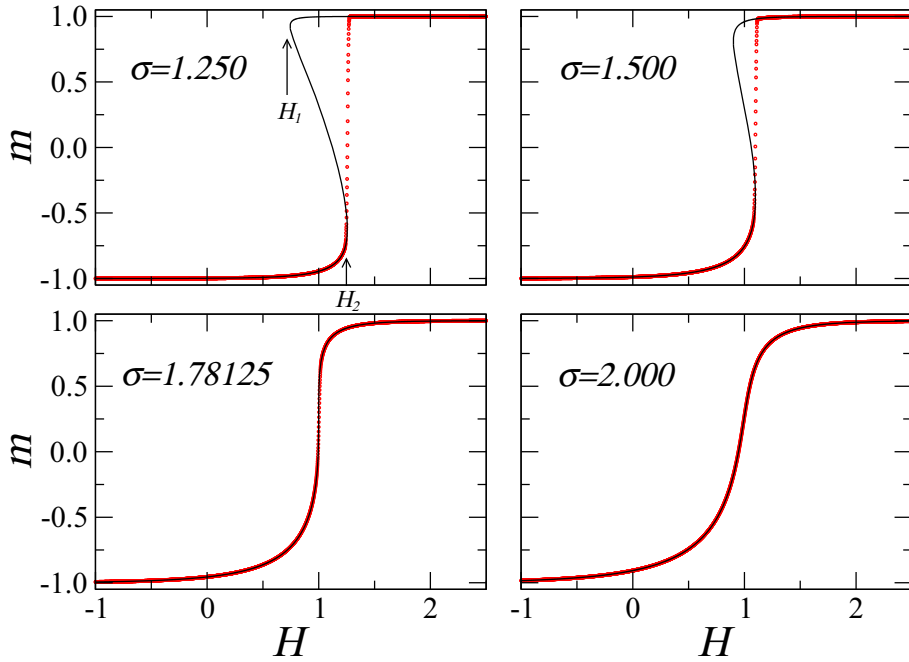
$$\left. \frac{\partial f(P_l^*, H)}{\partial P_l^*} \right|_{\substack{H=J \\ P_l^*=0.5}} = 0. \quad (3.19)$$

Fent la derivada i utilitzant la relació 3.10 s'obté que l'equació a solucionar és:

$$z2^{z-3} = \sum_{n=0}^{z-1} \binom{z-1}{n} n p_n(J) \quad (3.20)$$

Per tant per una certa connectivitat  $z$  tenim que el camp crític és  $H_c = J$  i  $\sigma_c$  s'obté de solucionar l'equació 3.20.

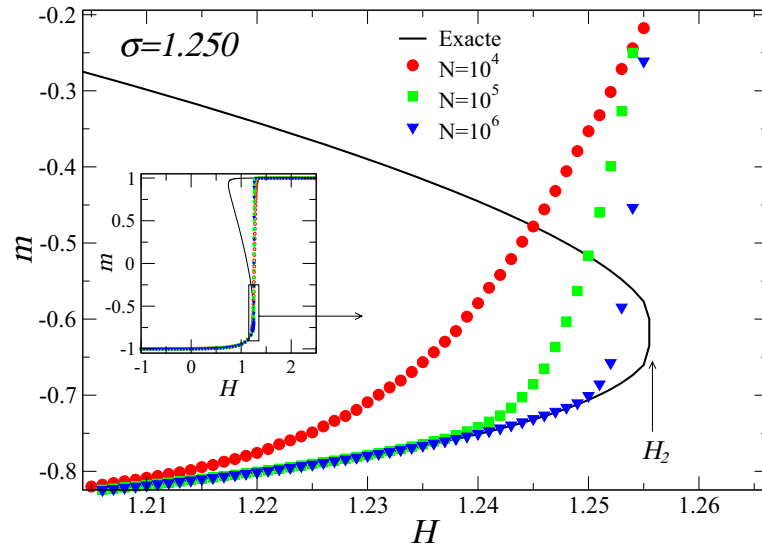
El cas amb número de coordinació  $z = 4$  és el cas més senzill que presenta una transició de fase induïda per desordre. En aquesta transició passem de cicles sense discontinuïtat per  $\sigma > \sigma_c = 1.78125J$  a cicles que presenten una discontinuïtat per  $\sigma < \sigma_c$ . Els resultats analítics que presentem en aquest capítol els obtenim solucionant numèricament les equacions corresponents pel cas  $z = 4$ ,  $J = 1$  i diferents valors de desordre. Les arrels reals de l'equació 3.9 es troben amb el mètode de la bisecció restringit a l'interval  $0 \leq P_l^*(H) \leq 1$ .



**Figura 3.4:** Branques inferiors dels cicles d'histèresi per una xarxa de Bethe amb  $z = 4$  i diferents valors de desordre. Comparem els resultats exactes (línies contínues) amb resultats de les simulacions (punts). Les simulacions corresponen grafs aleatoris clàssics amb  $N = 10^5$  i promitjos sobre 1000 realitzacions diferents de desordre.

A la figura 3.4 es representen les branques inferiors del cicle d'histèresi per diferents valors de  $\sigma$  pel cas  $z = 4$  i  $J = 1$ . En aquesta figura es comparen els resultats analítics amb els resultats de les simulacions numèriques. A les simulacions numèriques només obtenim la branca inferior de la corba  $m(H)$  quan incrementem el camp extern des de  $H = -\infty$  a  $H = +\infty$ . Per tant les simulacions numèriques només coincideixen amb una única solució de l'equació (3.9), la que

té sentit físic, i presenta la transició a  $H_2$  on la solució de la branca inferior desapareix. En principi no hi ha una explicació física clara pel fet que el sistema salti a  $H_2$ , *a priori* el salt podria tenir lloc per qualsevol valor del camp entre  $H_1 - H_2$  i seria interessant trobar un criteri d'estabilitat que ens permetés predir la posició del salt. També s'ha especulat sobre la possibilitat que aquesta *S-shape* estigui relacionada amb la frontera de la distribució dels estats metastables de la dinàmica *1-spin-flip* [101].



**Figura 3.5:** Exemples d'efectes de mida finita per la branca inferior dels cicles d'histeresi. Els símbols corresponen a simulacions fetes sobre grafs aleatoris clàssics amb diferents mides tal i com està indicat a la llegenda. Les línies contínues corresponen a les solucions exactes.

També és important adonar-se que el resultat de les simulacions depèn fortament de la mida del sistema, tal i com mostra la figura 3.5. Els resultats de les simulacions només coincidiran amb el resultat analític de la branca inferior en el límit termodinàmic ( $N \rightarrow \infty$ ). L'anàlisi de l'efecte de la mida finita no s'ha realitzat i està previst d'estudiar-lo en un futur. Per analitzar-lo s'hauria de fer un escalat amb la mida finita de la xarxa  $N$ .

### 3.5 Energia interna

En aquest apartat ens disposem a trobar l'expressió analítica de l'energia interna  $\mathcal{U}$ . Aquesta és pot separar en dos termes  $\mathcal{U} = \mathcal{U}_e + \mathcal{U}_d$ , on el primer terme té en compte l'energia deguda a l'intercanvi ferromagnètic entre els spins i està definida a l'equació (3.3) i el segon té en compte l'energia deguda a l'acoblament dels spins amb el camp aleatori, i està definida a l'equació (3.4)

### 3.5.1 Energia d'intercanvi

Promitjant sobre realitzacions de desordre el terme de l'energia d'intercanvi, obtenim que es pot expressar com

$$\frac{\langle \mathcal{U}_e \rangle}{N} = -\frac{1}{2}zJ \langle S_i S_j \rangle. \quad (3.21)$$

L'hem expressat en funció del promig sobre desordre de la correlació entre dos primers veïns  $\langle S_i S_j \rangle$ . Per arribar a aquest resultat hem considerat el sistema en el límit termodinàmic ( $N \rightarrow \infty$ ) on tots els spins són completament equivalents i el promig  $\langle S_i S_j \rangle$  val el mateix per qualsevol parella de primers veïns.

Expressem aquest promig en termes de la probabilitat  $P(S_i, S_j)$  que una parella de primers veïns es trobi a l'estat  $(S_i, S_j)$

$$\langle S_i S_j \rangle = \sum_{\{S_i, S_j\}} S_i S_j P(S_i, S_j) \quad (3.22)$$

Lògicament aquesta probabilitat  $P(S_i, S_j)$  ha de complir que  $\sum_{\{S_i, S_j\}} P(S_i, S_j) = 1$ . Per calcular aquestes probabilitats usem la propietat de la *relaxació a dos passos*. Clavem la parella  $(S_i, S_j)$  i deixem relaxar la resta del sistema. La probabilitat que un dels veïns de  $S_i$  (o  $S_j$ ) estigui en l'estat  $+1$  un cop s'ha acabat la primera relaxació és  $P_l^*(H)$ . Podem calcular la probabilitat de que la parella  $(S_i, S_j)$  tingui un ambient qualsevol després d'haver fet la primera relaxació. Un ambient queda definit pel número de veïns en l'estat  $+1$  del spin  $S_i$  sense tenir en compte el spin  $S_j$  i pel número de veïns en l'estat  $+1$  del spin  $S_j$  sense tenir en compte el spin  $S_i$ . Aquestes quantitats les anomenem  $l$  i  $r$  respectivament i com ja hem dit determinen completament l'ambient de la parella  $\langle ij \rangle$  tal com es pot veure a la figura 3.3(b). Llavors tenint en compte totes les combinacions possibles podem calcular la probabilitat de que una parella tingui un ambient  $(l, r)$ . Aquesta probabilitat la podem expressar com

$$P(l, r) = \binom{z-1}{l} [P_l^*(H)]^l [1 - P_l^*(H)]^{z-1-l} \binom{z-1}{r} [P_r^*(H)]^r [1 - P_r^*(H)]^{z-1-r}, \quad (3.23)$$

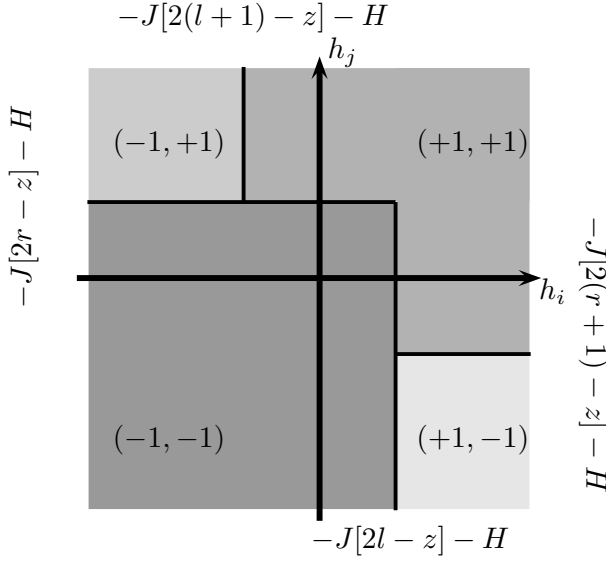
i podem entendre-la com una generalització de la probabilitat  $P(n)$ .

Ara necessitem calcular la probabilitat de que la parella  $(S_i, S_j)$  acabi en un estat qualsevol després de la segona relaxació, és a dir desclavant la parella i deixant-la relaxar, *donat* l'ambient a que hem arribat després de la primera relaxació. Aquesta probabilitat la podem calcular amb integrals dobles de les distribucions dels camps aleatoris en un cert domini del pla  $h_i - h_j$ , i l'expressem com

$$P(S_i, S_j | l, r) = \int \int_D f(h_i) f(h_j) dh_i dh_j. \quad (3.24)$$

Els dominis d'integració  $D$  es troben estudiant l'estat estable de la parella  $\langle ij \rangle$  segons el valor del camp local de cada spin que la forma, tal i com es pot veure a la figura 3.6.





**Figura 3.6:** El pla  $(h_i, h_j)$  dividit en diferents àrees (diferents colors) que corresponen a l'estat final dels spins  $(S_i, S_j)$  per un ambient fixat  $l, r$ . Aquestes àrees corresponen als dominis d'integració  $D$  a l'equació (3.24)

Aquestes integrals són separables i les podem expressar en termes de les probabilitats de l'equació (3.7). Les expressions que obtenim són les següents:

$$P(-1, -1|l, r) = (1 - p_l)(1 - p_r) \quad (3.25)$$

$$P(+1, -1|l, r) = p_l(1 - p_{r+1}) \quad (3.26)$$

$$P(-1, +1|l, r) = (1 - p_{l+1})p_r \quad (3.27)$$

$$P(+1, +1|l, r) = P_{l+1}p_r + p_l(p_{r+1} - p_r). \quad (3.28)$$

Ara ja estem en disposició de calcular la probabilitat de que una parella de primers veïns estigui en un estat qualsevol a partir de les equacions (3.24) i (3.23), i obtenim

$$P(S_i, S_j) = \sum_{l=0}^{z-1} \sum_{r=0}^{z-1} P(l, r) P(S_i, S_j|l, r). \quad (3.29)$$

Introduint l'expressió anterior (3.29) a l'equació (3.22) obtenim

$$\langle S_i S_j \rangle = \sum_{l=0}^{z-1} \sum_{r=0}^{z-1} P(l, r) \sum_{\{S_i, S_j\}} P(S_i, S_j|lr). \quad (3.30)$$

Sumem sobre els possibles estats de les variables de spin i usem les equacions (3.25)-(3.28) per arribar a l'expressió

$$\langle S_i S_j \rangle = \sum_{l=0}^{z-1} \sum_{r=0}^{z-1} P(l, r) [2p_{l+1}p_r + 2p_l p_{r+1} + 1 - 2p_r - 2p_l]. \quad (3.31)$$

En aquest estadi del càlcul, és convenient definir

$$Q_l^*(H) \equiv \sum_{n=0}^{z-1} \binom{z-1}{n} [P_l^*(H)]^n [1 - P_l^*(H)]^{z-1-n} p_{n+1}, \quad (3.32)$$

que ens dóna la probabilitat que (al llarg de la branca inferior del cicle) un spin estigui a l'estat  $+1$ , *donat que* hem relaxat el sistema amb un veí d'aquest spin clavat amunt.

Utilitzant l'identitat

$$\sum_{n=0}^{z-1} \binom{z-1}{n} [P_l^*(H)]^n [1 - P_l^*(H)]^{z-1-n} = 1, \quad (3.33)$$

i tenint en compte la definició de  $P_l^*(H)$  de l'equació (3.9), arribem a l'expressió

$$\langle S_i S_j \rangle = 1 - 4P_l^*(H) + 4P_l^*(H)Q_l^*(H). \quad (3.34)$$

Aquesta expressió <sup>1</sup> encara es pot simplificar més considerant el següent:

- A partir de la definició de  $Q_l^*(H)$  (3.32) fent una redefinició dels índexs ( $\tilde{n} = n + 1$ ) és fàcil obtenir

$$P_l^*(H)Q_l^*(H) = \sum_{n=0}^z \binom{z}{n} [P_l^*(H)]^n [1 - P_l^*(H)]^{z-n} \cdot \frac{n}{z} p_n \quad (3.35)$$

- Si derivem respecte  $P_l^*(H)$  els dos termes de l'identitat

$$\sum_{n=0}^z \binom{z}{n} [P_l^*(H)]^n [1 - P_l^*(H)]^{z-n} = 1 \quad (3.36)$$

i fem una mica d'àlgebra, arribem a l'expressió

$$P_l^*(H) = \sum_{n=0}^z \binom{z}{n} [P_l^*(H)]^n [1 - P_l^*(H)]^{z-n} \frac{n}{z} \quad (3.37)$$

Introduïm les equacions (3.35) i (3.37) a l'expressió (3.34), i considerant l'expressió de l'energia d'intercanvi en funció de la correlació de dos primers veïns (3.21) obtenim

$$\frac{\langle \mathcal{U}_e \rangle}{N} = -\frac{1}{2} z J + \sum_{n=0}^z \binom{z}{n} [P_l^*(H)]^n [1 - P_l^*(H)]^{z-n} 2Jn(1 - p_n). \quad (3.38)$$

---

<sup>1</sup>Es pot trobar seguint un altre procediment molt més directe, que consisteix en expressar les probabilitats  $P(S_i, S_j)$  en funció de  $P_l^*(H)$  i  $Q_l^*(H)$

$$P(-1, -1) = (1 - P_l^*(H))^2$$

$$P(+1, -1) = P(-1, +1) = P_l^*(H)(1 - Q_l^*(H))$$

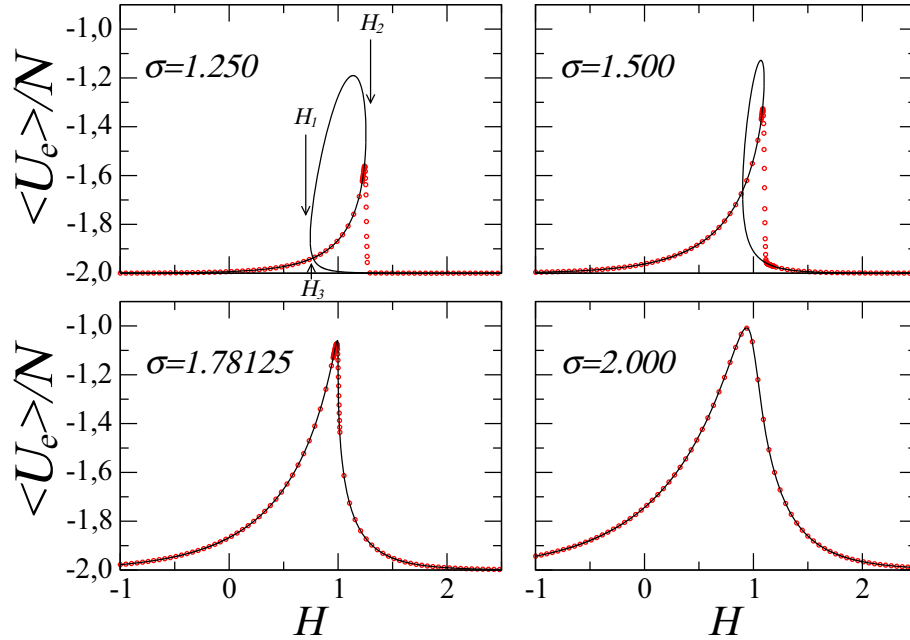
$$P(+1, +1) = P_l^*(H)Q_l^*(H) + P_l^*(H)(Q_l^*(H) - P_l^*(H)),$$

i si les introduïm a l'equació (3.22), obtenim

$$\langle S_i S_j \rangle = P(+1, +1) + P(-1, -1) - P(-1, +1) - P(+1, -1) = 1 - 4P_l^*(H) + 4P_l^*(H)Q_l^*(H)$$

Aquesta equació mostra que l'energia d'intercanvi es pot calcular com l'energia corresponent a l'estat de saturació negativa més un excés d'energia  $2J$  associat a cada enllaç trencat.

A la figura 3.7 es representa el comportament de l'energia interna d'intercanvi en funció del camp extern per diferents quantitats de desordre. També es compara l'expressió analítica amb els resultats de les simulacions. Les tres arrels de l'equació (3.9) generen una funció que presenta un laç per sota  $\sigma_c$ . Les simulacions segueixen contínuament una de les solucions fins a  $H_2$ , on salten a la branca inferior de l'energia d'intercanvi. També observem que hi ha un camp intermedi  $H_3$ , punt de creuament del laç, on dues de les arrels corresponen al mateix valor de  $\mathcal{U}_e$ .



**Figura 3.7:** Comportament de l'energia d'intercanvi pels mateixos casos que es mostren a la figura 3.4. Les línies corresponen a la solució numèrica de les equacions exactes i els símbols corresponent a resultats obtinguts amb simulacions sobre grafs aleatoris clàssics.

### 3.5.2 Energia d'acoblament amb el desordre

Igual que en els apartats anteriors si fem el promig sobre desordre i el límit termodinàmic al terme energètic d'acoblament amb el desordre obtenim

$$\frac{\langle \mathcal{U}_d \rangle}{N} = - \langle h_i S_i \rangle. \quad (3.39)$$

Si ho expressem en funció de la probabilitat  $P(h_i, S_i)$  de que un lloc de la xarxa tingui un camp aleatori entre  $[h_i, h_i + dh_i]$  i de que la variable de spin corresponent

al mateix lloc de la xarxa estigui en l'estat  $S_i$ , obtenim

$$\langle h_i S_i \rangle = \sum_{\{S_i\}} \int_{-\infty}^{+\infty} dh_i P(h_i, S_i) h_i S_i. \quad (3.40)$$

Anàlogament al cas de la imantació usem la *relaxació a dos passos*. A l'equació (3.14) tenim calculada la probabilitat  $P(n)$  d'acabar en un ambient determinat després de finalitzar la primera relaxació. Per tant podem escriure que

$$P(h_i, S_i) = \sum_{n=0}^z P(n) P(h_i, S_i | n), \quad (3.41)$$

on  $P(h_i, S_i | n)$  és la probabilitat de que un spin tingui un camp aleatori entre  $[h_i, h_i + dh_i]$  i estigui en l'estat  $S_i$  donat que té un ambient amb  $n$  veïns en l'estat  $+1$ . Usant les regles dinàmiques podem arribar a les següents expressions:

$$P(h_i, +1 | n) = \begin{cases} 0 & h_i < -J(2n - z) - H \\ f(h_i) & h_i > -J(2n - z) - H \end{cases} \quad (3.42)$$

$$P(h_i, -1 | n) = \begin{cases} f(h_i) & h_i < -J(2n - z) - H \\ 0 & h_i > -J(2n - z) - H \end{cases} \quad (3.43)$$

on  $f(h_i)$  és la densitat de probabilitat Gaussiana definida per l'equació (3.5).

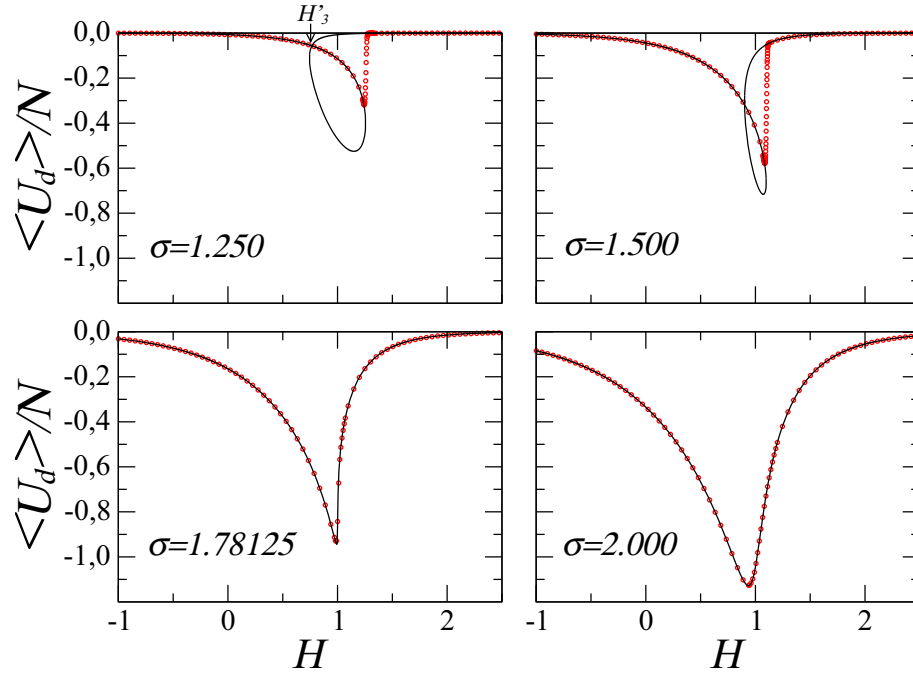
Si introduïm l'equació (3.41) dins l'equació (3.40), fem la suma sobre  $\{S_i\}$  i utilitzem les expressions de les equacions (3.42) i (3.43) obtenim

$$\langle h_i S_i \rangle = \sum_{n=0}^z P(n) \left\{ \int_{-J(2n-z)-H}^{+\infty} dh_i h_i f(h_i) - \int_{-\infty}^{-J(2n-z)-H} dh_i h_i f(h_i) \right\} \quad (3.44)$$

Si fem les integrals i expressem explícitament la probabilitat  $P(n)$  arribem a l'expressió analítica del terme de l'energia interna associada a l'acoblament del sistema amb el desordre

$$\frac{\langle \mathcal{U}_d \rangle}{N} = - \sum_{n=0}^z \binom{z}{n} [P_l^*(H)]^n [1 - P_l^*(H)]^{z-n} \frac{2\sigma}{\sqrt{2\pi}} \exp \left[ - \frac{(-J(2n - z) - H)^2}{2\sigma^2} \right]. \quad (3.45)$$

A la figura 3.8 es pot veure el comportament d'aquest terme energètic en funció del camp extern per diferents quantitats de desordre. A la figura es compara el resultat analític obtingut de solucionar numèricament l'equació anterior amb els resultats de les simulacions fetes sobre grafs aleatoris clàssics. També obtenim una funció amb forma de llaç. Observem que els punts de creuament  $H'_3$  (per  $\sigma < \sigma_c$ ) són diferents de  $H_3$  de la funció  $\mathcal{U}_e$ . A mesura que  $\sigma$  tendeix a  $\sigma_c$ , els camps  $H_1$ ,  $H_2$ ,  $H_3$ ,  $H'_3$  tendeixen al valor crític  $H_c = 1$ .



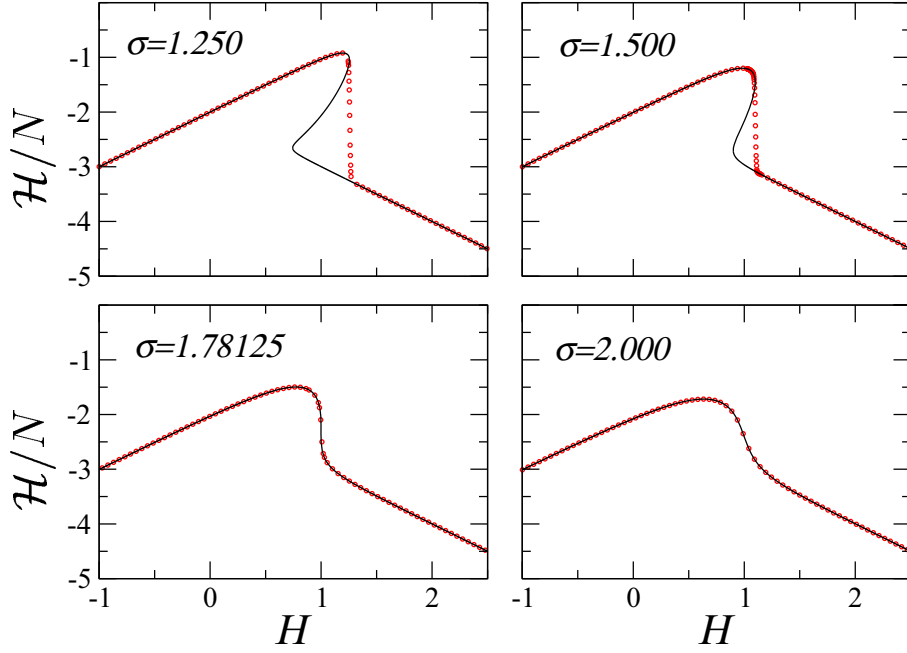
**Figura 3.8:** Energia d'acoblament amb el desordre pels mateixos casos que es mostren a la figura 3.4. Les línies corresponen a la solució numèrica de les equacions exactes i els punts corresponen a resultats obtinguts amb simulacions sobre grafs aleatoris clàssics.

## 3.6 Hamiltonià

Ja hem calculat totes les quantitats que necessitem per donar una expressió exacte de l'energia del sistema promitjada sobre desordre. Si usem les expressions de les equacions (3.17), (3.38) i (3.45) per  $m$ ,  $\langle U_e \rangle / N$  i  $\langle U_d \rangle / N$  respectivament, trobem l'expressió analítica de l'Hamiltonià (entalpia magnètica), que és

$$\frac{\mathcal{H}}{N} = \sum_{n=0}^z \binom{z}{n} [P_l^*(H)]^n [1 - P_l^*(H)]^{z-n} \left\{ -\frac{1}{2} z J + 2Jn(1 - p_n) - \frac{2\sigma}{\sqrt{2\pi}} \exp \left[ -\frac{(-J(2n - z) - H)^2}{2\sigma^2} \right] - H(2p_n - 1) \right\}. \quad (3.46)$$

A la figura 3.9 representem el comportament de l'Hamiltonià per diferents valors de desordre. Els resultats analítics es comparen amb els resultats obtinguts a partir de les simulacions sobre grafs aleatoris clàssics. Els dibuixos mostren que a la regió trivaluada les simulacions numèriques escullen la branca amb màxim  $\mathcal{H}$ , el qual és clarament un camí fora de l'equilibri.



**Figura 3.9:** Comportament de l'Hamiltonià  $\mathcal{H}$  en funció del camp extern  $H$ . Es mostren els mateixos quatre casos que a les figures prèvies. La solució numèrica de les equacions exactes es mostra com una línia contínua, i el resultat de les simulacions sobre grafs aleatoris clàssics es mostren amb punts.

### 3.7 Energia dissipada

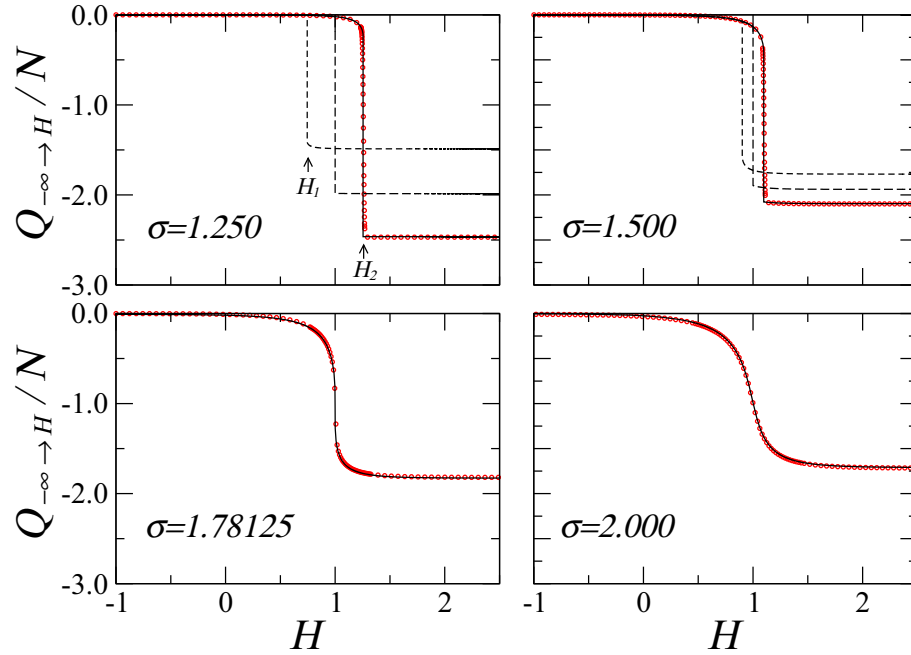
El fet de tenir calculats separatament els termes  $m$ ,  $\langle U_e \rangle$  i  $\langle U_d \rangle$  en funció del camp extern  $H$  ens permet calcular l'energia dissipada pel sistema  $Q$ . Aquesta es pot calcular fent l'integral a la trajectòria fora de l'equilibri [102],

$$Q = \Delta\mathcal{U} - \int H dM \quad (3.47)$$

on  $\Delta\mathcal{U} = \Delta\mathcal{U}_e + \Delta\mathcal{U}_d$  és la diferència d'energies entre l'estat final i inicial. Si comencem a  $H = -\infty$  l'integral de camí sobre la trajectòria calculada a les seccions anteriors es pot escriure de la forma

$$\frac{Q(-\infty \rightarrow H')}{N} = \frac{\mathcal{U}(H')}{N} + \frac{1}{2}zJ - \int_{-\infty}^{H'} H dm. \quad (3.48)$$

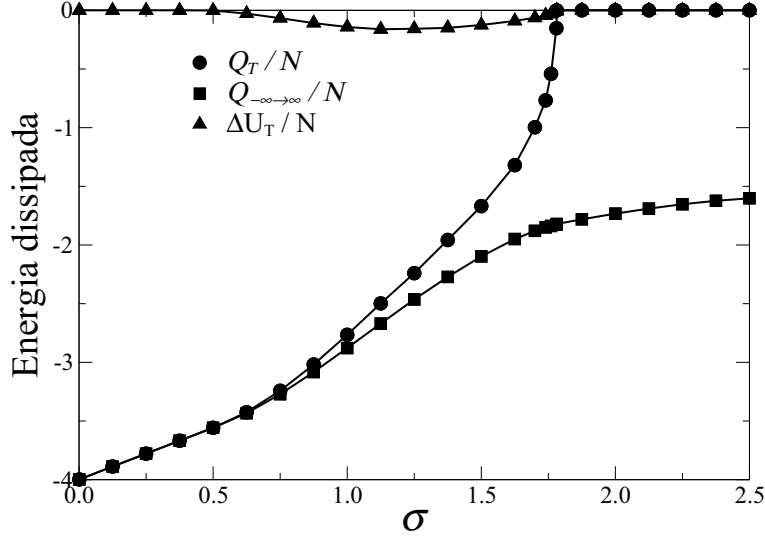
La figura 3.10 mostra els resultats obtinguts usant l'expressió anterior pel cas  $z = 4$  i per diferents valors de  $\sigma$ . Per  $\sigma < \sigma_c$  s'ha calculat l'energia dissipada per tres trajectòries diferents (indicades amb línies discontinües i contínues), totes elles compatibles amb la solució teòrica de  $m(H)$ ,  $\langle \mathcal{U} \rangle_e(H)$  i  $\langle \mathcal{U} \rangle_d(H)$ . La primera assumeix que el salt a la branca superior, és a dir la transició, té lloc a  $H = H_1$ , la segona a un valor intermedi del camp extern  $H = (H_1 + H_2)/2$  i la tercera a



**Figura 3.10:** Energia dissipada en el camí metastable  $-\infty \rightarrow H$ , calculat a partir de l'equació. Per  $\sigma < \sigma_c$  comparem tres possibles trajectòries en les que canvia el camp on es produeix la transició. Els punts mostren el resultat de les simulacions fetes en grafs aleatoris clàssics.

$H = H_2$ . D'aquestes trajectòries, la que pateix la transició a  $H_2$  és en la que es dissipa més energia ( $Q$  més negativa) i la que escull el sistema en les simulacions numèriques.

A la figura 3.11 comparem l'energia total dissipada en tota la trajectòria  $Q_{-\infty \rightarrow \infty}$  amb l'energia que es dissipa en la transició  $Q_T$ . Com que el salt té lloc a camp extern constant  $H = H_2$  tenim que  $Q_T = \Delta\mathcal{H}_T = \Delta\mathcal{U}_T + H_2\Delta M_T$ . Per calcular les quantitats  $\Delta\mathcal{H}_T$ ,  $\Delta\mathcal{U}_T$  i  $\Delta M_T$  hem de considerar l'estat just abans de la transició i l'estat just després de la transició. Encara que  $Q_T$  presenti un comportament similar a un paràmetre d'ordre, és a dir zero per sobre  $\sigma_c$  i diferent de zero per sota, no és proporcional al salt en imantació. El seu càlcul requereix tenir les expressions de tots els termes energètics de l'Hamiltonià. Podem observar que per  $\sigma < \sigma_c$  la dissipació a la transició  $Q_T$  representa una fracció molt rellevant de la dissipació total. També podem comparar  $Q_T$  amb el salt de l'energia interna a la transició  $\Delta U_T$ . S'observa que  $|\Delta U_T| \ll |Q_T|$ , que significa que el salt en la transició és bàsicament un procés dissipatiu.



**Figura 3.11:** Comparació de l'energia dissipada a la transició  $Q_T$  (●) amb l'energia total dissipada en tota la trajectòria  $Q_{-\infty \rightarrow \infty}$  (■) i el canvi d'energia interna a la transició  $\Delta U_T$  (▲).

### 3.8 Trajectòries de tornada de primer ordre

En aquesta secció utilitzarem les expressions obtingudes per Shukla l'any 2001 [82] per obtenir les trajectòries de tornada de primer ordre (FORC's). A partir d'aquestes podrem representar els diagrames FORC's [103] que en general serveixen per posar de manifest propietats importants del comportament histerètic dels models [104].

Suposem que inicialment en l'estat de saturació positiva ( $H = +\infty$ ) i que disminuïm el camp fins a un valor  $H_a$ , tot seguit girem el sentit del camp i l'augmentem fins a un camp  $H_b > H_a$ . Llavors la imantació en aquest punt es pot escriure com

$$m(H_a, H_b) = 2 [p(H_a) + q(H_a, H_b)] - 1, \quad (3.49)$$

on  $p(H_a)$  és la probabilitat que un spin  $S_i$  estigui a +1 pel camp  $H_a$  per la branca superior del cicle i  $q(H_a, H_b)$  és la probabilitat que el spin  $S_i$  estigués en l'estat -1 pel camp  $H_a$  però que hagi girat a l'estat +1 al augmentar el camp fins a  $H_b$ . Per tant la suma  $p(H_a) + q(H_a, H_b)$  ens dóna la probabilitat que el spin  $S_i$  estigui en l'estat +1 quan hem aplicat una història de camp  $(-\infty, H_a, H_b)$

L'expressió de  $p(H_a)$  és anàloga a l'expressió (3.16) i és

$$p(H_a) = \sum_{n=0}^z \binom{z}{n} [P_u^*(H_a)]^n [1 - P_u^*(H_a)]^{z-n} p_n(H_a). \quad (3.50)$$

En aquesta equació hem usat la probabilitat  $P_u^*(H)$ , que és la probabilitat de que un spin estigui en l'estat +1 després de relaxar el sistema amb un camp extern



$H$ , donat que té un veí clavat amunt (que és estat inicial de tots els spins per la branca superior del cicle d'histèresi)<sup>2</sup>. Aquesta probabilitat s'obté solucionant l'equació auto-consistent:

$$P_u^*(H) = \sum_{n=0}^{z-1} \binom{z-1}{n} [P_u^*(H)]^n [1 - P_u^*(H)]^{z-1-n} p_{n+1}(H), \quad (3.51)$$

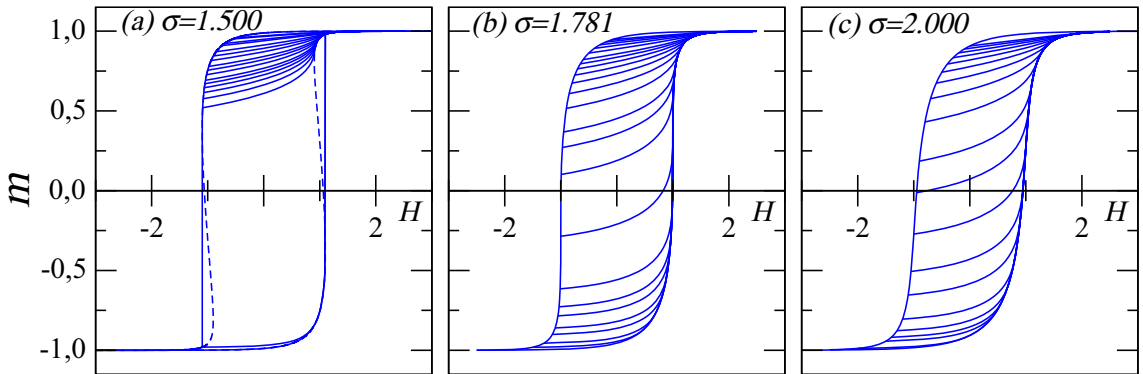
L'expressió per  $q(H_a, H_b)$  és:

$$q(H_a, H_b) = \sum_{n=0}^z \binom{z}{n} [D^*(H_a, H_b)]^n [1 - P_u^*(H_a)]^{z-n} [p_n(H_b) - p_n(H_a)], \quad (3.52)$$

on  $D^*(H_a, H_b)$  és la probabilitat que un veí del spin  $S_i$  estigui en l'estat +1 abans que el propi spin  $S_i$  passi a l'estat +1 quan augmentem el camp des de  $H_a$  fins a  $H_b$ . Aquesta quantitat la calculem solucionant la següent equació auto-consistent

$$D^*(H_a, H_b) = \sum_{n=0}^{z-1} \binom{z-1}{n} [P_u^*(H_a)]^n [1 - P_u^*(H_a)]^{z-n} p_n(H_a) + \sum_{n=0}^{z-1} \binom{z-1}{n} [D^*(H_a, H_b)]^n [1 - P_u^*(H_a)]^{z-n-1} [p_n(H_b) - p_n(H_a)]. \quad (3.53)$$

Ara ja tenim tots els elements per poder calcular les trajectòries de tornada de primer ordre (FORC's). A la figura 3.12 es poden veure representades aquestes corbes en el pla  $H - m$ .



**Figura 3.12:** FORC's per  $z = 4$  i  $J = 1$  per tres valors diferents de desordre.

<sup>2</sup>La probabilitat  $P_u^*(H)$  està definida a la branca superior del cicle d'histèresi i és l'equivalent a la probabilitat  $P_l^*(H)$  que és vàlida per la branca inferior del cicle d'histèresi. Podem definir de forma general les probabilitats  $P_l^*(H)$  i  $P_u^*(H)$  com la probabilitat condicionada que un spin estigui en l'estat +1 quan relaxem el sistema amb un camp aplicat  $H$  donat que, aquest spin té un veí clavat en l'estat inicial. L'estat inicial serà +1 si estem estudiant la branca superior del cicle d'histèresi o serà -1 si estem estudiant la branca inferior del cicle.

A partir de l'expressió analítica de  $m(H_a, H_b)$  podem obtenir els diagrames FORC's . Per fer-ho hem de calcular la segona derivada combinada de la imantació  $m$  al camp  $H_b$  en un FORC obtingut canviant el sentit del camp a  $H_a$  [103]:

$$\rho(H_a, H_b) = -\frac{\partial^2 m(H_a, H_b)}{\partial H_a \partial H_b} \quad (3.54)$$

Els valors de  $\rho$  es representen en un diagrama el qual s'obté després de rotar dels coordenades amb les transformacions:  $H_v = (H_b - H_a)/2$  i  $H_u = (H_a + H_b)/2$ .

Els diagrames FORC's pel cas  $z = 4$  que es mostren a la figura 3.13 han estat computats numèricament avaluant  $\rho(H_a, H_b)$  en passos  $\Delta H_a = \Delta H_b = 0.01J$ . La primera característica a destacar és la presència d'un pic molt ben definit a  $H_u \simeq 0$  i  $H_v \simeq H_{coe} \simeq J$  tal i com es mostra en la figura 3.13(c). Això ens indica que la variació màxima del pendent  $\partial m / \partial H_b$  té lloc al voltant de  $H_a = -H_{coe}$  i  $H_b = H_{coe}$ . La segona característica rellevant és el fet que  $\rho = 0$  quasi per tots els valors  $H_v > J$ . L'única excepció és l'aresta infinitament estreta que entra a aquesta regió per  $\sigma < \sigma_c$ . Aquest fet es deu a que en la xarxa de Bethe, els FORC's es tornen independents de  $H_b$  quan  $H_b - H_a > 2J$ . Tal i com s'explica a la referència [82] en aquest rang les solucions s'ajunten amb el cicle principal. La tercera característica a destacar de la figura 3.13 és la presència d'una "vall" al llarg de la línia  $H_v - H_u \sim J$ . Aquest comportament apareix degut a que el pendent de  $\partial m / \partial H_b$  augmenta quan disminuïm  $H_a$ , i és màxim quan el camp de gir  $H_a$  té un valor proper a  $-H_{coe}$ , i torna a disminuir per camps de gir més negatius ( $H_a < -H_{coe}$ ). Aquesta "vall" és suau per valors grans de  $\sigma$  però es torna més abrupte quan  $\sigma \rightarrow \sigma_c$ . Per sota  $\sigma_c$  es transforma en una discontinuïtat degut a l'aparició de la discontinuïtat en el cicle d'histèresi. Aquest salt en el cicle també explica l'existència de l'aresta infinitament estreta per  $\sigma < \sigma_c$  i  $J < H_v < H_{coe}$ .

### 3.9 Connectivitat infinita

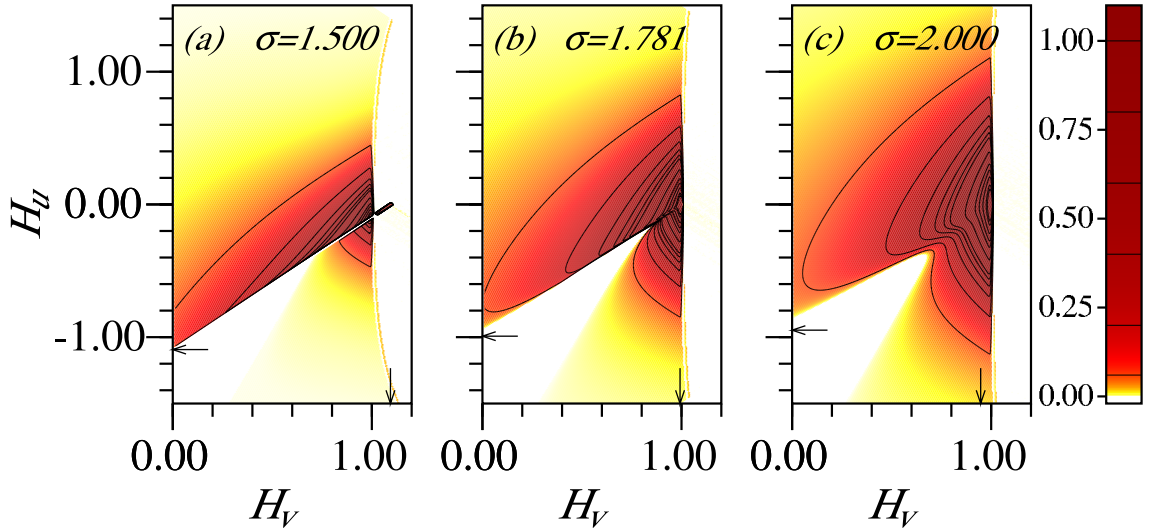
En aquesta secció transformarem lleugerament l'Hamiltonià que hem introduït i solucionat a les seccions anteriors. Aquest Hamiltonià transformat tendeix al model de camp mig (MFM) quan tendim al límit de connectivitat infinita  $z \rightarrow \infty$ .

Les transformacions que duem a terme són les següents: (i) expressem explícitament la dependència amb  $\sigma$  considerant ara que els camps aleatoris  $\{h_i\}$  es distribueixen segons una Gaussiana  $\phi(h_i)$  amb desviació estàndard unitat i valor mig zero. En segon lloc dividim l'Hamiltonià per la connectivitat  $z$ , obtenint l'Hamiltonià transformat següent:

$$\tilde{\mathcal{H}} = -\frac{J}{z} \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - \tilde{\sigma} \sum_{i=0}^N h_i S_i - \tilde{H} \sum_{i=0}^N S_i \quad (3.55)$$

on podem escriure les noves variables en funció de les originals:

$$\tilde{\mathcal{H}} = \frac{\mathcal{H}}{z} \quad , \quad \tilde{\sigma} = \frac{\sigma}{z} \quad , \quad \tilde{H} = \frac{H}{z} \quad (3.56)$$



**Figura 3.13:** Diagrames FORCS per  $z = 4$  i  $J = 1$  pels mateixos valors de desordre de la figura 3.12. Les fletxes indiquen el valor del camp coercitiu  $H_{coe}$  en els dos eixos.

La solució exacte d'aquest Hamiltonià transformat (3.55) l'obtenim aplicant les transformacions (3.56) a les equacions que ens donen la solució pel model original.

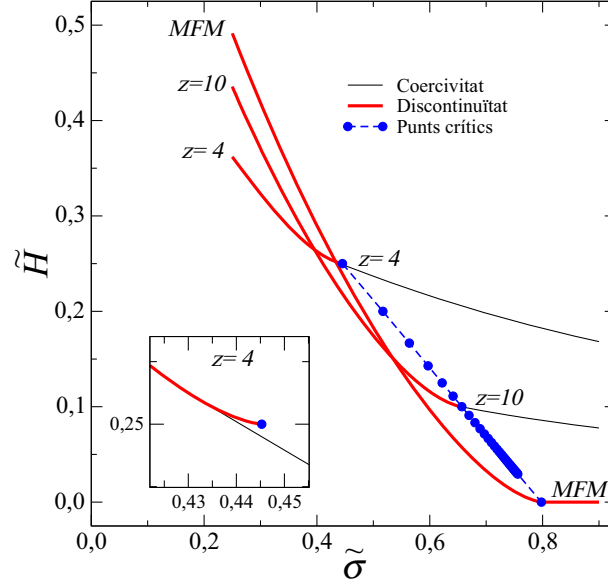
En primer lloc ens centrem en com canvia el diagrama de fases  $\sigma - H$  d'aquest Hamiltonià transformat al augmentar la connectivitat. Els resultats obtinguts els poden observar a la figura 3.14. En aquesta hi representem amb cercles els punts crítics  $(\tilde{\sigma}_c, \tilde{H}_c)$ <sup>3</sup> per  $z = 4, 5, \dots, 35$ . El camp on apareix el salt en la imantació  $\tilde{H}_{dis}$  està representant amb una línia gruixuda, només apareix per  $\tilde{\sigma} \leq \tilde{\sigma}_c$ , i per definició  $\tilde{H}_c = \tilde{H}_{dis}(\sigma_c)$ . També hi representem el camp coercitiu  $\tilde{H}_{coe}$  (camp extern pel qual la imantació val zero) amb una línia més fina. Una característica d'aquests diagrames de fases és que a prop de  $\sigma_c$  el valor del camp coercitiu no coincideix amb el camp on el sistema té la discontinuïtat  $\tilde{H}_{coe} \neq \tilde{H}_{dis}$  tal i com es veu a la figura interior 3.14.

A la figura 3.15 observem com la corba d'imantació  $m(\tilde{H})$  de l'Hamiltonià transformat tendeix a la corba d'imantació del MFM.

A la figura 3.16 observem com l'Hamiltonià en funció del camp extern  $\tilde{\mathcal{H}}(H)$  varia al augmentar el número de coordinació  $z$  i tendeix al resultat del MFM.

També podem demostrar la imantació del model transformat (3.55) tendeix a l'expressió de la imantació del MFM en el límit  $z \rightarrow \infty$ . A partir de les equacions (3.7), (3.16) i (3.17) obtenim una expressió compacte per la imantació del cas no

<sup>3</sup>Aquests punts crítics els obtenim aplicant les transformacions (3.55) als punts crítics de l'Hamiltonià original, en el que  $H_c(z) = J$  i  $\sigma_c(z)$  s'obté de solucionar l'equació 3.20 per cada valor de  $z$ .



**Figura 3.14:** Diagrama de fases del RFIM en xarxes de Bethe per diferents valors del nombre de coordinació  $z$ , comparat amb el comportament de camp mig (MFM). Hem considerat  $J = 1$ , sense perdre generalitat. El dibuix interior mostra els detalls del punt crític pel cas  $z = 4$ .

transformat:

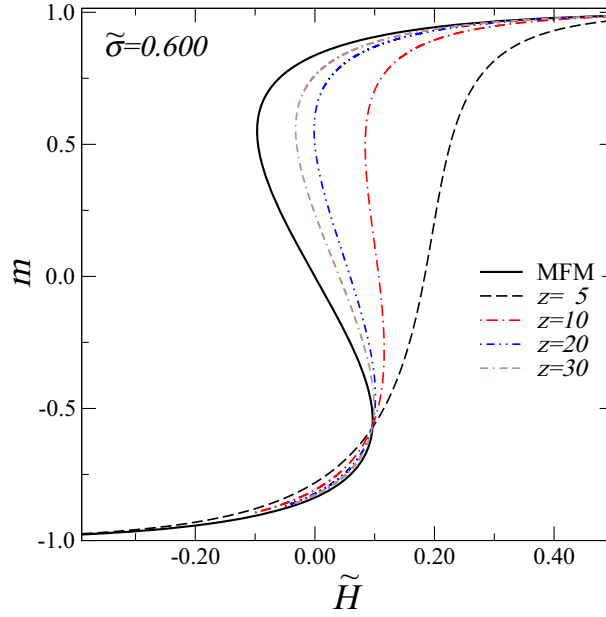
$$m(H) = 2 \sum_{n=0}^z \binom{z}{n} [P_l^*(H)]^n [1 - P_l^*(H)]^{(z-n)} \int_{\frac{-J(2n-z)-H}{\sigma}}^{\infty} \phi(h_i) dh_i - 1 \quad (3.57)$$

en la que hem fet un canvi de variables a la integral per tal que  $\phi(h_i)$  sigui una Gaussiana amb mitjana zero i desviació estàndard unitat. Utilitzant les transformacions (3.56) podem escriure  $H = \tilde{H}z$  i  $\sigma = \tilde{\sigma}z$ , llavors l'expressió de la imantació del cas transformat ens queda com:

$$m(\tilde{H}) = 2 \sum_{n=0}^z \binom{z}{n} [P_l^*(\tilde{H})]^n [1 - P_l^*(\tilde{H})]^{(z-n)} \int_{\frac{-J(2\frac{n}{z}-1)-\tilde{H}}{\tilde{\sigma}}}^{\infty} \phi(h_i) dh_i - 1 \quad (3.58)$$

Volem trobar una expressió per la imantació en el límit de connectivitat infinita  $m_{\infty}(\tilde{H}) \equiv \lim_{z \rightarrow \infty} m(\tilde{H})$ . Per fer aquest límit hem d'estudiar la variable aleatòria  $\frac{n}{z}$  que pren valors quasi continus. Si apliquem el teorema central del límit obtenim que la distribució d'aquesta variable passa d'una binomial a una Gaussiana [105] amb mitjana  $P_l^*(\tilde{H})$  i desviació estàndard  $\sqrt{P_l^*(\tilde{H})[1 - P_l^*(\tilde{H})]}/\sqrt{z}$

$$N \left( P_l^*(\tilde{H}), \sqrt{\frac{P_l^*(\tilde{H})[1 - P_l^*(\tilde{H})]}{z}} \right). \quad (3.59)$$



**Figura 3.15:** Imantació en funció del camp extern pel cas  $\tilde{\sigma}/J = 0.6$  i augmentant els valors de  $z$  tal i com s'indica a la llegenda. Hem considerat  $J = 1$  sense perdre generalitat. Comparació amb el comportament del model de camp mig (MFM).

Com que  $z \rightarrow \infty$  podem aproximar aquesta Gaussiana a una delta centrada a  $P_l^*(\tilde{H})$ . Per tant podem escriure l'expressió (3.58) com:

$$\begin{aligned} m_\infty(\tilde{H}) &= 2 \int dn \delta \left( P_l^*(\tilde{H}) - \frac{n}{z} \right) \int_{\frac{-J(2\frac{n}{z}-1)-\tilde{H}}{\tilde{\sigma}}}^{\infty} \phi(h_i) dh_i - 1 = \\ &= 2 \int_{\frac{-J(2P_l^*(\tilde{H})-1)-\tilde{H}}{\tilde{\sigma}}}^{\infty} \phi(h_i) dh_i - 1. \end{aligned} \quad (3.60)$$

De les expressions de  $P_l^*(\tilde{H})$  (3.9) i  $P(+1)$  (3.16) s'obté que  $\lim_{z \rightarrow \infty} P_l^*(\tilde{H}) = P(+1)$ . Per tant en el límit de connectivitat infinita es compleix que

$$\lim_{z \rightarrow \infty} (2P_l^*(\tilde{H}) - 1) = m_\infty(\tilde{H}) \quad (3.61)$$

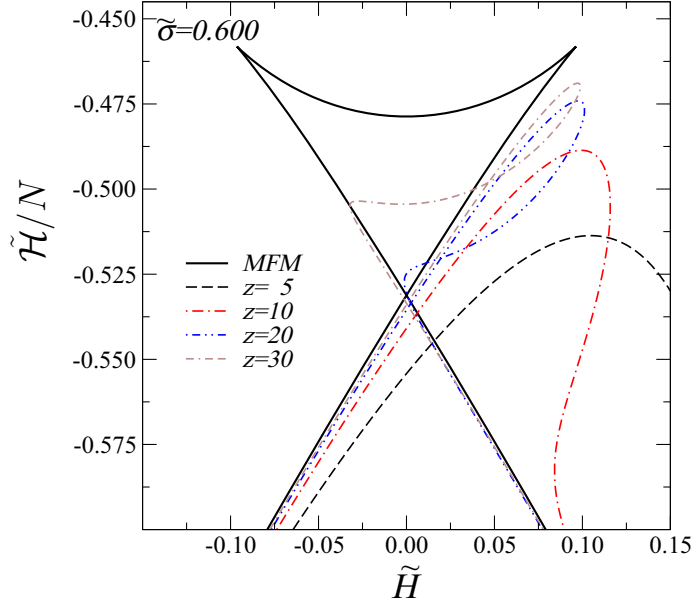
i llavors tenim que

$$m_\infty(\tilde{H}) = 2 \int_{\frac{-Jm_\infty(\tilde{H})-\tilde{H}}{\tilde{\sigma}}}^{\infty} \phi(h_i) dh_i - 1. \quad (3.62)$$

Com que la Gaussiana està normalitzada podem expressar l'expressió anterior com

$$m_\infty(\tilde{H}) = 1 - 2 \int_{-\infty}^{\frac{-Jm_\infty(\tilde{H})-\tilde{H}}{\tilde{\sigma}}} \phi(h_i) dh_i \quad (3.63)$$

que coincideix exactament amb l'expressió de la imantació pel MFM (2.69) que s'ha obtingut al capítol 2.



**Figura 3.16:** Comportament de l'Hamiltonià transformat  $\tilde{\mathcal{H}}/N$  en funció de  $\tilde{H}/J$  per  $\tilde{\sigma}/J = 0.6$  i augmentant els valors de  $z$ . Hem considerat  $J = 1$ , sense perdre generalitat. Comparació amb el comportament del model de camp mig (MFM).

### 3.10 Sumari i conclusions

En aquest capítol hem calculat analíticament els termes energètics del RFIM a  $T = 0$  amb dinàmica metastable *1-spin-flip* definit sobre una xarxa de Bethe. Per fer-ho hem generalitzat el mètode utilitzat per Dhar et al. [80] per calcular la imantació del model. Les expressions analítiques del terme energètic associat a la interacció ferromagnètica dels spins  $\mathcal{U}_e$  i del terme energètic associat a l'acoblament del sistema al desordre congelat  $\mathcal{U}_d$  ens han permès escriure una expressió analítica per l'Hamiltonià del model. L'anàlisi en xarxes de Bethe amb  $z \geq 4$  ens ha permès entendre amb equacions analítiques el paper de cada terme energètic a la transició de fase induïda per desordre que separa la fase amb cicles d'histèresi continus de la fase amb cicles d'histèresi discontinus. El fet de poder calcular analíticament aquests termes també ens ha permès estudiar l'energia dissipada del sistema en funció del camp extern per qualsevol segment del cicle d'histèresi.

A partir de les expressions analítiques dels FORC's [82] hem pogut representar els diagrames FORC's del model que ens han permès posar de manifest propietats importants de la histèresi d'aquest model.

Per últim s'ha proposat un Hamiltonià modificat sobre les xarxes de Bethe que en el límit de connectivitat infinita  $z \rightarrow \infty$  té un comportament equivalent al del MFM. Aquest comportament era conegut tant pel model d'Ising en equilibri [20] com pel RFIM en equilibri [52] però, que nosaltres sapiguem, mai s'havia comprovat per una dinàmica metastable.

# Capítol 4

## Tractament exacte del RFIM amb dinàmica *2-spin-flip*

### 4.1 Introducció

Per estudiar la robustesa de l'escenari trobat pel model d'Ising amb camps aleatoris (RFIM) amb dinàmica metastable, s'ha proposat considerar la resposta fora de l'equilibri del model a  $T = 0$  amb la dinàmica *2-spin-flip* [75]. Tal com s'ha explicat a la secció 2.5, aquesta dinàmica té nous canals de transició degut als salts cooperatius. Aquest nou canal permet al sistema superar barreres energètiques que en el cas de la dinàmica *1-spin-flip* bloquejarien la seva evolució. Els estats metastables visitats pel sistema quan el conduïm amb  $H$  amb una dinàmica *2-spin-flip*, són diferents d'aquells que visitem amb la dinàmica *1-spin-flip*. Simulacions del RFIM a  $T = 0$  sobre xarxes cúbiques ( $d = 3$ ) amb dinàmica *2-spin-flip* mostren que el canvi de dinàmica condueix a una reducció important de l'amplada del cicle d'histèresi, és a dir una reducció important de la coercitivitat. També s'observa que el comportament crític fora de l'equilibri continua present i sembla tenir la mateixa classe d'universalitat [75] que l'observat quan s'usa la dinàmica estàndard *1-spin-flip*.

En aquest capítol estudiem la histèresi del RFIM sobre una xarxa de Bethe amb dinàmica *2-spin-flip* a temperatura zero. Considerem una distribució Gaussiana dels camps aleatoris. L'objectiu és obtenir una solució exacte pel cicle d'histèresi principal en funció de la quantitat de desordre del sistema i comparar els resultats amb els obtinguts amb la dinàmica *1-spin-flip* [79,80]. Amb la dinàmica estàndard de *1-spin-flip* no hi ha transició fora de l'equilibri per una xarxa de Bethe amb connectivitat  $z \leq 3$  [80] i en canvi existeix transició pels casos  $z \geq 4$ , tal com s'ha explicat en el capítol anterior. El fet que el canvi qualitatiu tingui lloc per  $z \geq 4$  i no per  $z \geq 3$ , tal i com es troba quan estudiem el RFIM en equilibri a  $T = 0$ , és un fet peculiar que pot posar en dubte la conjectura de que el punt crític fora de l'equilibri i el punt crític de l'equilibri pertanyen a la mateixa classe d'universalitat i estan controlats pels mateixos punts fixos [16,51,94]. Per tant

ens centrem amb la xarxa de Bethe amb connectivitat  $z = 3$  i intentarem estudiar si hi ha una transició fora de l'equilibri pel cas de la dinàmica amb *2-spin-flip*.

A la secció 4.2 tornem a explicar breument el model i les característiques principals de la dinàmica *2-spin-flip*. A la següent secció deduïm les equacions auto-consistents que ens permetran calcular el cicle d'histèresi principal per la xarxa de Bethe. A la secció 4.4 trobem la solució per la cadena unidimensional ( $z = 2$ ) i a la secció 4.5 ens centrem en el cas  $z = 3$ . En els dos casos compararem els resultats obtinguts amb els resultats de l'equilibri a  $T = 0$  (estat fonamental) i amb els resultats obtinguts amb la dinàmica *1-spin-flip*. Demostrarem que en el cas  $z = 3$  amb la dinàmica *2-spin-flip* tenim una transició fora de l'equilibri, en contrast amb la dinàmica *1-spin-flip*. Finalment, a les últimes seccions, discutirem possibles extensions del càlcul sobre dinàmiques més cooperatives *k-spin-flip*, relacionant el grau de cooperació de la dinàmica local amb les propietats del cicle d'histèresi.

## 4.2 Model i dinàmica

Ens centrem doncs en el RFIM a  $T = 0$  sobre una xarxa de Bethe amb connectivitat  $z$  i dinàmica metastable. Tal i com ja s'ha vist anteriorment l'Hamiltonià del model és:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j - \sum_i (h_i + H) S_i \quad (4.1)$$

on el primer sumatori s'estén sobre totes les parelles de primer veïns de la xarxa, els camps aleatoris  $\{h_i\}$  estan distribuïts segons una Gaussiana

$$f(h_i) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp(-h_i^2/2\sigma^2) \quad (4.2)$$

on  $\sigma$  controla la quantitat de desordre.

Tal i com s'ha explicat a la secció 2.5 la dinàmica que tenim en consideració és una extensió natural de la dinàmica *1-spin-flip*, que permet salts cooperatius de parelles de spins. El sistema salta d'un estat metastable a un altre, a través d'un allau, sempre que l'estat inicial es torna inestable al salt individual d'algun spin  $o$  al salt simultani de qualsevol parella de spins. L'evolució té lloc entre dos estats metastables segons aquesta nova dinàmica. Tal i com ja s'ha explicat, les noves característiques d'aquesta apareixen quan permetem salts cooperatius entre dos spins veïns, i l'energia local a ser minimitzada és:

$$\mathcal{H}_2(S_i, S_j) = -f'_i S_i - f'_j S_j - J S_i S_j \quad (4.3)$$



on

$$f'_i = f_i - JS_j = J \sum_{\substack{\langle k/i \rangle \\ k \neq j}} S_k + h_i + H \quad (4.4)$$

$$f'_j = f_j - JS_i = J \sum_{\substack{\langle k/j \rangle \\ k \neq i}} S_k + h_j + H \quad (4.5)$$

on  $f'_i$  ( $f'_j$ ) és el camp local que experimenta el spin  $S_i$  ( $S_j$ ) sense la influència del veí  $S_j$  ( $S_i$ ) (el sumatori de l'expressió anterior s'estén sobre tots els veïns de  $S_i$  excepte  $S_j$ ). Les regions d'estabilitat de la parella  $(S_i - S_j)$  amb la dinàmica *2-spin-flip* s'han representat gràficament a la figura 2.8. Com ja hem explicat aquesta dinàmica està formada pels girs corresponents a la dinàmica *1-spin-flip* més el salt cooperatiu irreductible d'una parella de primers veïns. Els girs lligats a la dinàmica *1-spin-flip* tenen lloc quan el camp local de  $S_i$ ,  $f_i = f'_i + JS_i$ , o  $S_j$ ,  $f_j = f'_j + JS_j$ , canvia de signe i corresponen a les transicions  $-- \longleftrightarrow -+$ ,  $-- \longleftrightarrow +- i -+ \longleftrightarrow ++$ ,  $+ - \longleftrightarrow ++$ . En canvi un salt irreductible de dos spins implica una transició  $-- \longleftrightarrow ++$  quan els spins que formen la parella no poden saltar individualment. Aquest salt cooperatiu irreductible té lloc quan la quantitat  $f'_i + f'_j$  canvia de signe i alhora es compleix que  $-J < f'_i < J$  i  $-J < f'_j < J$  condicions necessàries per que els spins no saltin individualment.

Fem evolucionar el sistema mitjançant el camp magnètic  $H$ , per tant anirem canviant  $H$  fins que una parella es torni inestable. Aquesta parella es pot representar amb un punt en el diagrama de la figura 2.8 i l'evolució de la parella ve dictada per la zona on entra quan canviem el camp extern  $H$ . Les quantitats  $f'_i$  i  $f'_j$  depenen linealment de  $H$  per tant els punts sempre es desplacen al llarg de la diagonal  $(1, 1)$ .

A la referència [75] es demostra que, degut a la naturalesa de les interaccions ferromagnètiques, la dinàmica *2-spin-flip* comparteix amb la dinàmica *1-spin-flip* algunes propietats importants com: la propietat abeliana, la *no-passing rule* i també presenten memòria de punt de retorn *return-point memory*. Com a resultat tenim que aquesta dinàmica presenta les següents característiques:

- (i) La configuració metastable (totes les parelles de spins estan en l'estat que minimitzen l'Hamiltonià local  $\mathcal{H}_2$ ) a que arribem amb un camp fixat després de relaxar el sistema amb la dinàmica *2-spin-flip* és independent de l'ordre en que relaxem els spins durant el procés de relaxació.
- (ii) L'estat a que arribem per un cert camp magnètic aplicat és independent dels detalls de la història prèvia i només depèn del punt en que s'ha girat per última vegada el camp. Aquesta és la propietat del *return-point memory*.
- (iii) En el procés de relaxació entre dos estats metastables, que té lloc quan canviem el camp, els spins només giren un cop, és a dir no hi ha girs cap enrera.

A partir d'ara ens centrem en el cicle d'histeresi principal que s'obté començant des d'una configuració de saturació amb tots els spins amb la mateixa direcció i un camp aplicat molt gran en valor absolut (positiu o negatiu). Per la simetria del model, la branca superior del cicle que segueix el sistema quan disminuïm el camp aplicat des de  $+\infty$  a  $-\infty$  és fàcilment deduïble a partir de la branca inferior del cicle obtinguda augmentat el camp des de  $-\infty$  a  $+\infty$ , i per tant només considerem la branca inferior. Per tant ens plantegem el càlcul exacte de la imantació de la branca inferior del cicle del model definit sobre una xarxa de Bethe amb connectivitat  $z$ .

### 4.3 Equacions auto-consistents per la xarxa de Bethe

Com ja s'ha anat comentant en els capítols anteriors, per ser capaços de solucionar aquests models sobre les xarxes de Bethe necessitem escriure una equació de recurrència per una quantitat rellevant que ens permeti trobar la solució exacte del model. Per exemple per la dinàmica *1-spin-flip* la quantitat rellevant és la probabilitat condicionada  $P_l^*(H)$  que un spin del nivell  $r$  acabi en l'estat  $+1$  després del procés de relaxació *donat que* el seu veí del nivell  $(r - 1)$  està aguantat (clavat) avall. Aquesta probabilitat és únicament funció del camp extern (ja hem fet el promig respecte els camps aleatoris) i segueix una relació de recurrència. Els punts fixes d'aquesta descriuen el comportament típic en una xarxa de Bethe. Trobar l'expressió equivalent de  $P_l^*(H)$  per la dinàmica *2-spin-flip* és més complicat, el fet que es permetin salts cooperatius de parelles acobla els nivells. Llavors la quantitat apropiada és la probabilitat condicional que un spin al nivell  $(r)$  estigui en l'estat  $S$  *donat que*:

- (i) El seu camp local és  $h$
- (ii) Tots els spins i parelles de spins de la branca estan relaxats segons la dinàmica *donat que* el spin del nivell  $(r - 1)$  està clavat avall
- (iii) Els  $z - 1$  spins del nivell  $(r + 1)$  després de la relaxació han quedat en l'estat  $S_1, S_2, \dots, S_{z-1}$ .

Aquesta probabilitat és funció de  $x = h + H$  i es fàcil veure que depèn de l'estat dels spins del nivell  $(r + 1)$  a través de la suma  $\tilde{S} = \sum_{i=1}^{z-1} S_i$ . Escrivim aquesta probabilitat com  $p_{\tilde{S}S}^{(r)}(x)$ .

Per escriure les relacions de recurrència per aquesta probabilitat necessitem introduir les ràtios de transició de la dinàmica *2-spin-flip* (veure la figura 4.1) que involucren les transicions del spin de la capa  $(r)$  i els seus  $z - 1$  primers veïns  $(S_1 \cdots S_{z-1})$  de la capa  $(r + 1)$  *donat* l'estat dels spins de la capa  $(r + 2)$ . De fet

no fa falta conèixer l'estat concret de tots aquests spins sinó el valor de les sumes  $(\tilde{S}_1 \cdots \tilde{S}_{z-1})$ .

Llavors definim

$$W_{\underbrace{\{\tilde{S}_1 \cdots \tilde{S}_{z-1}\}}_{\text{capa } (r+2)} | \underbrace{(S_1 \cdots S_{z-1}, -1)}_{(r+1)} \rightarrow (\tilde{S}, S) | \underbrace{-1}_{(r-1)}}(x_1 \cdots x_{z-1}, x) \quad (4.6)$$

com la ràtio de transició dels spins de les capes  $(r+1)$  i  $(r)$  des d'un estat  $(S_1 \cdots S_{z-1}, -1)$  a un estat  $(S'_1 \cdots S'_{z-1}, S)$  amb  $\sum_{k=1}^{z-1} S'_k = \tilde{S}$  *donades* les sumes dels spins de la capa  $(r+2)$  que tenen un veí comú  $(\tilde{S}_1 \cdots \tilde{S}_{z-1})$  i *donat que* el spin de la capa  $(r-1)$  està clavat avall. La ràtio de transició es pot trobar combinant diagrames d'estabilitat similars al de la figura 2.8 per totes les parelles de spins involucrades en el canvi d'estat i com a conseqüència de que en aquesta dinàmica no hi ha girs inversos es complirà que:

$$W_{\{\tilde{S}_1 \cdots \tilde{S}_{z-1} | (S_1 \cdots S_{z-1}, -1) \rightarrow (\tilde{S}, S) | -1\}}(x_1 \cdots x_{z-1}, x) = 0 \quad \text{si} \quad \sum_{k=1}^{z-1} S_k > \tilde{S} \quad (4.7)$$

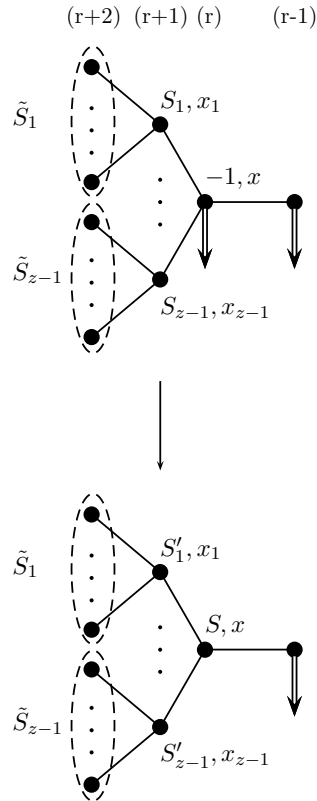
La relació de recurrència per la probabilitat condicional  $p_{\tilde{S}S}^{(r)}(x)$  es pot derivar a partir de les  $p_{\tilde{S}S}^{(r+1)}(x)$  considerant tots els possibles camins per arribar a  $(\tilde{S}, S)$  i de la ja explicada propietat de *relaxació a dos passos*, que també es compleix en aquest cas.

Llavors obtenim

$$p_{\tilde{S}S}^{(r)}(x) = \sum_{\tilde{S}_1 \cdots \tilde{S}_{z-1}} \sum_{S_1 \cdots S_{z-1}} \int \cdots \int \left[ \prod_{k=1}^{z-1} \delta x_k p_{\tilde{S}_k S_k}^{(r+1)}(x_k) \right] \times \\ \times W_{\{\tilde{S}_1 \cdots \tilde{S}_{z-1} | (S_1 \cdots S_{z-1}, -1) \rightarrow (\tilde{S}, S) | -1\}}(x_1 \cdots x_{z-1}, x), \quad (4.8)$$

on  $\tilde{S}_k$  i  $\tilde{S}$  poden prendre els valors  $\{-(z-1), -(z-1)+2, \dots, +(z-1)-2, +(z-1)\}$ , i on  $S_k$  i  $S$  poden prendre els valors  $\{-1, +1\}$  (per referir-nos a aquests dos estats de forma simplificada utilitzarem únicament el signe). Per tant tindrem  $2(z-1)$  equacions de recurrència que ens permetran calcular les  $2(z-1)$  probabilitats condicionades  $p_{\tilde{S}S}(x)$  que necessitem. Estem interessats en obtenir el resultat en el límit termodinàmic per l'interior de l'arbre de Cayley (xarxa de Bethe) on no tenim efectes de frontera, llavors hem de considerar que totes les capes de la xarxa són completament equivalents i hem de calcular els punts fixos de les equacions de recurrència anteriors.

$$p_{\tilde{S}S}(x) = \sum_{\tilde{S}_1 \cdots \tilde{S}_{z-1}} \sum_{S_1 \cdots S_{z-1}} \int \cdots \int \left[ \prod_{k=1}^{z-1} \delta x_k p_{\tilde{S}_k S_k}(x_k) \right] \times \\ \times W_{\{\tilde{S}_1 \cdots \tilde{S}_{z-1} | (S_1 \cdots S_{z-1}, -1) \rightarrow (\tilde{S}, S) | -1\}}(x_1 \cdots x_{z-1}, x) \quad (4.9)$$



**Figura 4.1:** Il·lustració esquemàtica de la ràtio de transició  $W_{\{\tilde{S}_1 \dots \tilde{S}_{z-1} | (S_1 \dots S_{z-1}, -1) \rightarrow (\tilde{S}, S) | -1\}}(x_1 \dots x_{z-1}, x)$  que apareix en les equacions de recurrència per les probabilitats condicionals (4.6). Tenim que  $\sum_{k=1}^{z-1} S'_k = \tilde{S}$ . L'estat de el spin de la capa  $(r)$  inicialment avall i l'estat dels seus  $z - 1$  veïns de la capa  $(r + 1)$  canvien mitjançant girs individuals i girs cooperatius irreductibles de parelles. Recordem que mantenim el spin de la capa  $(r - 1)$  avall i que els spins de la capa  $(r + 2)$  estan en l'estat  $(\tilde{S}_1, \dots, \tilde{S}_{z-1})$  (recordem que  $\tilde{S}_i$  és la suma de l'estat dels  $z-1$  spins veïns de  $S_i$ ).

A partir de les probabilitats  $p_{\tilde{S}S}(x)$  podem definir el seu valor mig com:

$$\bar{p}_{\tilde{S}S} = \int \delta x p_{\tilde{S}S}(x), \quad (4.10)$$

per la definició de  $p_{\tilde{S}S}$  s'ha de complir que  $S[J(\tilde{S} - 1) + x] > 0$  que ens porta a

$$\bar{p}_{\tilde{S}+} = \int_{-J(\tilde{S}-1)}^{\infty} \delta x p_{\tilde{S}+}(x), \quad (4.11)$$

$$\bar{p}_{\tilde{S}-} = \int_{-\infty}^{-J(\tilde{S}-1)} \delta x p_{\tilde{S}-}(x). \quad (4.12)$$

Recordar que estem utilitzant la notació simplificada  $\delta x \equiv f(x - H)dx$ .

Fins ara hem calculat les probabilitats condicionades  $p_{\tilde{S}S}(x)$  que podem considerar la generalització de la probabilitat  $P_l^*$  utilitzada en la dinàmica *1-spin-flip*. De fet si calculem les probabilitats condicionades  $p_{\tilde{S}S}(x)$  únicament considerant els mecanismes de la dinàmica *1-spin-flip* es compleix que  $P_l^* = \sum_{\tilde{S}} \bar{p}_{\tilde{S}+}$ .

La imantació (promitjada sobre desordre) es pot relacionar amb la probabilitat promig que un spin arbitrari de la xarxa de Bethe (tots són completament equivalents) estigui amunt:

$$m = 2P(+1) - 1, \quad (4.13)$$

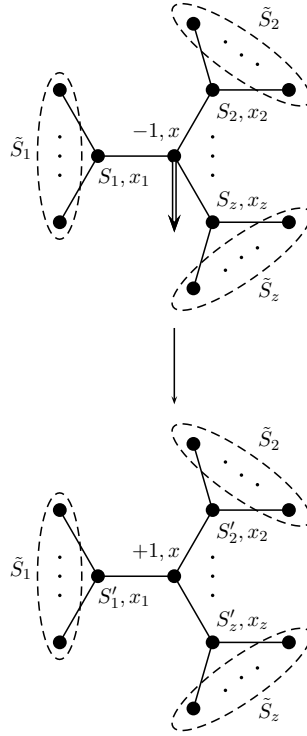
La probabilitat que un spin estigui amunt s'obté estudiant les  $z$  branques que surten d'aquest. L'estat d'una branca *donat que* el spin considerat es mantingui avall (estigui clavat avall) és independent de l'estat de les altres branques i es caracteritza per la probabilitat condicional  $p_{\tilde{S}S}(x)$ . Llavors, igual que abans, tenim que és vàlida la propietat de la *relaxació a dos passos*, i per tant podem calcular la probabilitat que un spin estigui amunt a partir de les probabilitats  $p_{\tilde{S}S}(x)$  i de les ràtios de transició  $\tilde{W}$  que vindran donades per una extensió de les introduïdes anteriorment, ja que ara la transició involucra configuracions formades per el spin considerat i els seus  $z$  veïns, *donat* els estats dels descendents directes d'aquests veïns, veure figura 4.2.

Si considerem tots els possibles mecanismes de transició que porten el spin considerat a l'estat +1 obtenim:

$$P(+1) = \sum_{\tilde{S}_1 \dots \tilde{S}_z} \sum_{S_1 \dots S_z} \int \dots \int \left[ \prod_{k=1}^z \delta x_k p_{\tilde{S}_k S_k}(x_k) \right] \times \\ \times \sum_{S'_1 \dots S'_z} \int \delta x \tilde{W}_{\{\tilde{S}_1 \dots \tilde{S}_z | (S_1 \dots S_z, -1) \rightarrow (S'_1 \dots S'_z, +1)\}}(x_1 \dots x_z, x), \quad (4.14)$$

on  $\tilde{W}$  és la ràtio de transició definida anteriorment.

Un cop introduït el formalisme general per calcular la branca inferior del cicle d'histèresi en una xarxa de Bethe amb connectivitat  $z$  utilitzant la dinàmica *2-spin-flip*, l'aplicarem als casos  $z = 2$  i  $z = 3$ .



**Figura 4.2:** Il·lustració de la ràtio de transició  $\tilde{W}_{\{\tilde{S}_1 \dots \tilde{S}_z | (S_1 \dots S_z, -1) \rightarrow (S'_1 \dots S'_z, +1)\}}(x_1 \dots x_z, x)$  involucrada en l'expressió de la iman-tació (veure equació (4.14)). El spin central salta amunt en un canvi de configuració que involucra els seus  $z$  veïns, donat els estats dels seus descendents  $(\tilde{S}_1, \dots, \tilde{S}_z)$ . El canvi de configuració involucra els girs de la dinàmica *1-spin-flip* i els salts cooperatius irreductibles de parelles de primers veïns que estan relacionats amb la dinàmica *2-spin-flip*.

## 4.4 Solució exacte per la cadena unidimensional

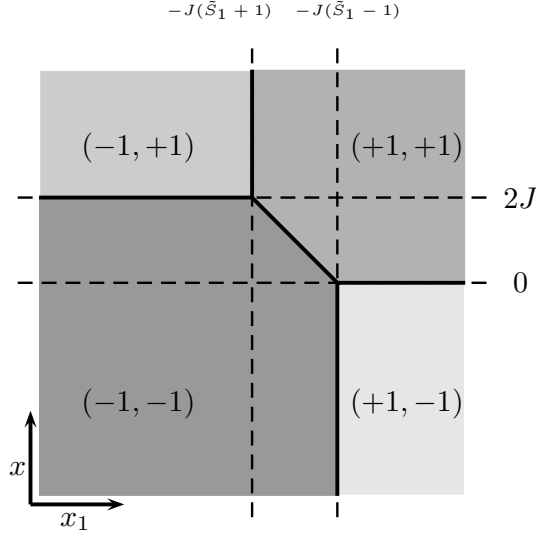
El cas de la cadena unidimensional ( $z = 2$ ) és el més senzill i el primer que ens plantegem solucionar. Les equacions auto-consistents de les probabilitats condicionades les obtenim a partir de l'equació general (4.9) escrita pel cas  $z = 2$  que prenen la forma:

$$p_{\tilde{S}S}(x) = \sum_{\tilde{S}_1} \sum_{S_1} \int \delta x_1 p_{\tilde{S}_1 S_1}(x_1) W_{\{\tilde{S}_1 | (S_1, -1) \rightarrow (\tilde{S}, S) | -1\}}(x_1, x), \quad (4.15)$$

on  $\tilde{S}_1 = \pm 1$  i les  $S_1 = \pm 1$ . Les equacions auto-consistents per  $z = 2$  són lineals amb les probabilitats condicionades, fet que ens permet plantejar-nos una solució analítica.

Les expressions per les ràtios de transició  $W_{\{\tilde{S}_1 | (S_1, -1) \rightarrow (\tilde{S}, S) | -1\}}(x_1, x)$  es troben a partir dels dominis de transició d'una parella de spins veïns que tenen el veï de

de la capa  $(r+1)$  en l'estat  $\tilde{S}_1$  i el veí de la capa  $(r-1)$  està clavat avall. Aquestes ràtios es poden veure gràficament a la figura 4.3 i es poden escriure com:



**Figura 4.3:** Es representa l'estat de la parella de spins  $(S_1, S)$  en funció dels seus camps locals  $(x_1, x)$ . Les ràtios  $W_{\{\tilde{S}_1|(S_1, -1) \rightarrow (\tilde{S}, S)|_{-1}\}}(x_1, x)$  delimiten aquestes regions.

$$\begin{aligned} W_{\{\tilde{S}_1|(-1, -1) \rightarrow (+1, +1)|_{-1}\}}(x_1, x) &= \\ &= \theta[0 < x < 2J]\theta[-J(\tilde{S}_1 - 1) - x < x_1 < -J(\tilde{S}_1 - 1)] + \\ &\quad + \theta[x > 2J]\theta[-J(\tilde{S}_1 + 1) < x_1 < -J(\tilde{S}_1 - 1)] \end{aligned} \quad (4.16)$$

$$W_{\{\tilde{S}_1|(-1, -1) \rightarrow (-1, +1)|_{-1}\}}(x_1, x) = \theta[x > 2J]\theta[x_1 < -J(\tilde{S}_1 + 1)] \quad (4.17)$$

$$W_{\{\tilde{S}_1|(-1, -1) \rightarrow (+1, -1)|_{-1}\}}(x_1, x) = 0 \quad (4.18)$$

$$\begin{aligned} W_{\{\tilde{S}_1|(-1, -1) \rightarrow (-1, -1)|_{-1}\}}(x_1, x) &= \theta[x < 0]\theta[x_1 < -J(\tilde{S}_1 - 1)] + \\ &\quad + \theta[0 < x < 2J]\theta[x_1 < -J(\tilde{S}_1 - 1) - x] \end{aligned} \quad (4.19)$$

$$W_{\{\tilde{S}_1|( +1, -1) \rightarrow (+1, +1)|_{-1}\}}(x_1, x) = \theta[x > 0]\theta[x_1 > -J(\tilde{S}_1 - 1)] \quad (4.20)$$

$$W_{\{\tilde{S}_1|( +1, -1) \rightarrow (-1, +1)|_{-1}\}}(x_1, x) = 0 \quad (4.21)$$

$$W_{\{\tilde{S}_1|( +1, -1) \rightarrow (+1, -1)|_{-1}\}}(x_1, x) = \theta[x < 0]\theta[x_1 > -J(\tilde{S}_1 - 1)] \quad (4.22)$$

$$W_{\{\tilde{S}_1|(+1,-1)\rightarrow(-1,-1)|-1\}}(x_1, x) = 0 \quad (4.23)$$

on hem utilitzat les funcions  $\theta[\dots]$  que prenen el valor  $+1$  dins el domini que indica l'argument i  $0$  fora d'aquest, per tant la forma explícita d'aquestes funcions és:

$$\theta[x_1 < x < x_2] = \begin{cases} +1 & x \in (x_1, x_2) \\ 0 & x \notin (x_1, x_2) \end{cases} \quad (4.24)$$

$$\theta[x < x_1] = \begin{cases} +1 & x \in (-\infty, x_1) \\ 0 & x \notin (-\infty, x_1) \end{cases} \quad (4.25)$$

$$\theta[x > x_1] = \begin{cases} +1 & x \in (x_1, +\infty) \\ 0 & x \notin (x_1, +\infty) \end{cases} \quad (4.26)$$

Introduint les expressions de les ràtios de transició (4.16-4.23) a l'equació (4.15) podem trobar les probabilitats condicionades. Per simplificar la notació a partir d'ara utilitzarem  $(+, -)$  enlloc de  $(+1, -1)$  quan ens referim a les quantitats  $(\tilde{S}_1, \tilde{S}_2)$ . Les ràtios (4.16) i (4.20) ens permeten calcular  $p_{++}(x)$ , la ràtio (4.17) ens permet calcular  $p_{-+}(x)$ , la ràtio (4.19) ens permet calcular  $p_{--}(x)$  i finalment la ràtio (4.22) ens permet calcular  $p_{+-}(x)$ . Les expressions que obtenim són:

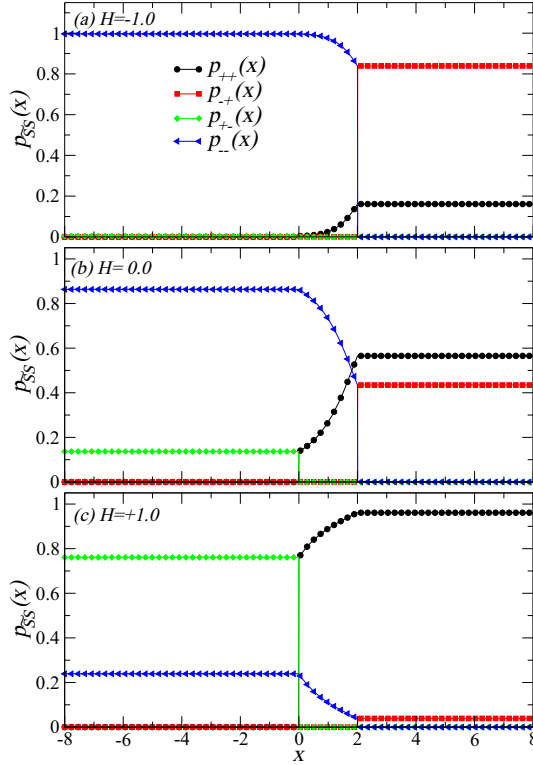
$$\begin{aligned} p_{++}(x) &= \theta[0 < x < 2J] \times \\ &\times \left[ \sum_{\tilde{S}_1} \int_{-J(\tilde{S}_1-1)}^{+\infty} \delta x_1 p_{\tilde{S}_1+}(x_1) + \sum_{\tilde{S}_1} \int_{-J(\tilde{S}_1-1)-x}^{-J(\tilde{S}_1-1)} \delta x_1 p_{\tilde{S}_1-}(x_1) \right] + \\ &+ \theta[x > 2J] \left[ \sum_{\tilde{S}_1} \int_{-J(\tilde{S}_1-1)}^{+\infty} \delta x_1 p_{\tilde{S}_1+}(x_1) + \sum_{\tilde{S}_1} \int_{-J(\tilde{S}_1+1)}^{-J(\tilde{S}_1-1)} \delta x_1 p_{\tilde{S}_1-}(x_1) \right] \end{aligned} \quad (4.27)$$

$$p_{-+}(x) = \theta[x > 2J] \left[ \sum_{\tilde{S}_1} \int_{-\infty}^{-J(\tilde{S}_1+1)} \delta x_1 p_{\tilde{S}_1-}(x_1) \right] \quad (4.28)$$

$$p_{+-}(x) = \theta[x < 0] \left[ \sum_{\tilde{S}_1} \int_{-J(\tilde{S}_1-1)}^{+\infty} \delta x_1 p_{\tilde{S}_1+}(x_1) \right] \quad (4.29)$$

$$\begin{aligned} p_{--}(x) &= \theta[x < 0] \left[ \sum_{\tilde{S}_1} \int_{-\infty}^{-J(\tilde{S}_1-1)} \delta x_1 p_{\tilde{S}_1-}(x_1) \right] + \\ &+ \theta[0 < x < 2J] \left[ \sum_{\tilde{S}_1} \int_{-\infty}^{-J(\tilde{S}_1-1)-x} \delta x_1 p_{\tilde{S}_1-}(x_1) \right] \end{aligned} \quad (4.30)$$





**Figura 4.4:** Probabilitats condicionals  $p_{\tilde{S}\tilde{S}}(x)$  en funció del camp local  $x$  per la cadena unidimensional ( $z = 2$ ) i per  $\sigma = 1.0$ . S'han considerat diferents valors del camp extern (en unitats  $J \equiv 1$ ). Es poden veure les propietats de continuïtat discutides al text.

Les funcions  $\theta[\dots]$  per les variables  $x_1$  i  $x_2$  s'han traduït en els límits de les integrals sobre les probabilitats condicionades  $p_{\tilde{S}_1\tilde{S}_1}(x_1)$  i  $p_{\tilde{S}_2\tilde{S}_2}(x_2)$  respectivament.

Analizant les expressions auto-consistents de les probabilitats condicionades (4.27-4.30) ens adonem que:

- (i) Es compleixen les següents condicions de continuïtat:  $p_{++}(0^+) = p_{+-}(0^-)$  i  $p_{--}(2J^-) = p_{-+}(2J^+)$ .
- (ii) Aquestes probabilitats condicionades són constants en els intervals  $x \in (-\infty, 0)$  i  $x \in (2J, +\infty)$  i tenen una dependència amb  $x$  en l'interval  $x \in (0, 2J)$  (Es pot veure aquest comportament a la figura 4.4).

Per tant podem escriure-les com:

$$p_{++}(x) = \theta[0 < x < 2J]\tilde{q}(x) + \theta[x > 2J]\hat{p}_{++} \quad (4.31)$$

$$p_{-+}(x) = \theta[x > 2J]\hat{p}_{-+} \quad (4.32)$$

$$p_{+-}(x) = \theta[x < 0]\hat{p}_{+-} \quad (4.33)$$

$$p_{--}(x) = \theta[x < 0]\hat{p}_{--} + \theta[0 < x < 2J]q(x) \quad , \quad (4.34)$$

on les definicions de les constants  $\hat{p}_{++}$ ,  $\hat{p}_{-+}$ ,  $\hat{p}_{+-}$ ,  $\hat{p}_{--}$  i les funcions  $\tilde{q}(x)$  i  $q(x)$  s'obtenen igualant les equacions (4.31-4.34) amb les equacions (4.27-4.30).

Aquestes probabilitats condicionades han de complir la condició de normalització:

$$p_{++}(x) + p_{-+}(x) + p_{+-}(x) + p_{--}(x) = 1 \quad \forall x, \quad (4.35)$$

llavors s'ha de complir que:

$$\tilde{q}(x) + q(x) = 1 \quad x \in (0, 2J) \quad (4.36)$$

$$\hat{p}_{++} + \hat{p}_{-+} = 1 \quad (4.37)$$

$$\hat{p}_{+-} + \hat{p}_{--} = 1. \quad (4.38)$$

Si introduïm les equacions (4.31-4.34) a les definicions de  $\hat{p}_{++}$ ,  $\hat{p}_{-+}$ ,  $\hat{p}_{+-}$ ,  $\hat{p}_{--}$ ,  $q(x)$  i usem les condicions de normalització (4.36-4.38) obtenim les següents equacions auto-consistents:

$$\hat{p}_{++} = p_1 + (p_2 - p_1)\hat{p}_{+-} \quad (4.39)$$

$$\hat{p}_{-+} = 1 - p_2\hat{p}_{+-} - p_1\hat{p}_{--} \quad (4.40)$$

$$\hat{p}_{+-} = p_1 - \int_0^{2J} \delta x q(x) \quad (4.41)$$

$$\hat{p}_{--} = (1 - p_1) + \int_0^{2J} \delta x q(x) \quad (4.42)$$

$$q(x) = (1 - p_1)\hat{p}_{--} + \hat{p}_{+-} \int_{-\infty}^{-x} \delta x_1 + \int_0^{2J-x} \delta x_1 q(x_1), \quad (4.43)$$

on les probabilitats  $p_n$  estan relacionades amb la dinàmica *1-spin-flip* i es calculen a partir de l'equació (3.7) explicada en el capítol anterior <sup>1</sup> prenen  $z = 2$  i amb  $n = 0, 1, 2$ .

A partir de les definicions dels promitjos de les probabilitats condicionals definits en les equacions (4.11) i (4.12) podem expressar les constants  $\hat{p}_{++}$ ,  $\hat{p}_{-+}$ ,  $\hat{p}_{+-}$ ,  $\hat{p}_{--}$  en funció dels promitjos  $\bar{p}_{\bar{S}\bar{S}}$  i de  $q(x)$ ,

$$\hat{p}_{++} = \frac{1}{p_0} \left( \bar{p}_{++} - (p_1 - p_0) + \int_0^{2J} \delta x q(x) \right) \quad (4.44)$$

$$\hat{p}_{-+} = \frac{1}{p_0} \bar{p}_{-+} \quad (4.45)$$

$$\hat{p}_{+-} = \frac{1}{1 - p_1} \bar{p}_{+-} \quad (4.46)$$

$$\hat{p}_{--} = \frac{1}{1 - p_1} \left( \bar{p}_{--} - \int_0^{2J} \delta x q(x) \right) \quad (4.47)$$

---

<sup>1</sup>Recordem que  $p_n$  és la probabilitat que un spin amb  $n$  veïns amunt i  $z - n$  veïns avall, salti amunt amb la dinàmica *1-spin-flip* quan apliquem un camp extern  $H$ . Aquesta probabilitat es calcula fent una integral a la distribució dels camps aleatoris  $f(h_i)$ ,  $p_n = \int_{-J(2n-z)-H}^{+\infty} dh_i f(h_i) = \int_{-J(2n-z)}^{+\infty} dx f(x-H) \equiv \int_{-J(2n-z)}^{+\infty} \delta x$ . Hem utilitzat les definicions  $x \equiv h_i + H$  i  $\delta x \equiv dx f(x-H)$ .

Si introduïm les equacions (4.44-4.47) a (4.39-4.42) i fem una mica d'àlgebra trobem les expressions dels dels promitjos en funció de  $p_n$  i de  $q(x)$ :

$$\bar{p}_{++} = p_0 p_1 (1 + p_2 - p_1) + p_1 - p_0 - [1 + p_0(p_2 - p_1)] \int_0^{2J} \delta x q(x) \quad (4.48)$$

$$\bar{p}_{+-} = p_1(1 - p_1) - (1 - p_1) \int_0^{2J} \delta x q(x) \quad (4.49)$$

$$\bar{p}_{-+} = p_0[1 - p_1(1 + p_2 - p_1)] + p_0(p_2 - p_1) \int_0^{2J} \delta x q(x) \quad (4.50)$$

$$\bar{p}_{--} = (1 - p_1)^2 + (2 - p_1) \int_0^{2J} \delta x q(x). \quad (4.51)$$

Si introduïm les equacions (4.46-4.47) a (4.43) i utilitzem les equacions (4.50-4.51) obtenim l'equació integral que ha de complir la funció  $q(x)$ , definida en l'interval  $x \in (0, 2J)$ :

$$q(x) - \int_0^{2J-x} \delta x_1 q(x_1) = 1 - p_1 \left( 1 + \int_{-x}^0 \delta x_1 \right) + \left( \int_{-x}^0 \delta x_1 \right) \int_0^{2J} \delta x_1 q(x_1). \quad (4.52)$$

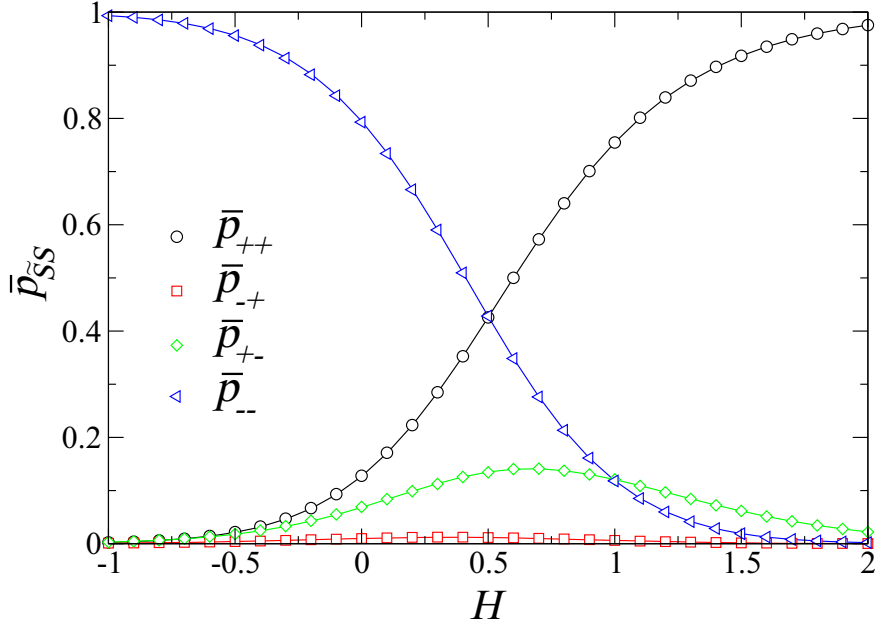
Aquesta equació integral inhomogènia es soluciona utilitzant mètodes numèrics i s'obté l'expressió de  $q(x)$ . Utilitzant el mètode d'integració numèrica de Simpson fem l'integral de  $q(x)$  que apareix en les equacions (4.48-4.51) i trobem els valors mitjos de les probabilitats condicionades  $\bar{p}_{++}$ ,  $\bar{p}_{+-}$ ,  $\bar{p}_{-+}$  i  $\bar{p}_{--}$  en funció del camp extern  $H$ . Aquestes funcions es representen a la figura 4.5 i observem que són contínues i diferenciables amb el camp extern per tots els valors de  $\sigma$ .

Un cop coneguts els valors mitjos de les probabilitats condicionades i la funció  $q(x)$  podem utilitzar les equacions (4.44-4.47) per obtenir les constants  $\hat{p}_{++}$ ,  $\hat{p}_{+-}$ ,  $\hat{p}_{-+}$ ,  $\hat{p}_{--}$  que juntament amb  $q(x)$  ens permetran trobar les probabilitats condicionades  $p_{++}(x)$ ,  $p_{+-}(x)$ ,  $p_{-+}(x)$  i  $p_{--}(x)$  a partir de les equacions (4.31-4.34). Aquestes probabilitats es mostren a la figura 4.4 on s'observa que es compleixen les relacions de continuïtat.

Per calcular la imantació a partir de les probabilitats condicionals hem d'utilitzar l'equació (4.14) pel cas  $z = 2$ , que pren la forma:

$$P(+1) = \sum_{\tilde{S}_1 \tilde{S}_2} \sum_{S_1 S_2} \int \delta x_1 \delta x_2 p_{\tilde{S}_1 S_1}(x_1) p_{\tilde{S}_2 S_2}(x_2) \times \\ \times \sum_{S'_1 S'_2} \int \delta x \tilde{W}_{\{\tilde{S}_1 \tilde{S}_2 | (S_1, S_2, -) \rightarrow (S'_1, S'_2, +)\}}(x_1, x_2, x). \quad (4.53)$$

Les expressions de les ràtios de transició que hem de considerar les obtenim analitzant les regions d'estabilitat d'una cadena de tres spins  $(S_1, S_2, S)$  en funció



**Figura 4.5:** Probabilitats condicionals promitjades en funció del camp aplicat  $H$  per  $z = 2$  i  $\sigma = 1.0$ . Les línies corresponen a la solució exacte de les equacions (4.48-4.51) i (4.52) i els símbols a simulacions numèriques fetes sobre grafs aleatoris de mida  $N = 10^4$ . S'han fet promitjos sobre  $10^5$  realitzacions diferents de desordre.

dels seus camps locals  $(x_1, x_2, x)$ . Aquestes ràtios són les següents:

$$\begin{aligned} \tilde{W}_{\{\tilde{S}_1 \tilde{S}_2 | (++) \rightarrow (++)\}}(x_1, x_2, x) &= \\ &= \theta[x_1 > -J(\tilde{S}_1 - 1)]\theta[x_2 > -J(\tilde{S}_2 - 1)]\theta[x > -2J] \quad (4.54) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \tilde{W}_{\{\tilde{S}_1 \tilde{S}_2 | (+--) \rightarrow (++)\}}(x_1, x_2, x) &= \\ &= \theta[x_1 > -J(\tilde{S}_1 - 1)]\theta[x_2 < -J(\tilde{S}_2 + 1)]\theta[x > 0] \quad (4.55) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \tilde{W}_{\{\tilde{S}_1 \tilde{S}_2 | (+--) \rightarrow (++)\}}(x_1, x_2, x) &= \\ &= \theta[x_1 > -J(\tilde{S}_1 - 1)]\theta[-J(\tilde{S}_2 + 1) < x_2 < -J(\tilde{S}_2 - 1)]\theta[x > 0] + \\ &+ \theta[x_1 > -J(\tilde{S}_1 - 1)]\theta[-J(\tilde{S}_2 + 1) - x < x_2 < -J(\tilde{S}_2 - 1)]\theta[-2J < x < 0] \quad (4.56) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \tilde{W}_{\{\tilde{S}_1 \tilde{S}_2 | (-++) \rightarrow (++)\}}(x_1, x_2, x) &= \\ &= \theta[x_1 < -J(\tilde{S}_1 + 1)]\theta[x_2 > -J(\tilde{S}_2 - 1)]\theta[x > 0] \quad (4.57) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\tilde{W}_{\{\tilde{S}_1 \tilde{S}_2 | (-+-) \rightarrow (+++)\}}(x_1, x_2, x) &= \\
&= \theta[-J(\tilde{S}_1 + 1) < x_1 < -J(\tilde{S}_1 - 1)]\theta[x_2 > -J(\tilde{S}_2 - 1)]\theta[x > 0] + \\
&+ \theta[-J(\tilde{S}_1 + 1) - x < x_1 < -J(\tilde{S}_1 - 1)]\theta[x_2 > -J(\tilde{S}_2 - 1)]\theta[-2J < x < 0]
\end{aligned} \tag{4.58}$$

$$\begin{aligned}
\tilde{W}_{\{\tilde{S}_1 \tilde{S}_2 | (---) \rightarrow (---)\}}(x_1, x_2, x) &= \\
&= \theta[x_1 < -J(\tilde{S}_1 + 1)]\theta[x_2 < -J(\tilde{S}_2 + 1)]\theta[x > 2J]
\end{aligned} \tag{4.59}$$

$$\begin{aligned}
\tilde{W}_{\{\tilde{S}_1 \tilde{S}_2 | (---) \rightarrow (---)\}}(x_1, x_2, x) &= \\
&= \theta[-J(\tilde{S}_1 - 1) - x < x_1 < -J(\tilde{S}_1 - 1)]\theta[x_2 < -J(\tilde{S}_2 + 1)]\theta[0 < x < 2J] + \\
&+ \theta[-J(\tilde{S}_1 + 1) < x_1 < -J(\tilde{S}_1 - 1)]\theta[x_2 < -J(\tilde{S}_2 + 1)]\theta[x > 2J]
\end{aligned} \tag{4.60}$$

$$\begin{aligned}
\tilde{W}_{\{\tilde{S}_1 \tilde{S}_2 | (---) \rightarrow (---)\}}(x_1, x_2, x) &= \\
&= \theta[x_1 < -J(\tilde{S}_1 + 1)]\theta[-J(\tilde{S}_2 - 1) - x < x_2 < -J(\tilde{S}_2 - 1)]\theta[0 < x < 2J] + \\
&+ \theta[x_1 < -J(\tilde{S}_1 + 1)]\theta[-J(\tilde{S}_2 + 1) < x_2 < -J(\tilde{S}_2 - 1)]\theta[x > 2J]
\end{aligned} \tag{4.61}$$

$$\begin{aligned}
\tilde{W}_{\{\tilde{S}_1 \tilde{S}_2 | (---) \rightarrow (---)\}}(x_1, x_2, x) &= \\
&= \theta[-J(\tilde{S}_1 + 1) < x_1 < -J(\tilde{S}_1 - 1)]\theta[-J(\tilde{S}_1 + 1) < x_2 < -J(\tilde{S}_2 - 1)]\theta[x > 2J] + \\
&+ \theta[-J(\tilde{S}_1 + 1) < x_1 < -J(\tilde{S}_1 - 1)]\theta[-J(\tilde{S}_1 - 1) - x < x_2 < -J(\tilde{S}_2 - 1)]\theta[0 < x < 2J] + \\
&+ \theta[-J(\tilde{S}_1 - 1) - x < x_1 < -J(\tilde{S}_1 - 1)]\theta[-J(\tilde{S}_1 + 1) < x_2 < -J(\tilde{S}_2 - 1)]\theta[0 < x < 2J] - \\
&- \theta[-J(\tilde{S}_1 - 1) - x < x_1 < -J(\tilde{S}_1 - 1)]\theta[-J(\tilde{S}_1 - 1) - x < x_2 < -J(\tilde{S}_2 - 1)]\theta[0 < x < 2J]
\end{aligned} \tag{4.62}$$

Introduint aquestes ràtios a l'equació (4.53), obtenim que:

$$\begin{aligned}
P(+1) = & \int_{-2J}^{+\infty} \delta x \left[ \sum_{\tilde{S}_1} \int_{-J(\tilde{S}_1-1)}^{+\infty} \delta x_1 p_{\tilde{S}_1+}(x_1) \right] \left[ \sum_{\tilde{S}_2} \int_{-J(\tilde{S}_2-1)}^{+\infty} \delta x_2 p_{\tilde{S}_2+}(x_2) \right] + \\
& + 2 \int_0^{+\infty} \delta x \left[ \sum_{\tilde{S}_1} \int_{-J(\tilde{S}_1-1)}^{+\infty} \delta x_1 p_{\tilde{S}_1+}(x_1) \right] \left[ \sum_{\tilde{S}_2} \int_{-\infty}^{-J(\tilde{S}_2-1)} \delta x_2 p_{\tilde{S}_2-}(x_2) \right] + \\
& + 2 \int_{-2J}^0 \delta x \left[ \sum_{\tilde{S}_1} \int_{-J(\tilde{S}_1-1)}^{+\infty} \delta x_1 p_{\tilde{S}_1+}(x_1) \right] \left[ \sum_{\tilde{S}_2} \int_{-J(\tilde{S}_2+1)-x}^{-J(\tilde{S}_2-1)} \delta x_2 p_{\tilde{S}_2-}(x_2) \right] + \\
& + \int_0^{\infty} \delta x \left[ \sum_{\tilde{S}_1} \int_{-J(\tilde{S}_1-1)}^{+\infty} \delta x_1 p_{\tilde{S}_1-}(x_1) \right] \left[ \sum_{\tilde{S}_2} \int_{-J(\tilde{S}_2-1)}^{+\infty} \delta x_2 p_{\tilde{S}_2-}(x_2) \right] + \\
& + 2 \int_0^{2J} \delta x \left[ \sum_{\tilde{S}_1} \int_{-J(\tilde{S}_1-1)-x}^{-J(\tilde{S}_1-1)} \delta x_1 p_{\tilde{S}_1-}(x_1) \right] \left[ \sum_{\tilde{S}_2} \int_{-\infty}^{-J(\tilde{S}_2-1)} \delta x_2 p_{\tilde{S}_2-}(x_2) \right] - \\
& - \int_0^{2J} \delta x \left[ \sum_{\tilde{S}_1} \int_{-J(\tilde{S}_1-1)-x}^{-J(\tilde{S}_1-1)} \delta x_1 p_{\tilde{S}_1-}(x_1) \right] \left[ \sum_{\tilde{S}_2} \int_{-J(\tilde{S}_2-1)-x}^{-J(\tilde{S}_2-1)} \delta x_2 p_{\tilde{S}_2-}(x_2) \right] \quad (4.63)
\end{aligned}$$

Usant les definicions dels valors mitjos de les probabilitats condicionades (4.11-4.12) i treballant una mica l'expressió anterior, arribem a:

$$\begin{aligned}
P(+1) = & p_2 \left[ \sum_{\tilde{S}} \bar{p}_{\tilde{S}+} \right]^2 + 2p_1 \left[ \sum_{\tilde{S}} \bar{p}_{\tilde{S}+} \right] \left[ \sum_{\tilde{S}} \bar{p}_{\tilde{S}-} \right] + \\
& + 2 \left[ \sum_{\tilde{S}} \bar{p}_{\tilde{S}+} \right] \left[ \sum_{\tilde{S}_2} \int_{-2J}^0 \delta x \int_{-J(\tilde{S}_2+1)-x}^{-J(\tilde{S}_2-1)} \delta x_2 p_{\tilde{S}_2-}(x_2) \right] + \\
& p_0 \left[ \sum_{\tilde{S}} \bar{p}_{\tilde{S}-} \right]^2 + 2 \left[ \sum_{\tilde{S}} \bar{p}_{\tilde{S}-} \right] \left[ \sum_{\tilde{S}_1} \int_0^{2J} \delta x \int_{-J(\tilde{S}_1+1)-x}^{-J(\tilde{S}_1-1)} \delta x_1 p_{\tilde{S}_1-}(x_1) \right] - \\
& - \int_0^{2J} \delta x \left[ \sum_{\tilde{S}_1} \int_{-J(\tilde{S}_1-1)-x}^{-J(\tilde{S}_1-1)} \delta x_1 p_{\tilde{S}_1-}(x_1) \right]^2 \quad (4.64)
\end{aligned}$$

Si expandim els sumatoris, utilitzem la forma de les probabilitats condicionades  $p_{+-}(x)$  i  $p_{--}(x)$  de les equacions (4.33-4.34) i tenim en compte que  $\hat{p}_{+-} = \bar{p}_{+-}/(1-p_1)$  (equació (4.46)), obtenim l'expressió de  $P(+1)$  en funció dels valors mitjos de les probabilitats condicionades i de integrals de la funció  $q(x)$ :

$$\begin{aligned}
P(+1) = & p_2 (\bar{p}_{++} + \bar{p}_{-+})^2 + 2p_1 (\bar{p}_{++} + \bar{p}_{-+}) (\bar{p}_{+-} + \bar{p}_{--}) + \\
& + 2 (\bar{p}_{++} + \bar{p}_{-+}) \left[ \frac{\bar{p}_{+-}}{1-p_1} F_{++} + \int_{-2J}^0 \delta x \int_{-x}^{2J} \delta x_1 q(x_1) \right] + \\
& + p_0 (\bar{p}_{+-} + \bar{p}_{--})^2 + 2 (\bar{p}_{+-} + \bar{p}_{--}) \left[ \frac{\bar{p}_{+-}}{1-p_1} F_{-+} + \int_0^{2J} \delta x \int_{2J-x}^{2J} \delta x_1 q(x_1) \right] - \\
& - \left( \frac{\bar{p}_{+-}}{1-p_1} \right)^2 \tilde{F}_{++} - 2 \frac{\bar{p}_{+-}}{1-p_1} \int_0^{2J} \delta x \int_{2J-x}^{2J} \delta x_1 q(x_1) \int_{-x}^0 \delta x_2 - \\
& - \int_0^{2J} \delta x \left( \int_{2J-x}^{2J} \delta x_1 q(x_1) \right)^2 \quad (4.65)
\end{aligned}$$

on hem definim:

$$F_{-+} \equiv \int_0^{2J} \delta x \int_{-x}^0 \delta x_1 \quad (4.66)$$

$$(4.67)$$

$$F_{++} \equiv \int_{-2J}^0 \delta x \int_{-(2J+x)}^0 \delta x_1 \quad (4.68)$$

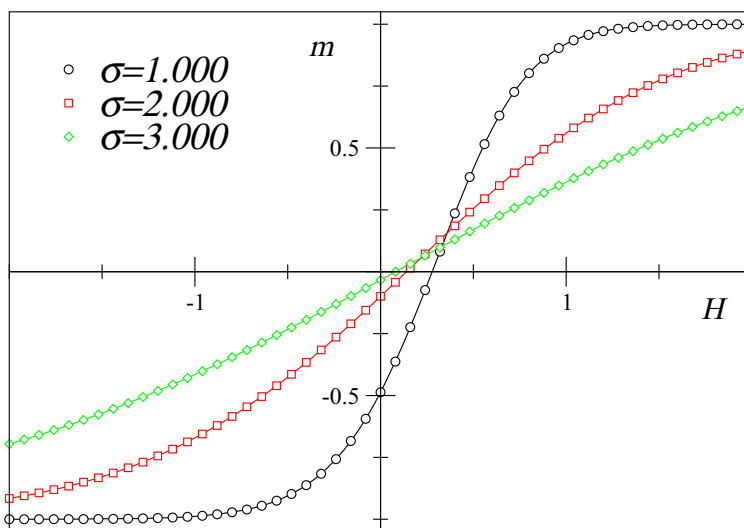
$$\tilde{F}_{++} \equiv \int_0^{2J} \delta x \left( \int_{-x}^0 \delta x_1 \right)^2 \quad (4.69)$$

$F_{lr}$  ens dóna la probabilitat que una parella de spins veïns, que són estables segons la dinàmica *1-spin-flip*, compleixin les condicions de patir un salt cooperatiu degut a la dinàmica *2-spin-flip*, on  $l$  i  $r$  ens donen l'estat del veí de la parella en una capa superior (“esquerra”) i en una capa inferior (“dreta”) respectivament. Per tant, les probabilitats  $F_{lr}$  tenen en compte els salts irreductibles de parelles de spins per la dinàmica *2-spin-flip*. Podem pensar-les com una extensió o generalització de les probabilitats  $p_n$  introduïdes en el capítol anterior per la dinàmica *1-spin-flip*. Com que la dinàmica *2-spin-flip* també inclou la dinàmica *1-spin-flip*, lògicament les quantitats  $p_n$  també apareixen en els càlculs fets amb aquesta dinàmica més general.

$\tilde{F}_{++}$  ens dóna la probabilitat que les dues parelles que formen un triplet de spins compleixin les condicions de patir un salt cooperatiu irreductible amb la dinàmica *2-spin-flip* quan els dos veïns del triplet estan en l'estat  $+1$

Obtenim  $P(+1)$  calculant numèricament les integrals que necessitem. A partir de l'equació (4.13) podem trobar la corba d'imantació per la branca inferior del cicle d'histeresi. Encara que no hem escrit explícitament la dependència amb el camp extern, aquesta sempre ha estat present. Recordem que hem definit  $\delta x \equiv$

$dx f(x - H)$ . A la figura 4.6 es mostren corbes d'imantació  $m(H)$  corresponents a la branca inferior del cicle d'histèresi per diferents valors de la quantitat de desordre  $\sigma$ . Les corbes obtingudes són sempre contínues i derivables per tots els valors de  $\sigma$ . Com esperàvem no tenim transició fora de l'equilibri en el RFIM a  $T = 0$  sobre una xarxa unidimensional amb la dinàmica *2-spin-flip*.



**Figura 4.6:** Branca inferior del cicle d'histèresi per  $z = 2$  i diferents valors de desordre. Les línies representen la solució exacta de les equacions i els símbols corresponen a simulacions numèriques fetes sobre grafs aleatoris de mida  $N = 10^4$  promitjant sobre  $2 \cdot 10^2$  realitzacions diferents de desordre.

## 4.5 Solució exacte per la xarxa de Bethe amb connectivitat $z = 3$

Tal i com s'ha explicat a la introducció, el comportament d'equilibri a  $T = 0$  del RFIM sobre una xarxa de Bethe amb  $z = 3$  presenta una transició induïda per desordre. En canvi aquest mateix model no presenta transició induïda per desordre fora de l'equilibri quan considerem que el sistema evoluciona amb una dinàmica metastable *1-spin-flip*. Aquesta peculiaritat podria qüestionar la conjectura que el punt crític fora de l'equilibri i el punt crític de l'equilibri pertanyin a la mateixa classe d'universalitat i estiguin controlats pels mateixos punts fixos.

En aquesta secció intentarem estudiar l'existència de transició de fase induïda per desordre en el RFIM definit sobre una xarxa de Bethe  $z = 3$  quan aquest relaxa amb la dinàmica metastable *2-spin-flip*. El càlcul del cicle d'histèresi amb aquesta dinàmica és bastant més complicat que en el cas unidimensional i ens centrarem en calcular els promitjos de les probabilitats condicionades  $\bar{p}_{\tilde{S}S}$  que ja ens permetran estudiar l'existència de transició.



Considerant l'equació (4.9) pel cas  $z = 3$  es poden trobar les sis equacions auto-consistents per les sis probabilitats condicionades  $p_{\tilde{S}S}(x)$ , que corresponen als casos  $\tilde{S} = -2, 0, +2$  i  $S = \pm 1$ . Per obtenir aquestes equacions necessitem les ràtios de transició  $W_{\{\tilde{S}_1|(S_1, S_2, S) \rightarrow (\tilde{S}, S)|-1\}}(x_1, x_2, x)$ . Aquestes ràtios es poden derivar considerant totes les possibles transicions de dues parelles formades per un spin i els seus dos veïns. Aquestes ràtios de transició delimiten regions en un gràfic tridimensional els eixos del qual són els camps locals  $(x_1, x_2, x)$ . Aquestes regions es caracteritzen per l'estat estable dels spins  $(S_1, S_2, S)$  en funció dels seus camps locals. Seria una extensió a tres dimensions de la figura 4.3 i estan relacionades amb les ràtios  $\tilde{W}$  utilitzades a la secció anterior per calcular la imantació,

A continuació escrivim les ràtios utilitzant les funcions  $\theta[\dots]$  definides anteriorment:

$$\begin{aligned} W_{\{\tilde{S}_1|(-1, -1, -1) \rightarrow (-2, +1)|-1\}}(x_1, x_2, x) &= \\ &= \theta[x > 3J]\theta[x_1 < -J(\tilde{S}_1 + 1)]\theta[x_2 < -J(\tilde{S}_2 + 1)] \quad (4.70) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} W_{\{\tilde{S}_1|(-1, -1, -1) \rightarrow (-2, -1)|-1\}}(x_1, x_2, x) &= \\ &= \theta[x < J]\theta[x_1 < -J(\tilde{S}_1 - 1)]\theta[x_2 < -J(\tilde{S}_2 - 1)] + \\ &+ \theta[J < x < 3J]\theta[x_1 < -J(\tilde{S}_1 - 2) - x]\theta[x_2 < -J(\tilde{S}_2 - 2) - x] \quad (4.71) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} W_{\{\tilde{S}_1|(-1, -1, -1) \rightarrow (0, +1)|-1\}}(x_1, x_2, x) &= \\ &= \theta[x > 3J] \left\{ \theta[-J(\tilde{S}_1 + 1) < x_1 < -J(\tilde{S}_1 - 1)]\theta[x_2 < -J(\tilde{S}_2 + 1)] + \right. \\ &\quad \left. + \theta[x_1 < -J(\tilde{S}_1 + 1)]\theta[-J(\tilde{S}_2 + 1) < x_2 < -J(\tilde{S}_2 - 1)] \right\} + \\ &+ \theta[J > x > 3J] \left\{ \theta[-J(\tilde{S}_1 - 2) - x < x_1 < -J(\tilde{S}_1 - 1)]\theta[x_2 < -J(\tilde{S}_2 + 1)] + \right. \\ &\quad \left. + \theta[x_1 < -J(\tilde{S}_1 + 1)]\theta[-J(\tilde{S}_2 - 2) - x < x_2 < -J(\tilde{S}_2 - 1)] \right\} \quad (4.72) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} W_{\{\tilde{S}_1|(-1, -1, -1) \rightarrow (2, +1)|-1\}}(x_1, x_2, x) &= \theta[x > 3J] \times \\ &\quad \times \theta[-J(\tilde{S}_1 + 1) < x_1 < -J(\tilde{S}_1 - 1)]\theta[-J(\tilde{S}_2 + 1) < x_2 < -J(\tilde{S}_2 - 1)] + \\ &\quad + \theta[J > x > 3J] \times \\ &\quad \times \left\{ \theta[-J(\tilde{S}_1 + 1) < x_1 < -J(\tilde{S}_1 - 1)]\theta[-J(\tilde{S}_2 - 2) - x < x_2 < -J(\tilde{S}_2 - 1)] + \right. \\ &\quad + \theta[-J(\tilde{S}_1 - 2) - x < x_1 < -J(\tilde{S}_1 - 1)]\theta[-J(\tilde{S}_2 + 1) < x_2 < -J(\tilde{S}_2 - 1)] - \\ &\quad \left. - \theta[-J(\tilde{S}_1 - 2) - x < x_1 < -J(\tilde{S}_1 - 1)]\theta[-J(\tilde{S}_2 - 2) - x < x_2 < -J(\tilde{S}_2 - 1)] \right\} \quad (4.73) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
W_{\{\tilde{S}_1|(+1,-1,-1)\rightarrow(0,-1)|-1\}}(x_1, x_2, x) &= \\
&= \theta[-J < x < +J]\theta[x_1 > -J(\tilde{S}_1 - 1)]\theta[x_2 < -J\tilde{S}_2 - x] + \\
&\quad + \theta[x < -J]\theta[x_1 > -J(\tilde{S}_1 - 1)]\theta[x_2 < -J(\tilde{S}_2 - 1)] \quad (4.74)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
W_{\{\tilde{S}_1|(+1,-1,-1)\rightarrow(0,+1)|-1\}}(x_1, x_2, x) &= \\
&= \theta[x > +J]\theta[x_1 > -J(\tilde{S}_1 - 1)]\theta[x_2 < -J(\tilde{S}_2 + 1)] \quad (4.75)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
W_{\{\tilde{S}_1|(+1,-1,-1)\rightarrow(2,+1)|-1\}}(x_1, x_2, x) &= \\
&= \theta[x > +J]\theta[x_1 > -J(\tilde{S}_1 - 1)]\theta[-J(\tilde{S}_2 + 1) < x_1 < -J(\tilde{S}_2 - 1)] + \\
&\quad + \theta[-J < x < +J]\theta[x_1 > -J(\tilde{S}_1 - 1)]\theta[-J\tilde{S}_2 - x < x_2 < -J(\tilde{S}_2 - 1)] \quad (4.76)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
W_{\{\tilde{S}_1|(-1,+1,-1)\rightarrow(0,-1)|-1\}}(x_1, x_2, x) &= \\
&= \theta[-J < x < +J]\theta[x_1 < -J\tilde{S}_1 - x]\theta[x_2 > -J(\tilde{S}_2 - 1)] + \\
&\quad + \theta[x < -J]\theta[x_1 < -J(\tilde{S}_1 - 1)]\theta[x_2 > -J(\tilde{S}_2 - 1)] \quad (4.77)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
W_{\{\tilde{S}_1|(-1,+1,-1)\rightarrow(0,+1)|-1\}}(x_1, x_2, x) &= \\
&= \theta[x > +J]\theta[x_1 < -J(\tilde{S}_1 + 1)]\theta[x_2 > -J(\tilde{S}_2 - 1)] \quad (4.78)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
W_{\{\tilde{S}_1|(-1,+1,-1)\rightarrow(2,+1)|-1\}}(x_1, x_2, x) &= \\
&= \theta[x > +J]\theta[-J(\tilde{S}_1 + 1) < x_1 < -J(\tilde{S}_1 - 1)]\theta[x_2 > -J(\tilde{S}_2 - 1)] + \\
&\quad + \theta[-J < x < +J]\theta[-J\tilde{S}_1 - x < x_1 < -J(\tilde{S}_1 - 1)]\theta[x_2 > -J(\tilde{S}_2 - 1)] \quad (4.79)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
W_{\{\tilde{S}_1|( +1,+1,-1)\rightarrow(+2,-1)|-1\}}(x_1, x_2, x) &= \\
&= \theta[x < -J]\theta[x_1 > -J(\tilde{S}_1 - 1)]\theta[x_2 > -J(\tilde{S}_2 - 1)] \quad (4.80)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
W_{\{\tilde{S}_1|( +1,+1,-1)\rightarrow(+2,+1)|-1\}}(x_1, x_2, x) &= \\
&= \theta[x > -J]\theta[x_1 > -J(\tilde{S}_1 - 1)]\theta[x_2 > -J(\tilde{S}_2 - 1)] \quad (4.81)
\end{aligned}$$

A partir d'aquestes ràtios i de l'equació (4.9) particularitzada pel cas  $z = 3$  podem obtenir les sis expressions per les probabilitats condicionades  $p_{\tilde{S},S}(x)$  que formen un sistema d'equacions integrals acoblades i no lineals. La dependència d'aquestes probabilitats condicionals amb el camp local  $x$  es poden definir a trossos de manera anàloga a com hem fet pel cas  $z = 2$ . Aquest cas, a diferència del cas

$z = 2$ , presenta varies funcions no trivials de  $x$  definides en els intervals  $[-J, J]$  i  $[J, 3J]$ . Podem escriure la forma general de les probabilitats condicionals com:

$$\begin{aligned}
p_{+,+}(x) &= \theta(-J < x < J)r_2(x) + \theta(J < x < 3J)q_2(x) + \theta(x > 3J)\hat{p}_{+,+} \\
p_{0,+}(x) &= \theta(J < x < 3J)q_1(x) + \theta(x > 3J)\hat{p}_{0,+} \\
p_{-,+}(x) &= \theta(x > 3J)\hat{p}_{-,+} \\
p_{+,-}(x) &= \theta(x < -J)\hat{p}_{+,-} \\
p_{0,-}(x) &= \theta(x < -J)\hat{p}_{0,-} + \theta(-J < x < J)r_1(x) \\
p_{-,-}(x) &= \theta(x < J)\hat{p}_{-,-} + \theta(-J < x < 3J)q_0(x)
\end{aligned} \tag{4.82}$$

on les expressions per les sis constants  $\hat{p}_{\alpha\alpha}$  i les cinc funcions  $q_0(x), q_1(x), q_2(x)$  i  $r_1(x)$  i  $r_2(x)$ , són:

$$\hat{p}_{+,+} = \left[ \sum_{\tilde{s}} \int_{-J(\tilde{s}+1)}^{-J(\tilde{s}-1)} \delta x p_{\tilde{s},-}(x) + \sum_{\tilde{s}} \int_{-J(\tilde{s}-1)}^{\infty} \delta x p_{\tilde{s},+}(x) \right]^2 \tag{4.83}$$

$$\begin{aligned}
\hat{p}_{0,+} &= 2 \left[ \sum_{\tilde{s}} \int_{-\infty}^{-J(\tilde{s}+1)} \delta x p_{\tilde{s},-}(x) \right] \times \\
&\quad \times \left[ \sum_{\tilde{s}} \int_{-J(\tilde{s}+1)}^{-J(\tilde{s}-1)} \delta x p_{\tilde{s},-}(x) + \sum_{\tilde{s}} \int_{-J(\tilde{s}-1)}^{\infty} \delta x p_{\tilde{s},+}(x) \right]
\end{aligned} \tag{4.84}$$

$$\hat{p}_{-,+} = \left[ \sum_{\tilde{s}} \int_{-\infty}^{-J(\tilde{s}+1)} \delta x p_{\tilde{s},-}(x) \right]^2 \tag{4.85}$$

$$\hat{p}_{+,-} = \left[ \sum_{\tilde{s}} \int_{-J(\tilde{s}-1)}^{\infty} \delta x p_{\tilde{s},+}(x) \right]^2 \tag{4.86}$$

$$\hat{p}_{0,-} = 2 \left[ \sum_{\tilde{s}} \int_{-\infty}^{-J(\tilde{s}-1)} \delta x p_{\tilde{s},-}(x) \right] \left[ \sum_{\tilde{s}} \int_{-J(\tilde{s}-1)}^{\infty} \delta x p_{\tilde{s},+}(x) \right] \tag{4.87}$$

$$\hat{p}_{-,-} = \left[ \sum_{\tilde{s}} \int_{-\infty}^{-J(\tilde{s}-1)} \delta x p_{\tilde{s},-}(x) \right]^2 \tag{4.88}$$

$$\begin{aligned}
q_2(x) = & \left[ \sum_{\tilde{S}} \int_{-J(\tilde{S}-2)-x}^{-J(\tilde{S}-1)} \delta x_1 p_{\tilde{S},-}(x_1) \right] \times \\
& \times \left[ 2 \sum_{\tilde{S}} \int_{-J(\tilde{S}+1)}^{-J(\tilde{S}-1)} \delta x_1 p_{\tilde{S},-}(x_1) - \sum_{\tilde{S}} \int_{-J(\tilde{S}-2)-x}^{-J(\tilde{S}-1)} \delta x_1 p_{\tilde{S},-}(x_1) \right] + \\
& + \left[ \sum_{\tilde{S}} \int_{-J(\tilde{S}-1)}^{\infty} \delta x_1 p_{\tilde{S},+}(x_1) \right] \times \\
& \times \left[ 2 \sum_{\tilde{S}} \int_{-J(\tilde{S}+1)}^{-J(\tilde{S}-1)} \delta x_1 p_{\tilde{S},-}(x_1) + \sum_{\tilde{S}} \int_{-J(\tilde{S}-1)}^{\infty} \delta x_1 p_{\tilde{S},+}(x_1) \right] \quad (4.89)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
q_1(x) = & 2 \left[ \sum_{\tilde{S}} \int_{-\infty}^{-J(\tilde{S}+1)} \delta x_1 p_{\tilde{S},-}(x_1) \right] \times \\
& \times \left[ \sum_{\tilde{S}} \int_{-J(\tilde{S}-2)-x}^{-J(\tilde{S}-1)} \delta x_1 p_{\tilde{S},-}(x_1) + \sum_{\tilde{S}} \int_{-J(\tilde{S}-1)}^{\infty} \delta x_1 p_{\tilde{S},+}(x_1) \right] \quad (4.90)
\end{aligned}$$

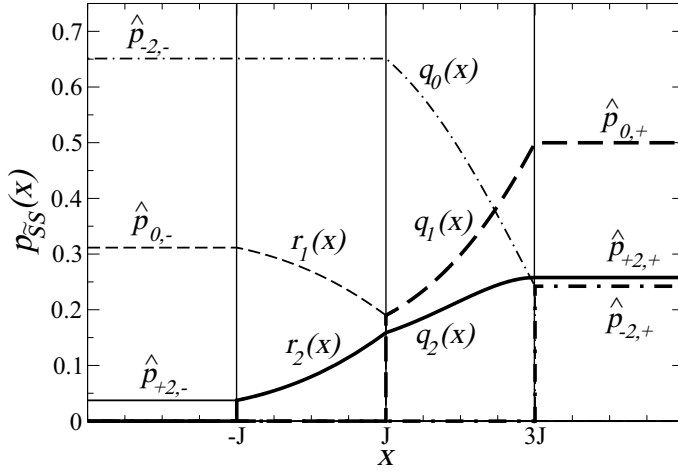
$$q_0(x) = \left[ \sum_{\tilde{S}} \int_{-\infty}^{-J(\tilde{S}-2)-x} \delta x_1 p_{\tilde{S},-}(x_1) \right]^2 \quad (4.91)$$

$$\begin{aligned}
r_2(x) = & 2 \left[ \sum_{\tilde{S}} \int_{-J\tilde{S}-x}^{-J(\tilde{S}-1)} \delta x_1 p_{\tilde{S},-}(x_1) \right] \left[ \sum_{\tilde{S}} \int_{-J(\tilde{S}-1)}^{\infty} \delta x_1 p_{\tilde{S},+}(x_1) \right] + \\
& + \left[ \sum_{\tilde{S}} \int_{-J(\tilde{S}-1)}^{\infty} \delta x_1 p_{\tilde{S},+}(x_1) \right]^2 \quad (4.92)
\end{aligned}$$

$$r_1(x) = 2 \left[ \sum_{\tilde{S}} \int_{-\infty}^{-J\tilde{S}-x} \delta x_1 p_{\tilde{S},-}(x_1) \right] \left[ \sum_{\tilde{S}} \int_{-J(\tilde{S}-1)}^{\infty} \delta x_1 p_{\tilde{S},+}(x_1) \right] \quad (4.93)$$

D'aquestes expressions es poden trobar les relacions de continuïtat que es mostren a la figura 4.7. A més, com que les probabilitats condicionades han de complir la condició de normalització:

$$\sum_{\tilde{S}, S} p_{\tilde{S}, S}(x) \quad \forall x, \quad (4.94)$$



**Figura 4.7:** Probabilitats condicionals  $p_{\bar{S}S}(x)$  en funció del camp local  $x$  per  $z = 3$  ( $H = 0.4$  i  $\sigma = 1.1$ ). La suma de probabilitats es igual a la unitat en tots els intervals. Les zones on les funcions no varien en l'interval corresponen a les constants  $\hat{p}_{\bar{S}S}$  que, com les funcions en els intervals  $[-J, J]$  i  $[J, 3J]$ , estan definides en les equacions (4.82).

podem escriure les següents relacions per les constants i funcions que acabem de calcular:

$$\begin{aligned}
 \hat{p}_{+2,+} + \hat{p}_{0,+} + \hat{p}_{-2,+} &= 1 \\
 \hat{p}_{-2,-} + \hat{p}_{0,-} + \hat{p}_{+2,-} &= 1 \\
 q_0(x) + q_1(x) + q_2(x) &= 1 \\
 \hat{p}_{-2,-} + r_1(x) + r_2(x) &= 1.
 \end{aligned} \tag{4.95}$$

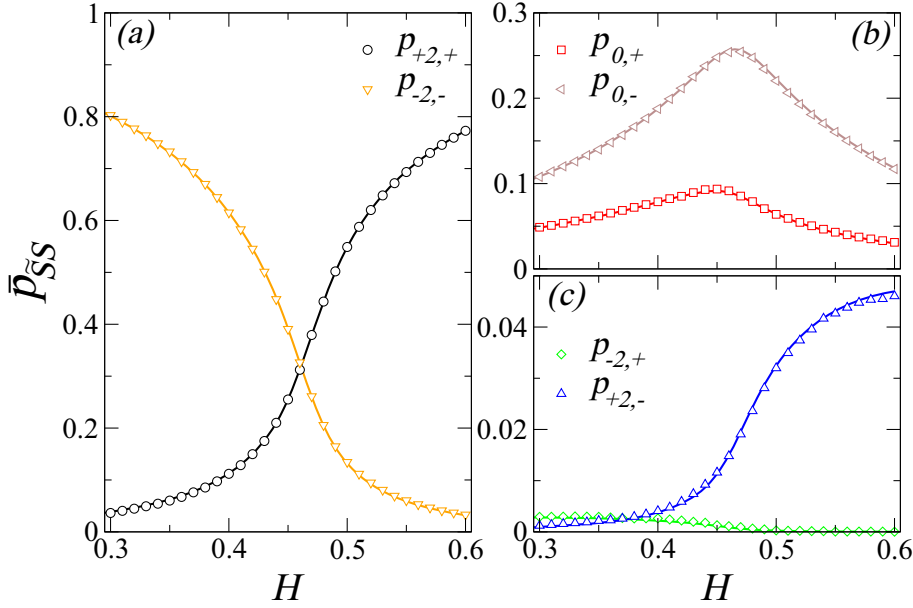
Aquestes condicions introdueixen lligams, i per tant només quatre constants i tres funcions seran independents. A diferència del cas  $z = 2$ , pel cas  $z = 3$  no és possible plantejar una solució analítica del sistema d'equacions integrals i l'hem solucionat mitjançant un mètode iteratiu. Iniciem el procés d'iteració amb uns valors inicials de  $\hat{p}_{-2,-} = 1$ ,  $q_0(x) = 1$ ,  $\hat{p}_{-2,+} = 1$  i la resta de funcions i constants iguals a zero. Els "nous" valors de  $p_{\bar{S}S}(x)$  els obtindrem calculant les integrals<sup>2</sup> dels termes de la dreta de les equacions (4.83-4.93) a partir dels valors "vells". Considerarem que hem convergit al conjunt de funcions  $\{p_{\bar{S}S}(x)\}$  que són solució de les equacions auto-consistents quan

$$\max |p_{\bar{S}S}(x)^{\text{nous}} - p_{\bar{S}S}(x)^{\text{vells}}| < 10^{-4}. \tag{4.96}$$

Per certs valors de  $\sigma$  i rang de valors del camp extern  $H$  aquest sistema d'equacions presenta varies solucions, és a dir varis conjunts de funcions  $\{p_{\bar{S}S}(x)\}$  que permeten que les equacions auto-consistents siguin satisfetes. Quan estem en la situació en que tenim varies solucions, només podrem trobar les solucions que són estables i per tant hi podem convergir iterativament. A part de la solució que s'obté a iniciant el procés d'iteració amb els valors inicials indicats prèviament obtenim una altra solució començant el procés iteratiu amb els valors inicials  $\hat{p}_{+2,-} = 1$ ,  $r_2(x) = 1$ ,  $q_2(x) = 1$ ,  $\hat{p}_{+2,+} = 1$  i la resta de constants i funcions iguals a zero.

<sup>2</sup>Les integrals es fan numèricament utilitzant la regla de Simpson per el càlcul numèric d'integrals.

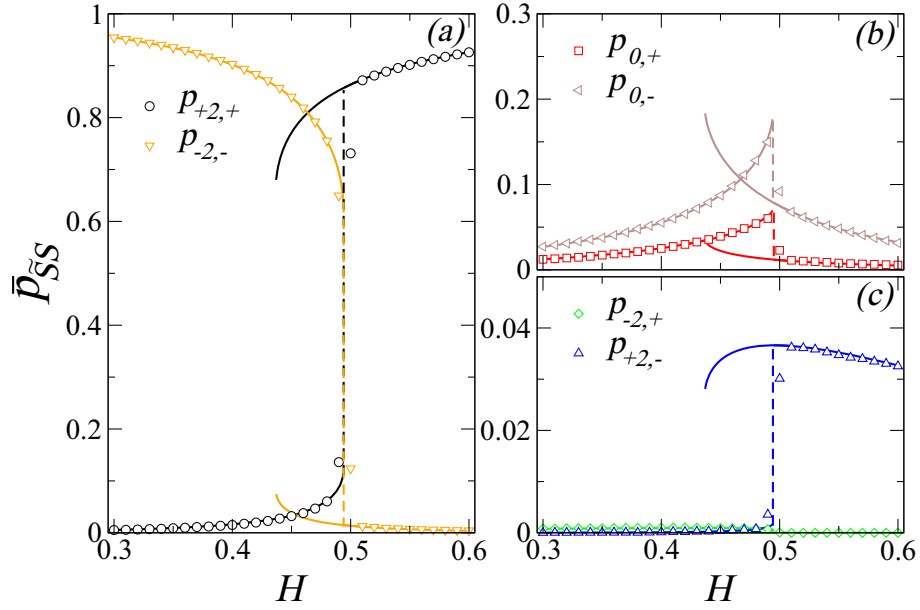
A partir de la solució del sistema d'equacions acoblades  $\{p_{\tilde{S},S}(x)\}$  és fàcil calcular les probabilitats mitjanes  $\bar{p}_{\tilde{S},S}(x)$ . Trobem que el comportament canvia dràsticament al valor crític de desordre  $\sigma_c$ . Per desordres grans, el sistema d'equacions té una única solució i les probabilitats condicionals promitjades  $\bar{p}_{\tilde{S},S}$  són funcions contínues del camp aplicat, com es pot veure a la figura 4.8.



**Figura 4.8:** Probabilitats condicionals en funció del camp aplicat per  $z = 3$  en el règim de molt desordre  $\sigma = 1.1$ : (a)  $\bar{p}_{+2,+}$  i  $\bar{p}_{-2,-}$ , (b)  $\bar{p}_{0,+}$  i  $\bar{p}_{0,-}$ , (c)  $\bar{p}_{-2,+}$  i  $\bar{p}_{+2,-}$  (Noteu els canvis d'escala). Totes les probabilitats són funcions contínues amb  $H$ ;  $\bar{p}_{+2,+}$ ,  $\bar{p}_{-2,-}$ ,  $\bar{p}_{-2,+}$  i  $\bar{p}_{+2,-}$  varien monòtonament mentre que  $\bar{p}_{0,+}$  i  $\bar{p}_{0,-}$  presenten un màxim. Les línies representen la solució exacta de les equacions auto-consistent i els símbols corresponen a simulacions numèriques fetes sobre grafs aleatoris de mida  $N = 10^5$  promitjant sobre  $2 \cdot 10^5$  realitzacions diferents de desordre.

Per desordres baixos existeix un rang de valors del camp extern que ens permeten trobar dues solucions per les probabilitats condicionades, que provocaran que les quantitats  $\{p_{\tilde{S},S}(x)\}$  presentin varies branques. Les probabilitats condicionals promitjades mostren un salt discontinu al augmentar  $H$  tal com es mostra a la figura 4.9 i són un símptoma evident de l'existència d'una transició de fase fora de l'equilibri. Anàlogament al que passa amb la quantitat  $P_l^*$  en la solució exacte de la dinàmica *1-spin-flip* només la branca inferior tindrà sentit físic, i la solució sense sentit físic estarà connectada a la solució “física” amb un conjunt de solucions que no es poden trobar a partir del mètode iteratiu degut a que són inestables. És important remarcar que tots aquests resultats corresponen a la branca inferior del cicle d'histèresi, els resultats per la branca superior es poden obtenir a partir de les propietats de simetria dels cicles d'histèresi.

El comportament descrit fins ara és el característic d'una transició de fase fora de l'equilibri induïda per desordre, i com ja hem comentat les quantitats  $\bar{p}_{\tilde{S},S}(x)$



**Figura 4.9:** Les probabilitats condicionals promitjades en funció del camp aplicat per  $z = 3$  en el règim de poc desordre  $\sigma = 0.9$ : (a)  $\bar{p}_{+2,+}$  i  $\bar{p}_{-2,-}$ , (b)  $\bar{p}_{0,+}$  i  $\bar{p}_{0,-}$ , (c)  $\bar{p}_{-2,+}$  i  $\bar{p}_{+2,-}$  (Noteu els canvis d'escala). Les probabilitats presenten un comportament singular, amb salts i discontinuïtats, per certs valors del camp aplicat. Les línies representen la solució de les equacions auto-consistent (tant per la branca amb sentit físic com per la branca sense sentit físic). Els símbols corresponen a simulacions numèriques fetes sobre grafs aleatoris de mida  $N = 10^5$  promitjant sobre  $2 \cdot 10^5$  realitzacions diferents de desordre. Tenim efectes de mida finita que són visibles en les regions properes a la transició.

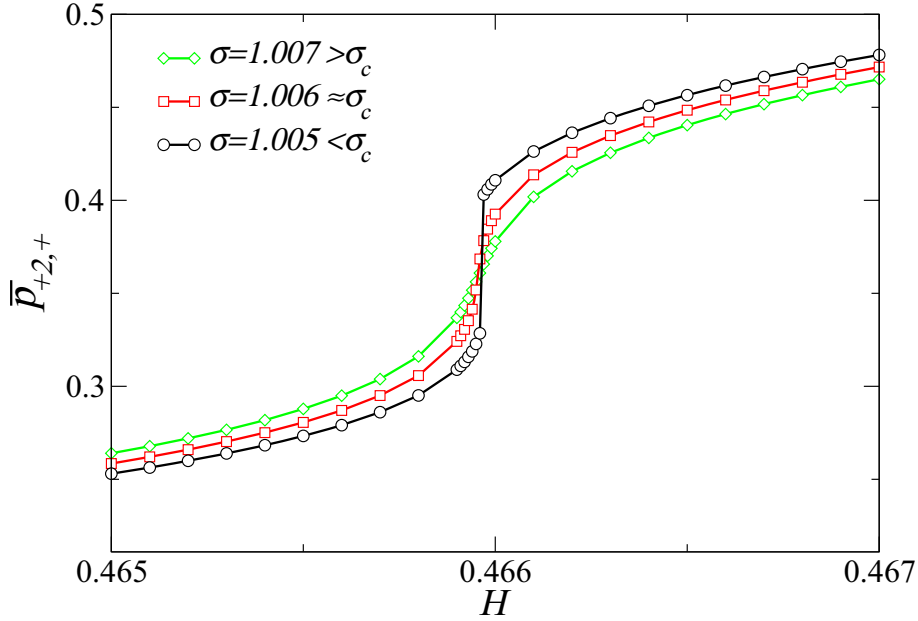
tenen un comportament semblant al de la quantitat  $P_l^*(H)$  relacionada amb la dinàmica *1-spin-flip*.

El valor crític de desordre que separa els dos comportaments és  $\sigma_c \approx 1.006$ , tal i com es pot veure del comportament de  $\bar{p}_{+2,+}(H)$  a la figura 4.10.

## 4.6 Comparació amb les simulacions i discussió dels resultats

Presentem l'estudi numèric del model que s'ha realitzat en paral·lel per poder comparar amb els resultats analítics. Seguint el procediment estàndard [80, 99] hem representat les xarxes de Bethe amb grafs aleatoris amb connectivitat fixada. Les mides típiques que hem utilitzat són de  $N = 10^4 - 10^5$ , suficients per què els grafs aleatoris es comportin de forma equivalent a les xarxes de Bethe.

Per tal de computar la imantació  $m$  en funció del camp extern  $H$  utilitzem el procediment descrit a la secció 2.5. Per tant anem variant  $H$  amb una certa quantitat fixada  $\Delta H = \pm 0.01$  i per cada valor de camp extern  $H$  relaxem el sistema



**Figura 4.10:** Comportament de la probabilitat condicionada promig  $\bar{p}_{+2,+}(H)$  amb el desordre  $\sigma$  pel cas  $z = 3$  (només la branca amb sentit físic). El desordre crític és  $\sigma_c \simeq 1.006$ . El valor del camp crític és  $H_c \simeq 0.466$ .

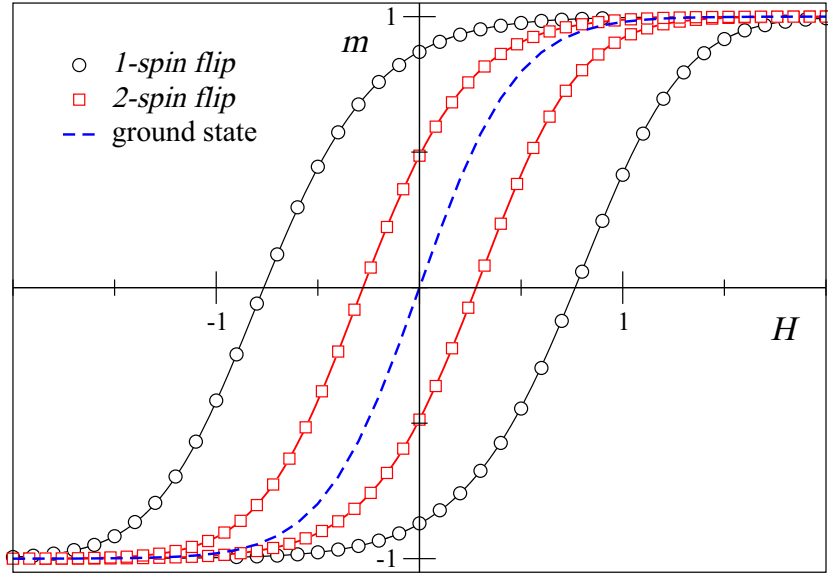
fins que totes les parelles siguin estables segons la dinàmica *2-spin-flip*. Utilitzem la configuració final que arribem després de relaxar per calcular la imantació  $m = \sum_{i=1}^N S_i/N$ .

També podem trobar numèricament els promitjos de les probabilitats condicionals  $\bar{p}_{\tilde{S}_i S_i}$ . Per fer-ho hem de relaxar el sistema en dos passos tal com s'indica gràficament a la figura 4.1. En el primer pas relaxem el sistema amb un spin i els seus  $z$  veïns clavats avall i en el segon pas desclavem els  $z$  veïns i realitzem la segona relaxació. Un cop acabat el procés de relaxació en dos passos hem d'analitzar l'estat final de cada branca que ens permetrà fer estadística dels ambients  $(\tilde{S}_i, S_i)$ . Per eliminar la dependència de la realització concreta de camps aleatoris  $\{h_i\}$  i de grafs promitgem els resultats sobre  $10^2 - 10^5$  realitzacions diferents de camps aleatoris i de grafs.

Una comparació dels resultats exactes i dels resultats de les simulacions de les probabilitats condicionals promitjades es mostren en la figura 4.5 pel cas  $z = 2$  i en les figures 4.8 i 4.9 pel cas  $z = 3$ . A la figura 4.6 es mostra la comparació dels resultats exactes i dels resultats de les simulacions per la imantació pel cas  $z = 2$ . La coincidència entre la teoria i les simulacions és bona.

Passem ara a la discussió dels resultats on analitzarem la influència de la dinàmica en la corba d'imantació  $m(H)$ . A la figura 4.11 es mostren els resultats exactes obtinguts amb les dinàmiques *1-spin-flip* i *2-spin-flip* pel cas  $z = 2$  (cadena unidimensional). Observem que l'amplada del cicle d'histeresi disminueix quan passem de la dinàmica *1-spin-flip* a la dinàmica *2-spin-flip* i que desapareix en la





**Figura 4.11:** Cicle d'histèresi,  $m(H)$ , per la cadena unidimensional usant les dinàmiques 1-i 2-*spin-flip*. Les línies corresponen als resultats exactes i els símbols als resultats de les simulacions amb  $N = 10^4$  i promitjades sobre  $10^2$  realitzacions de desordre. La línia discontinua és la corba d'imantació de l'equilibri. La quantitat de desordre és  $\sigma = 1.0$ .

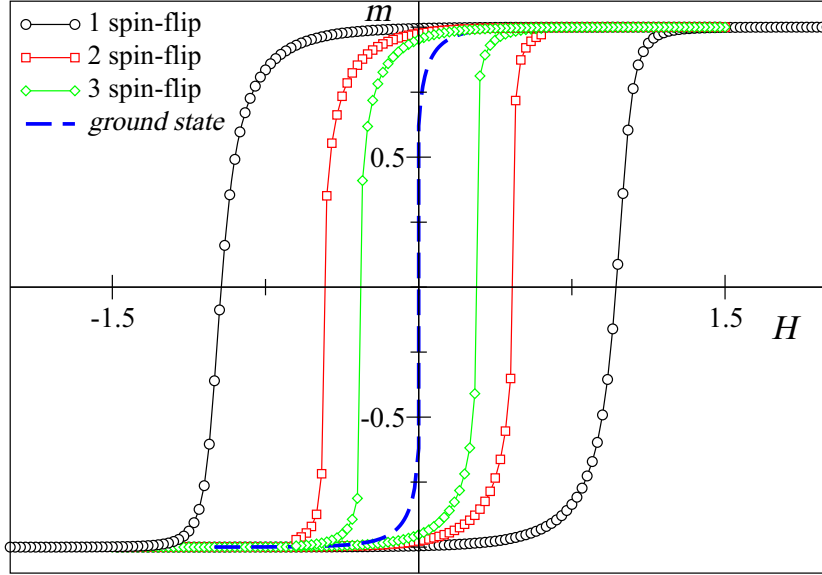
corba d'equilibri (la corba d'equilibri s'obté a partir de les equacions explicades a la secció 2.4.2.

Un efecte similar s'observa pel cas  $z = 3$  mostrat a la figura 4.12 on a més hem afegit la corba obtinguda a partir de simulacions fetes amb la dinàmica 3-*spin-flip*. Aquest efecte és molt comprensible des d'un punt de vista físic, si introduïm més cooperació en la dinàmica fem que el sistema pugui saltar barreres energètiques que abans no podia, permeten així un millor equilibrament i obtenir un comportament més proper al comportament d'equilibri.

Un resultat interessant d'aquest estudi és que el comportament peculiar de la histèresi que s'observa en una xarxa de Bethe amb connectivitat  $z = 3$  amb la dinàmica 1-*spin-flip* desapareix quan considerem dinàmiques més cooperatives. Tal i com es discuteix en la secció anterior, trobem una transició fora de l'equilibri quan usem la dinàmica 2-*spin-flip*. Es pot veure a la figura 4.12 que no només el cicle histèresi es fa més estret quan la dinàmica és més cooperativa, sinó que també es torna més abrupte; pel valor de desordre considerat, es mostra una discontinuïtat per les dinàmiques 2- i 3-*spin-flip* i per la corba d'equilibri, mentre que la histèresi presenta un comportament continu per la dinàmica 1-*spin-flip*.

Els valors crítics del desordre que separen el comportament continu del discontinu satisfan:

$$\sigma_c^{1SF} = 0 < \sigma_c^{2SF} \simeq 1.006 < \sigma_c^{EQ} \simeq 1.05, \quad (4.97)$$



**Figura 4.12:** Cicle d'histèresi ,  $m(H)$ , per una xarxa de Bethe amb  $z = 3$  usant les dinàmiques  $1$ -,  $2$ - i  $3$ -spin-flip. Hem pres el valor  $\sigma = 1.0$  i les simulacions s'han dut a terme sobre un sistema de mida  $N = 10^5$ , i hem promitjat sobre  $10^2$  realitzacions diferents de desordre. Destacar les discontinuïtats per les dinàmiques  $2$ - i  $3$ -spin-flip i per l'equilibri, i el comportament continu per la dinàmica  $1$ -spin-flip.

on els subíndexs  $1SF$ ,  $2SF$ , i  $EQ$  es refereixen a les dinàmiques  $1$ -,  $2$ -spin-flip i a l'equilibri respectivament. El valor  $\sigma_c^{EQ}$  es troba numèricament solucionant les equacions explicades a la secció 2.4.2 pel cas  $T = 0$  per diferents valors de desordre. Un conjunt similar d'inigualtats es van trobar en l'estudi numèric del RFIM en una xarxa cúbica (veure taula 2.1), amb un valor diferent de zero per  $\sigma_c^{1SF}$  [75]. Això ens suggereix que al augmentar la cooperació en la dinàmica del RFIM a  $T = 0$ , a part de reduir el cicle d'histèresi, afavorim el comportament col·lectiu dels spins. D'acord amb aquest fet, el valor crític de desordre per sobre del qual aquestes correlacions desapareixen augmenta al augmentar la cooperació en la dinàmica. L'absència de transició en el cas  $z = 3$  amb la dinàmica  $1$ -spin-flip no sembla tenir un significat físic rellevant.

Tal i com s'ha explicat a la secció 2.5 podem augmentar la cooperació en la dinàmica utilitzant una dinàmica  $k$ -spin-flip [75, 94] en la qual només visitem estats que són metastables segons aquesta dinàmica  $k$ -spin-flip ( $k$ -metastable). La idea principal és que el sistema salta d'un estat  $k$ -metastable a un altre de proper sempre que el primer es torna inestable degut a que qualsevol subconjunt de  $k$  o menys spins volen saltar per disminuir l'energia. Generalitzar formalment els càlculs analítics amb aquestes dinàmiques més cooperatives sobre les xarxes de Bethe és bastant directe. S'ha de tenir en consideració l'estabilitat dels spins de  $k'$  capes de la xarxa de Bethe amb  $k' \leq k$  i per tant és possible escriure formalment les equacions per trobar el cicle d'histèresi. Aquestes equacions involucren les configuracions dels spins de  $k$  capes diferents i les relacions de recurrència que

generalitzarien les de l'equació (4.15) requereixen les ràtios de transició pel canvi de configuració d'una cadena de  $k$  spins. Com ja s'ha comentat escriure les equacions formalment no és difícil, la dificultat està amb la derivació explícita de les ràtios de transició. És important adonar-se que si fóssim capaços de dur a terme aquests càlculs, en el límit  $k \rightarrow \infty$ , és a dir  $k$  tendint a la mida del sistema, s'haurien de recuperar les expressions recurrents per l'estat fonamental del RFIM a  $T = 0$  sobre xarxes de Bethe descrites en la secció 2.4.2.

## 4.7 Sumari i conclusions

En aquest estudi, hem obtingut la solució exacte del comportament de la histèresi del RFIM a  $T = 0$  en una xarxa de Bethe quan el conduïm amb un camp extern  $H$  i el sistema evoluciona amb una dinàmica metastable *2-spin-flip*. Aquesta solució generalitza els resultats obtinguts per la dinàmica *1-spin-flip* [80]. Ens hem centrat en el càlcul del cicle d'histèresi principal, en futurs estudis es poden intentar calcular altres propietats com els cicles parcials, els termes energètics o la distribució de la mida de les allaus.

Els resultats exactes obtinguts demostren la solidesa de la resposta fora de l'equilibri del RFIM sota un canvi de dinàmica [16]. Aquesta ja es va comprovar amb simulacions en el RFIM en una xarxa cúbica [75]. Hem trobat que per les xarxes amb connectivitat  $z \geq 3$  el sistema presenta un punt crític fora de l'equilibri que separa els règims de molt desordre, amb un cicle d'histèresi continu i allaus microscòpiques, d'un règim de poc desordre, amb una discontinuïtat en el cicle i amb la presència d'una allau macroscòpica. L'amplada del cicle d'histèresi principal i el valor crític de desordre depenen del grau de cooperació de la dinàmica, però l'escenari global no canvia. Tal i com s'esperava el punt crític en la dinàmica *2-spin-flip* pertany a la mateixa classe d'universalitat que el que s'obté amb la dinàmica *1-spin-flip* i el que s'obté en equilibri.

La solidesa de les característiques principals associades al comportament de la histèresi respecte la dinàmica utilitzada suggereix una organització gens trivial de l'escenari de l'energia. Per la cadena unidimensional s'ha demostrat, i conjecturat pel cas general, que el cicle d'histèresi principal del RFIM sota la dinàmica *1-spin-flip* és l'envolvent exterior de tots els estats 1-metastables en el diagrama  $m - H$  [101]. Un càlcul similar es podria realitzar per la dinàmica *2-spin-flip* i probablement es veuria que el cicle d'histèresi obtingut amb una dinàmica *k-spin-flip* són l'envolvent de tots els estats  $k$ -metastables. L'amplada del cicle d'histèresi disminueix a mesura que la dinàmica es fa més cooperativa, tal i com es pot veure per les dinàmiques *2-spin-flip* i *3-spin-flip*. Podem pensar que els estats metastables formen diferents envolvents, i l'envolvent  $k$  està inclòs dins l'envolvent  $(k - 1)$  i així successivament, fins que la histèresi desapareix i l'envolvent col·lapsa a la corba d'equilibri. Tal i com es discuteix a la referència [101], el salt discontinu associat a l'allau macroscòpica succeeix quan l'envolvent té una part que re-entra, llavors

un salt en la dinàmica *k-spin-flip* implica un salt en dinàmiques més cooperatives, però no necessàriament en dinàmiques menys cooperatives. El comportament peculiar pel model en una xarxa de Bethe amb  $z = 3$  es pot interpretar d'aquesta manera, ja que tenim transició per la dinàmica *2-spin-flip*, per la dinàmica *3-spin-flip* i per l'equilibri, però no tenim transició per la dinàmica *1-spin-flip*.

# Capítol 5

## Generalització del desordre: el RFIM diluït

### 5.1 Introducció

L'objectiu d'aquest capítol és estudiar el RFIM diluït amb dinàmica metastable *1-spin-flip* a  $T = 0$ . Estem interessats en analitzar les conseqüències d'introduir una concentració  $c$  de vacants a la xarxa cúbica on definim el model i trobar les propietats del diagrama de fase  $\sigma - c$ , que estaran determinades per la interacció entre els dos tipus de desordre: els camps aleatoris i les vacants.

Un primer intent d'estudiar la influència de la dilució en aquest model el va realitzar ja fa alguns anys Tadic [106]. Però els resultats d'aquest treball han de ser considerats com a qualitius ja que només es van estudiar sistemes bidimensionals, i com ja s'ha comentat al capítol 1 el comportament dels sistemes bidimensionals ( $d = 2$ ) no està del tot clar [87, 88].

Volem estudiar el punt crític d'aquest model mitjançant simulacions numèriques. El paràmetre d'ordre que s'anul·la al punt crític és la mida de la discontinuïtat macroscòpica  $\Delta m$ . Però l'estudi d'aquesta quantitat amb simulacions numèriques no és fàcil ja que en els sistemes de mida finita és molt difícil fer la distinció entre una allau macroscòpica i una allau microscòpica. El paràmetre d'ordre obtingut a partir de simulacions numèriques només presenta unes bones propietats de FSS (*Finite Size Scaling*) quan els sistemes simulats són molt grans [86]. Treballs recents [90, 94] han mostrat com es pot localitzar el punt crític treballant amb sistemes de mida no tant gran. El mètode consisteix en detectar les anomenades allaus (saltos en la imantació) *spanning*, que són les allaus que involucren un conjunt de spins que s'estenen al llarg del sistema finit, per exemple en el cas d'un sistema cúbic, són allaus que s'estenen (percolen) des d'un cara a la oposada. Amb aquest mètode podem establir una classificació de totes les allaus segons el número de dimensions totals per les que percola cada allau. Per tant tindrem allaus *no-spanning*, *1d-spanning*, *2d-spanning* o *3d-spanning*. Els números mitjos

$N_1, N_2$  d'allaus  $1d$  i  $2d$ -spanning presenten un pic a un cert valor de  $\sigma$  que es va movent a l'esquerra al augmentar la mida del sistema  $L$  i tendeix a  $\sigma_c$  quan  $L \rightarrow \infty$ . Les dades numèriques es poden escalar tenint en compte la hipòtesi de FSS [90]

$$N_\alpha = L^\theta \tilde{N}_\alpha(uL^{1/\nu}) \quad (5.1)$$

on  $\alpha = 1, 2$ . L'exponent  $\nu = 1.2 \pm 0.1$  caracteritza la divergència de la longitud de correlació ( $\xi \sim (\sigma - \sigma_c)^{-\nu}$ ), mentre que  $\theta = 0.10 \pm 0.02$  caracteritza la divergència del número d'allaus crítiques. La variable d'escala  $u(\sigma)$  és analítica i mesura la distància al punt crític. Es pot aproximar amb una expansió de segon ordre,

$$u(\sigma) = \frac{\sigma - \sigma_c}{\sigma_c} + A \left( \frac{\sigma - \sigma_c}{\sigma_c} \right)^2 \quad (5.2)$$

amb  $\sigma_c = 2.21$  i  $A = -0.2$ . El comportament de les allaus  $3d$ -spanning és molt més complicat ja que n'hi ha de dos tipus: (i) allaus  $3d$ -spanning crítiques les quals es comporten com les allaus  $1d$ - i  $2d$ -spanning i (ii) les allaus  $3d$ -spanning subcrítiques les quals corresponen, en el límit termodinàmic, a la discontinuïtat  $\Delta m$ . L'anàlisi d'aquestes últimes es fa més difícil ja que requereix una tècnica de FSS doble. El nostre estudi es concentrarà en el comportament del número mig d'allaus  $N_1$  i  $N_2$  amb presència de vacants i proposarem una hipòtesi de FSS fent servir una variable d'escala  $u(\sigma, c)$  que ens permetrà estudiar tot el diagrama de fases  $\sigma - c$ .

A la secció 5.2, definirem el model i la dinàmica. A la secció 5.3 presentem els resultats numèrics obtinguts a partir de les simulacions numèriques. A la secció 5.4 proposem una hipòtesis de FSS i determinem la línia crítica. A la secció 5.5 proposem dues aproximacions per la variable d'escala  $u(\sigma, c)$ . A la secció 5.6 discutim la interacció entre les vacants i les allaus. Finalment, a la secció 5.7, resumim els resultats més rellevants que s'han obtingut.

## 5.2 Model i Simulacions

El RFIM diluït sobre una xarxa cúbica amb  $N$  llocs ( $N = L \times L \times L$ ) es defineix amb l'Hamiltonià:

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle ij \rangle} c_i c_j S_i S_j - \sum_i h_i c_i S_i - H \sum_i S_i c_i, \quad (5.3)$$

on  $S_i = \pm 1$  són les variables de spin,  $c_i = 0, 1$  ens indiquen si a la posició  $i$  de la xarxa hi ha una vacant ( $c_i = 0$ ) o no ( $c_i = 1$ ),  $\{h_i\}$  són els camps aleatoris que segueixen una distribució Gaussiana amb mitjana zero i desviació estàndard  $\sigma$  i  $H$  és el camp extern. El primer terme s'estén sobre totes les parelles de primers veïns. La disposició de les vacants en el sistema no varia amb el temps (desordre congelat) i es distribueixen aleatòriament dins la xarxa. La concentració es mesura amb  $c = 1 - \sum_i c_i / N$ .

La dinàmica metastable s'implementa tal i com s'ha explicat en el capítol 2. Considerem que el sistema està conduït externament amb el camp  $H$  el qual es incrementat des de  $-\infty$ , on el sistema es troba en la saturació negativa (tots els spins  $S_i = -1$ ), fins a  $+\infty$ , on el sistema es troba en la saturació positiva (tots els spins  $S_i = +1$ ). Els spins giren en funció de la regla de relaxació dinàmica,

$$S_i = \text{sign} \left( \sum_j S_j c_j + h_i + H \right) \quad (5.4)$$

on la suma s'estén sobre tots els primers veïns de  $S_i$ . Quan un spin gira, pot provocar una allau. Suposem que els spins inestables giren simultàniament fins que s'arriba a un nou estat metastable.

El cicle d'histèresi s'obté calculant la imantació

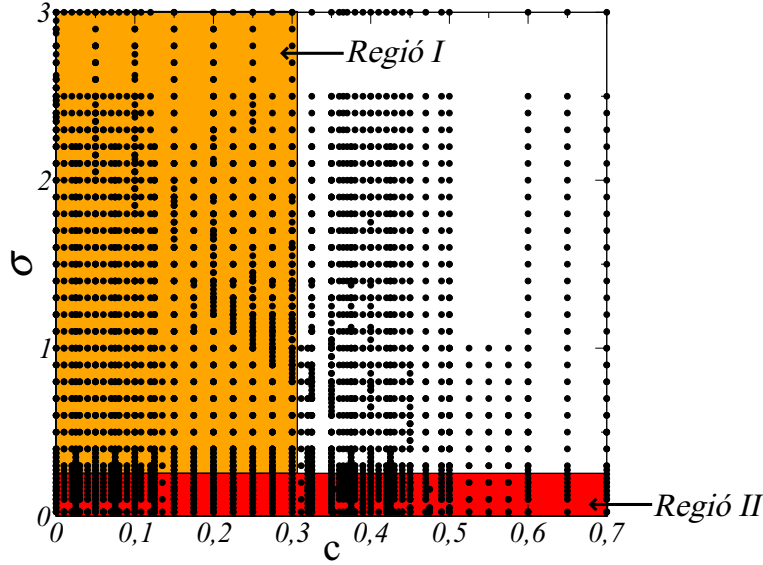
$$m = \sum_i S_i c_i / N \quad (5.5)$$

en funció del camp extern aplicat  $H$ . Totes les allaus que el sistema pateix al llarg de la branca inferior del cicle són enregistrades i classificades. Per classificar-les utilitzem el número de dimensions totals per les que percola cada una d'elles, i per fer-ho s'utilitzen uns vectors màscara tal com s'explica a la referència [90]. Ja s'ha explicat que les podem classificar en allaus *no spanning*, *1d-spanning*, *2d-spanning* i *3d-spanning*. En aquest estudi analitzarem el número d'allaus de cada tipus que percolen al menys al llarg d'una dimensió del sistema. Aquests valors  $N_1$ ,  $N_2$  i  $N_3$ , els quals depenen de  $L$ ,  $\sigma$  i  $c$  els trobarem fent promitjos sobre més de  $10^4$  realitzacions de desordre amb diferents camps aleatoris i posicionament de vacants. Estudiarem sistemes amb mides que van des de  $L = 8$  fins  $L = 64$  pels valors de  $\sigma$  i  $c$  que s'indiquen en el diagrama  $\sigma - c$  de la figura 5.1.

## 5.3 Resultats numèrics

L'evolució general del cicle d'histèresi promitjat en funció de  $\sigma$  i  $c$  es mostra a la figura 5.2. Es pot observar que es passa de cicles discontinus a cicles continus quan augmentem  $\sigma$  o  $c$ . També es pot observar que la imantació de saturació disminueix al augmentar la concentració de vacants  $c$ .

La figura 5.3 mostra el comportament del camp coercitiu  $\langle H_{coe} \rangle$  en funció de la concentració de vacants  $c$  per diferents valors de  $\sigma$ . Tal i com es pot veure,  $\langle H_{coe} \rangle$  disminueix al incrementar  $c$  i  $\sigma$ . El comportament de  $\langle H_{coe} \rangle$  en funció de  $c$  presenta un punt d'inflexió a la transició, tal i com es pot veure a la figura interior 5.3, la qual mostra la derivada numèrica de  $\langle H_{coe} \rangle$  respecte  $c$ . Aquest punt d'inflexió no existeix en el model sense dilució quan el camp coercitiu es representat en funció de  $\sigma$ . Aquesta característica, que pot ser d'interès per la determinació del punt crític en els experiments, està probablement relacionada



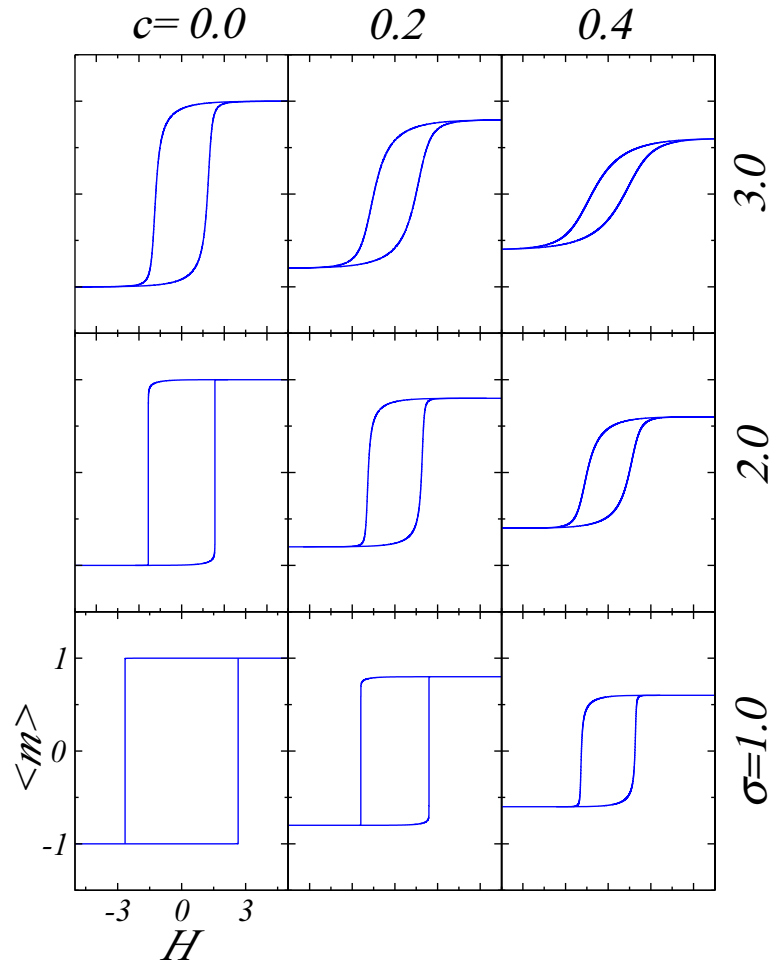
**Figura 5.1:** Coordenades dels punts estudiats amb simulacions numèriques en el diagrama  $\sigma - c$ . L'estudi de FSS fet a la secció 5.4 està realitzat en les regions I i II.

amb el fet que  $\langle H_{coe} \rangle$  és zero per  $c = 1$  i en canvi va a zero asimptòticament quan  $\sigma \rightarrow \infty$ .

La figura 5.4 mostra les distribucions de les mides d'allaus  $D(s; \sigma, c, L)$  en escala logarítmica (la mida  $s$  d'una allau és el nombre de spins que es giren) pels mateixos casos que per la figura 5.2. Els histogrames inclouen totes les allaus que percolen almenys al llarg d'una dimensió del sistema finit sense tenir en compte la classificació específica. El resultat qualitatiu que podem extreure d'aquesta figura és que les distribucions tipus llei de potències que obtenim al llarg de la línia crítica semblen tenir totes el mateix exponent independentment del valor de  $c$ . No es poden observar diferències rellevants quan comparem la transició induïda al canviar  $\sigma$  amb la transició induïda pel canvi de  $c$ . Sota la línia crítica les distribucions presenten un pic per valors grans de  $s$  que correspon a les allaus *1d*-, *2d*- i *3d-spanning*. Sobre la línia crítica les distribucions presenten un *cut-off* exponencial.

A la figura 5.5 es mostra el número mig d'allaus que percolen al llarg d'una, dues i tres dimensions en funció de  $\sigma$  per diferents valors de la concentració de vacants  $c$ . Es mostren els resultats des de  $c = 0$  (model no-diluït) fins  $c = 0.5$ . Les dades corresponen a un sistema de mida  $L = 16$ . La mateixa informació es mostra a a la figura 5.6 per un sistema de mida  $L = 48$ . El comportament per valors petits i intermitjos de la concentració de vacants és similar al comportament observat pel model sense dilució [90, 94]. Els promitjos  $N_1$  i  $N_2$  presenten un comportament amb forma de pic, en canvi  $N_3$  té un comportament més complex ja que presenta un pic a l'extrem d'una funció escaló. És important adonar-se que per  $L = 16$  l'alçada del pic per  $N_1(\sigma, c, L)$  i  $N_2(\sigma, c, L)$  sembla que disminueix quan s'incrementa  $c$ . Aquest comportament sembla anar desapareixent per sistemes més





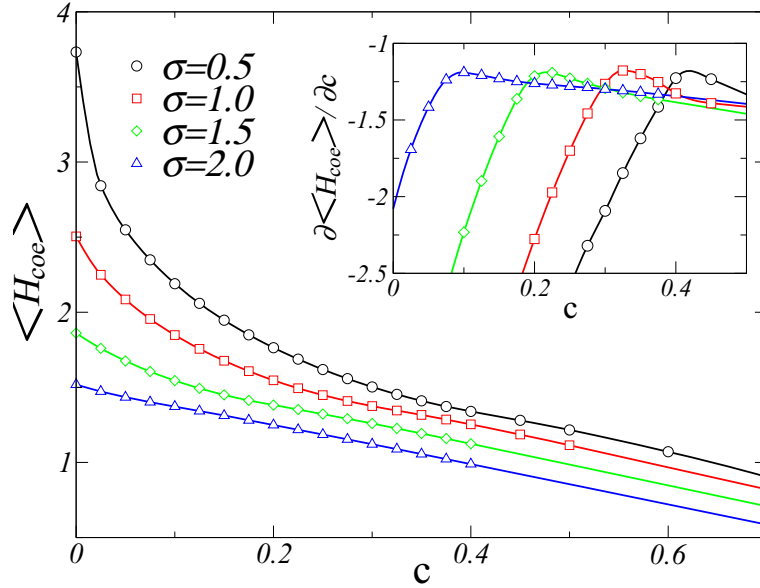
**Figura 5.2:** Cicles d'histèresi promitjats corresponents a un sistema de mida  $L = 32$  per diferents valors de  $\sigma$  i  $c$ .

grans ( $L = 48$ ). Per tant possiblement sigui un efecte de mida finita.

Per concentracions més altes ( $c > 0.4$ )  $N_1$  i  $N_2$  comencen a desenvolupar un comportament pla per valors baixos de  $\sigma$ . La raó d'aquest comportament es pot entendre perfectament observant el dibuix en tres dimensions de la figura 5.7, en la que es representa el número mig  $N_1(\sigma, c, L)$  per  $L = 32$ . Aquest comportament constant pels talls a  $c$  constant de les figures 5.5 i 5.6 es deu al fet que la cresta de les funcions  $N_1$  i  $N_2$  no decreix linealment quan augmentem  $c$ , sinó que mostra una curvatura i arriba a l'eix  $c$  quasi perpendicularment.

## 5.4 Hipòtesis de FSS

La hipòtesis que volem comprovar numèricament es que en presència de vacants, el punt crític que trobem a  $c = 0$  es transforma en una línia crítica per un ampli



**Figura 5.3:** Camp coercitiu en funció de la concentració de vacants  $c$  per diferents valors de la quantitat de desordre que introduïm al sistema  $\sigma$ . La figura interior mostra el comportament de la derivada numèrica  $\partial H_{coe}/\partial c$ , la qual mostra un màxim sobre la línia de transició. Les dades corresponen a promijos realitzats utilitzant un sistema de mida  $L = 64$ .

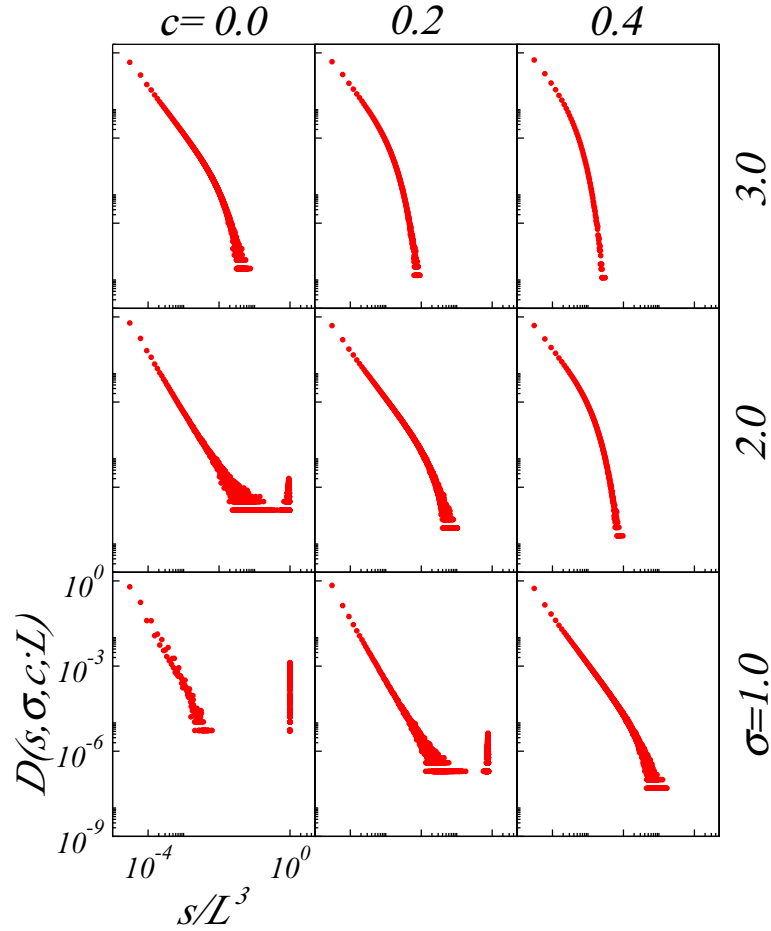
rang de concentracions. Llavors, els exponents crítics trobats prèviament han de ser igualment vàlids per la descripció del comportament dels valors mitjos  $N_1$  i  $N_2$  per  $c > 0$ . Seguint aquesta hipòtesi proposem el següent comportament d'escala de mida finita

$$N_\alpha(\sigma, c, L) = L^\theta \tilde{N}_\alpha(uL^{1/\nu}), \quad (5.6)$$

on  $\alpha = 1, 2$  i  $u(\sigma, c)$  és la variable d'escala que ens dóna la distància a la línia crítica. Tant els exponents  $\theta$  i  $\nu$  com les funcions  $\tilde{N}_\alpha$  han estat determinats en treballs previs [90]. Aquesta hipòtesi és molt forta i ens indica que totes les dades de  $N_1$  i  $N_2$  corresponents a diferents mides  $L$ , diferents concentracions de vacants  $c$  i diferents quantitats de desordre  $\sigma$  han de col·lapsar a una funció ja coneguda. L'única llibertat que tenim està en la determinació de la variable d'escala  $u$ , que ha de ser analítica. Abans d'obtenir-la a la següent secció, fem un test preliminar de l'equació (5.6) per comprovar que podem obtenir unes funcions d'escala a la línia crítica. Si avaluem l'equació (5.6) per  $u = 0$  trobem la relació

$$N_\alpha(\sigma, c, L) = L^\theta \tilde{N}_\alpha(0), \quad (5.7)$$

on  $\sigma$  i  $c$  han de ser punts de la línia crítica, i de la referència [90] tenim els valors  $\theta = 0.10$ ,  $\tilde{N}_1(0) = 0.12$  i  $\tilde{N}_2(0) = 0.07$ . De l'equació anterior trobem que les diferents corbes  $N_\alpha(\sigma, c, L)/L^\theta \tilde{N}_\alpha(0)$  s'han de creuar a alçada 1 sobre la línia crítica independentment de  $L$ . Es mostren dos exemples a la figura 5.8 que corresponen a dos talls, un a  $\sigma$  constant i l'altre a  $c$  constant, en el diagrama  $\sigma - c$ .

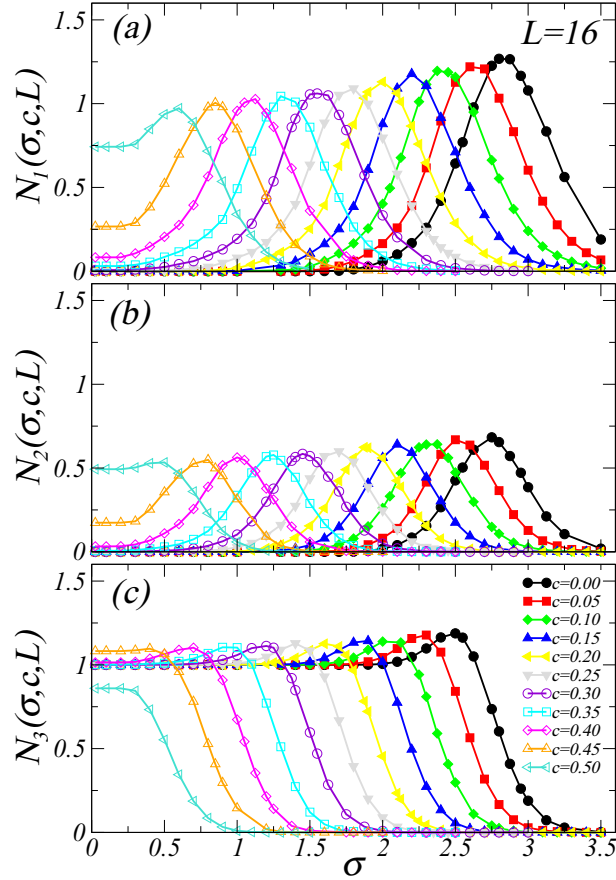


**Figura 5.4:** Distribucions de les mides de les allaus corresponents a un sistema de mida  $L = 32$  per diferents valors de  $c$  i  $\sigma$ . Les dades es presenten en escala logarítmica.

Tal i com es pot veure, la línia crítica es pot determinar amb una alta precisió analitzant un gran nombre de tall en  $\sigma$  i  $c$ . El resultat es mostra a la figura 5.9. Aquest procés es pot fer tant per  $N_1$  com per  $N_2$ , obtenint així dues determinacions independents de la línia crítica. Aquestes coincideixen perfectament tal i com es pot veure a la figura 5.9.

La línia crítica obtinguda amb el procediment anteriorment, és una recta fins  $c \simeq 0.3$ . Si fem un ajust de mínims quadrats tenim que  $\sigma_c(c) = \sigma_c(0) + \lambda c$  amb  $\sigma_c(0) = 2.21 \pm 0.01$  i  $\lambda = -4.09 \pm 0.03$ . El valor  $\sigma_c(0) = 2.21$  coincideix exactament amb l'estimació feta en el model no diluït [90].

Es remarcable que la hipòtesi de FSS permeti col·lapsar les dades corresponents a valors grans de  $c$  molt allunyats del punt  $c = 0$  on les funcions d'escala i els exponents han estat obtinguts. També és remarcable que la hipòtesi sigui vàlida fins i tot després de la curvatura observada per  $c > 0.3$  (Cal notar que el punt de tall que es mostra a la figura 5.8(a) correspon a un valor de  $\sigma$  on la línia crítica ja no presenta el comportament lineal descrit anteriorment).



**Figura 5.5:** Número mig de les (a) allaus  $1d$ -spanning, (b)  $2d$ -spanning i (c)  $3d$ -spanning, en funció de  $\sigma$  per diferents valors de la concentració de vacants  $c$  tal i com s'indica a la llegenda. Les dades corresponen a simulacions numèriques d'un sistema de mida  $L = 16$ . Les línies són interpolacions cúbiques.

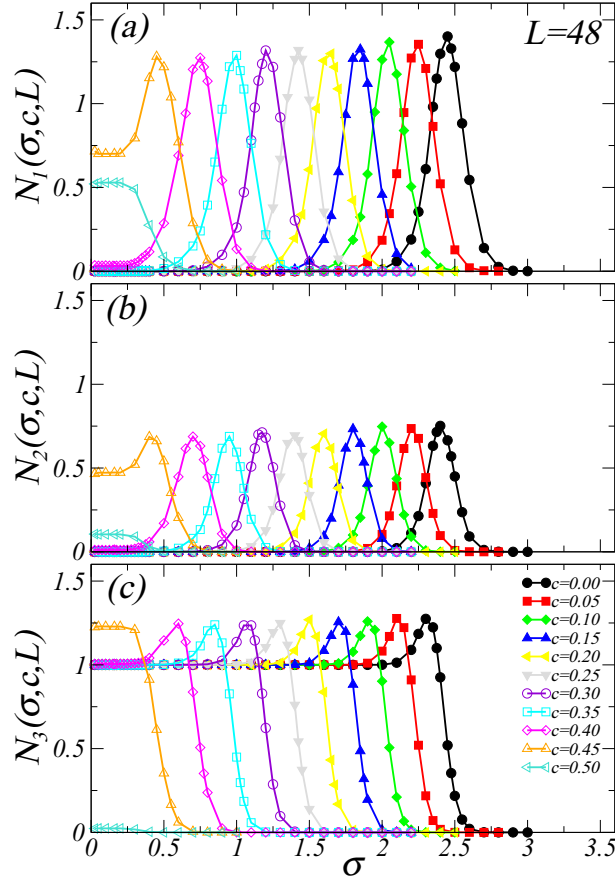
Per valors baixos de  $\sigma$ , la línia crítica té un comportament vertical tal com es pot veure a la figura 5.9. El valor crític de concentració de vacants  $c_c$  per sobre del qual els cicles d'histèresi no mostren una discontinuïtat es pot ajustar a  $c_c = 0.426 \pm 0.003$ .

## 5.5 Variable d'escala

En general la variable d'escala és una funció que es pot expandir en sèrie de potències i pren la forma

$$u(\sigma, c) = a_0 + a_1\sigma + a_2c + a_3\sigma c + a_4\sigma^2 + a_5c^2 + \dots \quad (5.8)$$

Com que  $c$  i  $\sigma$  no són necessàriament petites al llarg de la línia crítica, és difícil saber quants termes de l'expansió necessitarem per obtenir un bon col·lapse de les dades. En general la determinació directa dels coeficients de l'expansió (5.8)



**Figura 5.6:** Número mig d'allaus (a)  $1d$ -spanning, (b)  $2d$ -spanning i (c)  $3d$ -spanning, en funció de  $\sigma$  per diferents valors de la concentració de vacants  $c$ , tal i com està indicat a la llegenda. Les dades corresponen simulacions numèriques en un sistema de mida  $L = 48$ . Les línies són interpolacions cúbiques.

a partir de les dades numèriques és difícil. Per tant adoptarem una estratègia diferent que ens permetrà utilitzar la màxima informació coneguda [90].

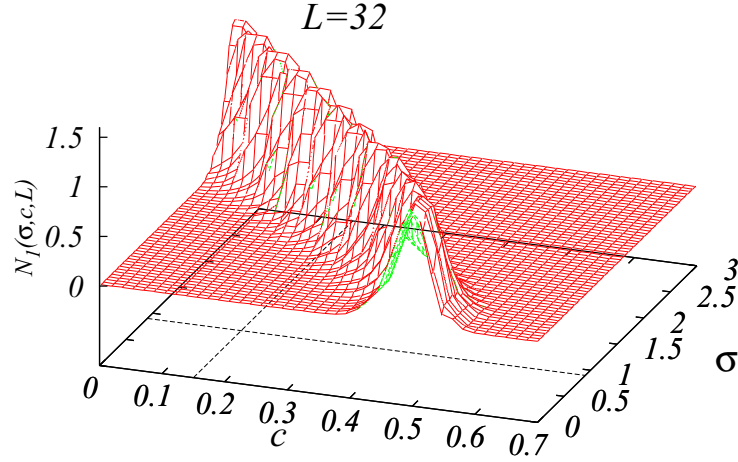
Primer ens restringim a la regió  $c \leq 0.3$  on la línia crítica és una recta i intentarem utilitzar una expansió fins a termes quadràtics. Forcem que la condició  $u = 0$  es compleixi sobre la línia crítica ajustada anteriorment i prenem una funció d'escala amb la forma

$$u(\sigma, c) = (\sigma - \sigma_c - \lambda c)(b_0 + b_1\sigma + b_2c). \quad (5.9)$$

També hem de considerar que la variable d'escala descrita com una expansió de segon ordre (fins  $\sigma^2$ ) de l'equació (5.2) funciona perfectament pel cas no-diluit  $c = 0$ . Fent una mica d'àlgebra podem determinar els paràmetres  $b_0$  i  $b_1$ :

$$b_0 = (1 - A)/\sigma_c = 0.543 \pm 0.002 \quad (5.10)$$

$$b_1 = A/\sigma_c^2 = -0.041 \pm 0.001 \quad (5.11)$$



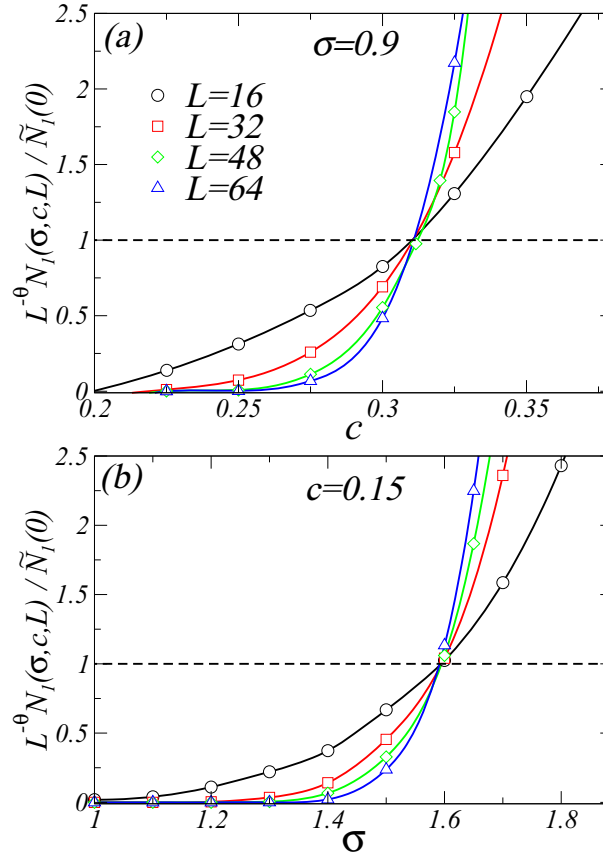
**Figura 5.7:** Dibuix en tres dimensions de  $N_1(\sigma, c, L)$  per  $L = 32$ . Les línies discontinües de la base representen la posició dels talls de la figura 5.8 a  $c = 0.15$  i  $\sigma = 0.9$ .

Finalment tenim un paràmetre lliure  $b_2$  que ens ha de permetre col·lapsar en una mateixa corba totes les dades de la regió I per diferents valors de  $\sigma$ ,  $c$  i  $L$ . Considerem totes les dades disponibles a la regió I de la figura 5.1. És important remarcar que el mateix paràmetre  $b_2$  ens ha de servir per col·lapsar les dades de  $N_1$  i  $N_2$ . Els millors col·lapses es mostren a les figures 5.10 i 5.11 per  $b_2 = -0.13$ . Les dades del model no diluït  $c = 0$  també estan incloses en aquestes figures i per tant podem dir que hem obtingut dues funcions d'escala  $\tilde{N}_1$  i  $\tilde{N}_2$  que són compatibles amb les obtingudes a la referència [90]. En aquesta referència aquestes funcions d'escala es van aproximar a Gaussians malgrat que presentaven desviacions sistemàtiques. En aquest estudi hem escollit ajustar-les a unes funcions més complexes amb tres paràmetres lliures. Hem trobat un bon ajust  $\chi^2$  usant les següents Lorentzians modificades, les quals han estat representades sobre les dades col·lapsades de les figures 5.10 i 5.11 amb una línia contínua.

$$\tilde{N}_1(x) = \frac{1}{(1.73 - 0.53x + 0.10x^2)^{3.9}} \quad (5.12)$$

$$\tilde{N}_2(x) = \frac{1}{(1.83 - 0.59x + 0.13x^2)^{4.6}} \quad (5.13)$$

El següent pas és intentar construir  $u(\sigma, c)$  per les dades properes a l'eix  $\sigma = 0$ . En aquesta regió II (veure la figura 5.9) la línia que ens marca la transició és bastant recta i de fet podem considerar que és vertical. Això significa que per mesurar la distància a la línia crítica en tenim prou usant la variable  $(c - c_c)$  i



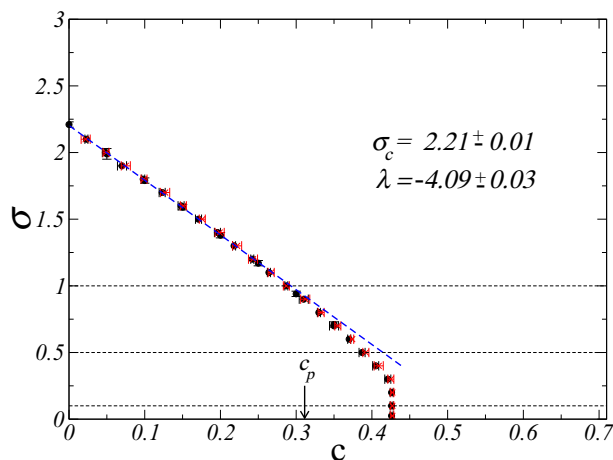
**Figura 5.8:** Exemples dels punts de tall en la línia crítica al llarg de talls (a) paral·lel a l'eix  $c$  i (b) paral·lel a l'eix  $\sigma$ . Les diferents mides de sistema s'indiquen amb els diferents tipus de punt tal i com s'indica a la llegenda. Les línies contínues són interpolacions cúbiques. Les línies puntejades horitzontals ens indiquen l'alçada 1 on les diferents corbes s'han de creuar segons l'equació (5.7).

hem considerat la següent expansió de segon ordre:

$$\frac{u(c)}{k'} = \frac{c - c_c}{c_c} + B \left( \frac{c - c_c}{c_c} \right)^2. \quad (5.14)$$

El paràmetre  $k'$  no és lliure i el fixem imposant que les definicions de la variable d'escala (5.9) i (5.14) han de coincidir a  $\sigma = 0$  i  $c = 0$ . Llavors  $k' = (A-1)/(B-1)$  i l'únic paràmetre lliure per col·lapsar les dades és  $B$ . Els millors col·lapses es mostren a les figures 5.12 i 5.13 per  $N_1$  i  $N_2$  respectivament, usant  $B = -0.2$  com a millor opció (llavors  $k' = 1$ .) Les línies contínues de les dues figures són les mateixes funcions que s'han representat a les figures 5.10 i 5.11.

Per tant hem estat capaços de construir dues bones aproximacions de l'única variable d'escala: l'equació (5.9) ens dona l'aproximació per la variable d'escala a la regió I i l'equació (5.14) ens dona l'aproximació de la variable d'escala per la regió II. Aquesta única variable d'escala pot presentar un comportament més



**Figura 5.9:** Línia crítica en el diagrama  $\sigma - c$  determinada a partir dels punts de tall de  $N_1$  ( $\bullet$ ) i  $N_2$  ( $\times$ ). La línia puntejada és l'ajust que es proposa en el text, i les tres línies fines puntejades horitzontals marquen els talls al llarg dels quals es calculen les correlacions mostrades a la figura 5.14.

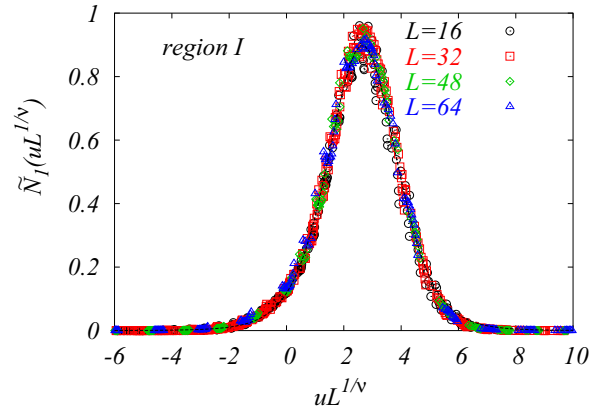
complicat a la zona intermèdia on la línia crítica presenta la curvatura. Degut a aquest comportament més complex s'hauria d'aproximar la variable d'escala en aquesta zona amb termes d'ordre superior als quadràtics.

## 5.6 Discussió

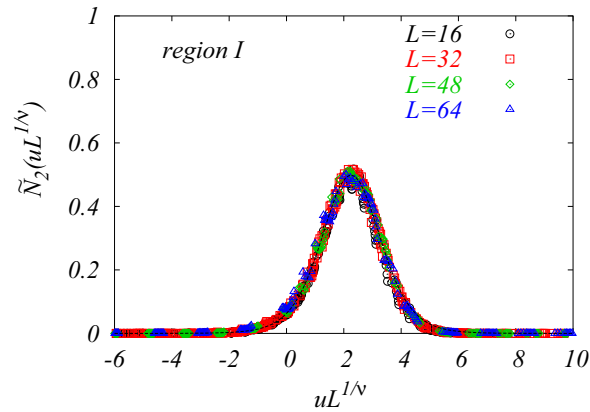
En aquesta secció intentarem donar una explicació a la curvatura que presenta la línia crítica a la zona intermèdia, on no hem trobat l'expansió de la variable d'escala. Aquesta curvatura té una explicació que va més enllà de l'efecte que provoca la dilució en el sistema i està relacionada amb la percolació de vacants per sobre de  $c_p = 0.3116$  [107]. La relació entre la curvatura de la línia crítica i la percolació de vacants s'intueix quan ens adonem que  $c_p$  coincideix amb molta exactitud al valor pel qual la línia crítica es comença a corbar, i per tant, a perdre la linealitat, tal i com es pot veure a la figura 5.9.

Per justificar numèricament aquesta hipòtesi hem estudiat les distribucions de clústers de vacants i la posició de les allaus per cada realització de desordre. En particular, hem determinat la posició espacial del clúster més gran de vacants, el qual per sobre de  $c_p$  correspondrà en el límit termodinàmic al clúster percolant [107]. Clarament, les posicions veïnes a aquest clúster percolant de vacants són un camí fàcil per la propagació d'una allau, ja que aquests spins tenen un número més baix de veïns. Per distingir aquestes posicions hem definit un marcador local que pren el valor  $b_i = 1$  quan la posició  $i$  pertany a la frontera del clúster més gran de vacants o  $b_i = 0$  quan es dona el cas contrari. També hem marcat l'allau més gran que es produeix en tota la branca del cicle. Aquesta allau més gran correspondrà en el límit termodinàmic a l'allau macroscòpica que provocarà la discontinuïtat





**Figura 5.10:** Col·lapse amb FSS del número mig d'allaus  $1d$ -spanning a la regió I. La línia contínua representa la funció Lorentziana de l'equació (5.12).

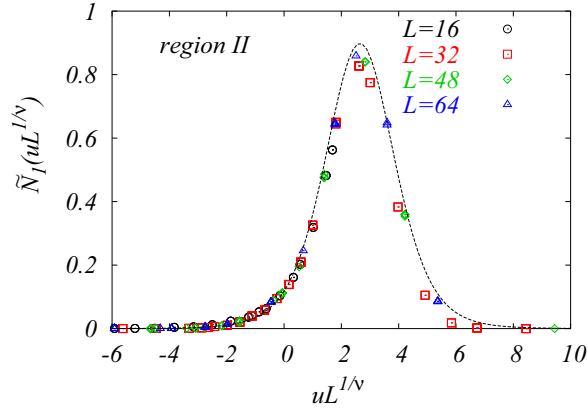


**Figura 5.11:** Col·lapse amb FSS del número mig d'allaus  $2d$ -spanning a la regió I. La línia contínua representa la funció Lorentziana de l'equació (5.13).

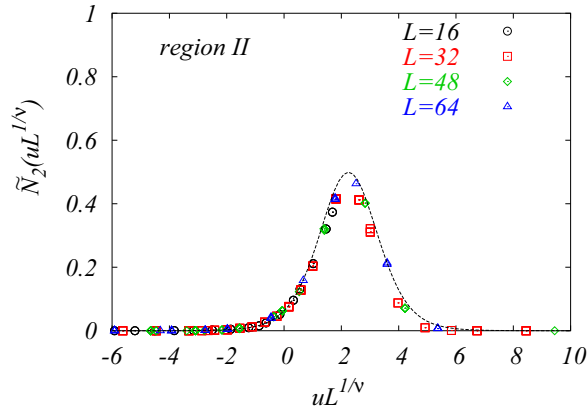
per sota la línia crítica. Hem marcat la seva posició amb un marcador  $\epsilon_i = 1$ . Amb aquestes dues variables hem definit la correlació entre la frontera del clúster més gran de vacants i l'allau més gran:

$$\rho_{\epsilon,b} = \frac{\langle \frac{1}{N} \sum \epsilon_i b_i \rangle - \langle \frac{1}{N} \sum \epsilon_i \rangle \langle \frac{1}{N} \sum b_i \rangle}{\sqrt{\langle \frac{1}{N} \sum \epsilon_i^2 \rangle - \langle \frac{1}{N} \sum \epsilon_i \rangle^2} \sqrt{\langle \frac{1}{N} \sum b_i^2 \rangle - \langle \frac{1}{N} \sum b_i \rangle^2}} \quad (5.15)$$

Com que les variables  $\epsilon_i$  i  $b_i$  només poden prendre valors 1, 0, el quadrat que hi ha en el primer terme de les arrels quadrades es pot suprimir. Aquesta correlació val 1 quan l'allau més gran coincideix exactament amb la frontera del clúster més gran de vacants. El comportament de  $\rho_{\epsilon,b}$  en funció de  $c$  es mostra a la figura 5.14 per tres valors diferents de  $\sigma$  que corresponen a les línies discontinües indicades a la figura 5.9 i per diferents valors de  $L$  tal i com s'indica a la llegenda. L'observació important a fer és que les corbes per  $\sigma = 0.5$  i  $\sigma = 0.1$  presenten dos punts de



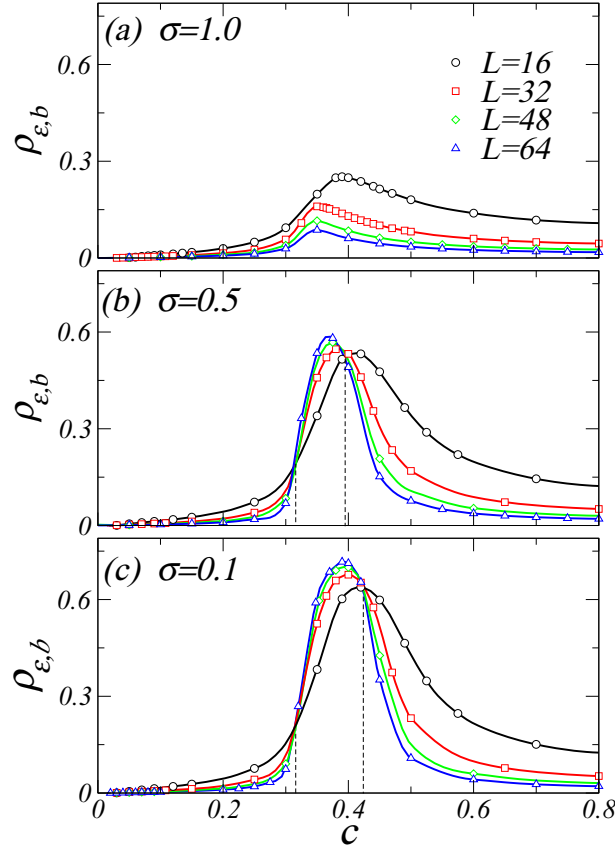
**Figura 5.12:** Col·lapse amb FSS del número mig d'allaus  $1d$ -spanning a la regió II. La línia contínua representa la funció Lorentziana de l'equació (5.12)



**Figura 5.13:** Col·lapse amb FSS del número mig d'allaus  $2d$ -spanning a la regió II. La línia contínua representa la funció Lorentziana de l'equació (5.13) .

tall. Un localitzat a  $c_p$  i l'altre a la línia crítica. Per tant aquest segon es desplaça amb  $\sigma$ . Per una concentració de vacants inferior a  $c_p$  o per sobre la línia crítica, el comportament de les corbes al augmentar  $L$  indica que la correlació tendeix a zero en el límit termodinàmic. En canvi, a la regió intermèdia entre els dos punts de tall, la correlació augmenta quan augmentem la mida del sistema. El valor  $\rho = 1$  probablement no s'obté mai ja que l'allau macroscòpica sempre és més gran que la frontera del clúster percolant de vacants.

Utilitzant aquest anàlisi hem identificat l'origen de la curvatura de la línia crítica: quan les vacants percolen, l'allau macroscòpica es propaga al llarg de la frontera del clúster percolant de vacants. La propagació en aquest ambient confinat disminueix la quantitat de desordre que es necessita per trencar l'allau infinita macroscòpica en allaus microscòpiques. Aquest nou mecanisme, tal i com s'ha mostrat en la secció anterior, no canvia el valor dels exponents crítics.



**Figura 5.14:** . Correlació entre la frontera del clúster més gran de vacants i l'allau més gran en funció de  $c$ . Les dades corresponen a simulacions realitzades sobre sistemes de diferent mida tal i com s'indica a la llegenda. Les corbes corresponen als talls en el diagrama de fases a (a)  $\sigma = 1$ , (b)  $\sigma = 0.5$  i (c)  $\sigma = 0.1$

## 5.7 Sumari i conclusions

Hem analitzat la influència de la dilució en les propietats crítiques del RFIM definit sobre xarxes cúbiques ( $d = 3$ ) i conduït amb dinàmica metastable *1-spin-flip* a  $T = 0$ . S'ha pogut demostrar que el punt crític associat al canvi de forma dels cicles d'histèresi de discontinus a continus es converteix en una línia crítica, la qual hem localitzat en el diagrama de fases  $\sigma - c$ . Les propietats crítiques a prop d'aquesta línia estan caracteritzades pels mateixos exponents que en el cas del RFIM sense dilució. Aquest resultat indica que es possible trobar arguments a partir del grup de renormalització (RG) per demostrar que hi ha un únic punt fix a  $T = 0$  en l'espai de paràmetres que controlen el desordre. Aquest espai de paràmetres com a mínim inclou els camps aleatoris i la dilució [16] encara que pot incloure altres tipus de desordre com unes constants d'intercanvi aleatòries [108]. Hem obtingut les aproximacions quadràtiques de la variable d'escala en dues zones diferents del diagrama de fases que ens permeten col·lapsar les dades de diferents mides, quantitats de desordre i quantitats de dilució a una mateixa funció

universal d'escala a partir de FSS de dues variables. Finalment, hem proposat una explicació per la curvatura observada en la línia crítica quan la concentració de vacants augmenta per sobre del límit de percolació: l'allau macroscòpica (infinita) responsable de la discontinuïtat en els cicles d'histèresi té tendència a seguir la frontera del clúster percolant de vacants.

# Capítol 6

## Propietats estadístiques dels *pinning fields*

### 6.1 Introducció

Com ja s’ha explicat anteriorment el RFIM ens serveix per entendre el procés d’imantació i desimantació dels materials ferromagnètics. Aquest model es pot entendre des de dos punts de vista diferents. Per una banda es pot considerar que el sistema evoluciona segons una dinàmica de relaxació metastable que inclou fenòmens de nucleació i moviments d’interfícies [2, 15]. Per altra banda podem suposar que la imantació del sistema canvia únicament per l’evolució metastable d’una interfície magnètica [109, 110] i per tant només els spins propers a aquesta poden girar. Fins ara hem considerat les dinàmiques metastables (*k-spin-flip*) i l’objectiu d’aquest capítol es demostrar l’existència d’una diferència essencial entre aquestes dues maneres de fer evolucionar el RFIM.

En els dos casos la histèresi apareix com a conseqüència dels camps locals que experimenten els spins a causa del desordre “congelat” del sistema. Per exemple en el procés de desimantació en que canviem el camp extern des de  $H = +\infty$  fins a  $H = -\infty$  alguns spins tindran camps locals tan grans que no els permetran girar avall fins hi tot per valors molt negatius del camp extern. A partir d’ara anomenarem a aquests camps locals *pinning fields* ja que són els responsables de “clavar” els spins i no permetre que girin.

L’existència d’aquesta diferència essencial entre les dues aproximacions es posa de manifest a través de les diferències en les distribucions de probabilitat dels *pinning fields*. Pel cas en que el sistema evoluciona amb una dinàmica metastable, la qual permet nucleació i moviment d’interfícies, la distribució de probabilitat dels *pinning fields* en un estat intermedi de l’evolució és molt diferent a la distribució inicial corresponent al cas saturat (distribució nominal  $f(h_i)$  que s’ha utilitzat per generar els camps aleatoris). Aquesta diferència entre la distribució inicial (nominal) i la distribució d’un estat intermedi és conseqüència de que en els estats inicials del procés de desimantació les regions amb barreres energètiques més

baixes ja han estat girades. A prop de la coercitivitat, les barreres que queden són molt més altes a causa del procés de selecció previ. Aquest canvi en la distribució no està present quan considerem l'avanç d'una interfície simple ja que els camps locals dels spins que estan a la regió que encara no ha transformat, és a dir els *pinning fields*, sempre tenen una distribució que coincideix amb l'original.

En el present capítol ens centrem en l'estudi de les propietats estadístiques dels *pinning fields* pel cas en que el RFIM relaxa amb una dinàmica metastable *1-spin-flip*. Els *pinning fields* seran els camps locals dels spins que encara no han girat avall en el procés de desimantació.

## 6.2 Model

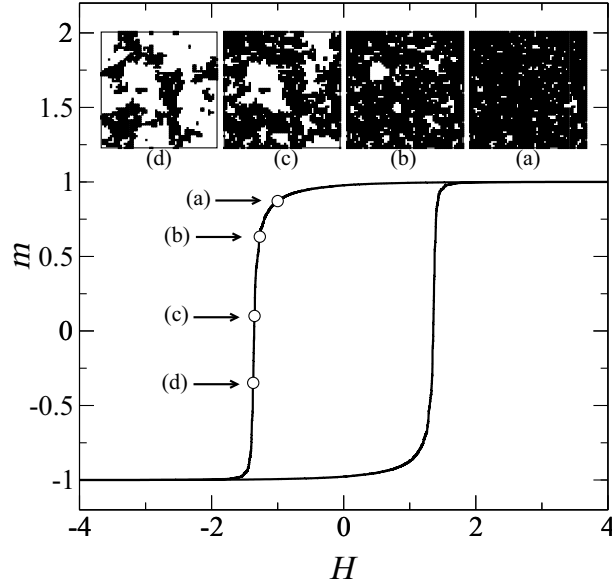
Utilitzem el RFIM a  $T = 0$  en una xarxa cúbica de mida  $N = L^3$  on en cada nus de xarxa es defineix una variable de spin  $S_i = \pm 1$  que té en compte els graus de llibertat magnètics. Com ja s'ha vist l'Hamiltonià del model és

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j - \sum_i S_i h_i - H \sum_i S_i, \quad (6.1)$$

on el primer terme considera l'acoblament ferromagnètic entre els spins, el segon terme considera l'acoblament amb els camps aleatoris  $\{h_i\}$ , i l'últim terme té en compte l'acoblament amb el camp extern  $H$ . Considerem que els  $\{h_i\}$  segueixen una distribució Gaussiana amb mitjana zero i desviació estàndard  $\sigma$ . Aquesta distribució  $f(h_i)$  coincidirà amb la distribució inicial dels *pinning fields* i l'anomenarem distribució nominal.

Aquest estudi s'ha fet a partir de simulacions numèriques realitzades tal com s'explica a la secció 2.5.3. L'estat inicial saturat amb tots els spins  $S_i = 1$  correspon a l'estat d'equilibri per  $H = +\infty$ . Llavors disminuïm el camp  $H$  fins que un spin  $S_i$  es torna localment inestable. En aquest moment el camp extern es manté constant i girem el spin  $S_i$ . Això pot provocar un allau ja que alguns veïns poden tornar-se inestables. Tots els spins giren simultàniament fins que l'allau acaba. Llavors disminuïm el camp extern  $H$  fins que s'inicia una altra allau.

El cicle d'histèresi s'obté mesurant la imantació  $m = \sum_{i=1}^N S_i/N$  en funció de  $H$ . A la figura 6.1 es mostra un cicle d'histèresi i diferents talls del sistema. Tal i com es pot veure, la nucleació i el moviment de la interfície coexisteixen durant l'evolució. Degut a la mida finita dels sistemes simulats, els cicles consisteixen en una seqüència de salts discontinus o allaus per cada realització dels camps aleatoris  $\{h_i\}$ . Tal i com ja s'ha explicat anteriorment, les característiques dels cicles depenen de la quantitat de desordre  $\sigma$  [89,90]. Tal i com hem vist, en el límit termodinàmic ( $L \rightarrow \infty$ ) tenim cicles continus per  $\sigma > \sigma_c$ , mentre que presenten una discontinuïtat al camp coercitiu per  $\sigma < \sigma_c$ . Aquest comportament està associat a la existència d'un punt crític fora de l'equilibri en el diagrama de fases  $(H, \sigma)$ , localitzat a  $\sigma_c = 2.21$  i  $H_c = -1.425$ . El comportament a prop d'aquest



**Figura 6.1:** Exemple de cicle d'histèresi per  $\sigma = 2.5$  i  $L = 60$ . En les figures interiors es mostren talls del sistema real. Les regions negres són regions on els spins estan amunt i les regions blanques són regions on els spins estan avall.

punt crític es pot descriure amb un conjunt d'exponents crítics. Per exemple, la longitud de correlació divergeix amb un exponent  $\nu \simeq 1.2$ , el paràmetre d'ordre (el salt en la imantació  $\Delta m$ ) tendeix a zero amb un exponent  $\beta \simeq 0.024$  quan  $\sigma \rightarrow \sigma_c$  per l'esquerra i a  $\sigma = \sigma_c$  la imantació es comporta com  $m \sim |H - H_c|^{1/\delta}$  amb  $\delta \simeq 50$ . Com ja s'ha explicat en el capítol anterior aquests exponents crítics s'han obtingut a partir d'estudis detallats de FSS [90], els quals demostren que la millor variable d'escala per mesurar la distància a  $\sigma_c$  és

$$u = \frac{\sigma - \sigma_c}{\sigma_c} + A \left( \frac{\sigma - \sigma_c}{\sigma_c} \right)^2 \quad (6.2)$$

amb  $A = -0.2$ . A més, com que estem interessats en la mesura de les propietats en funció del camp extern  $H$ , necessitem una segona variable d'escala per mesurar la distància a  $H_c$ . L'elecció més senzilla és <sup>1</sup>

$$v = \frac{H - H_{coe}}{H_{coe}} \quad (6.4)$$

on  $H_{coe}(\sigma, L)$  és el camp coercitiu que tendeix a  $H_c$  quan  $\sigma \rightarrow \sigma_c$  i  $L \rightarrow \infty$ .

<sup>1</sup>Treballs posteriors [94] han demostrat que la millor variable d'escala és

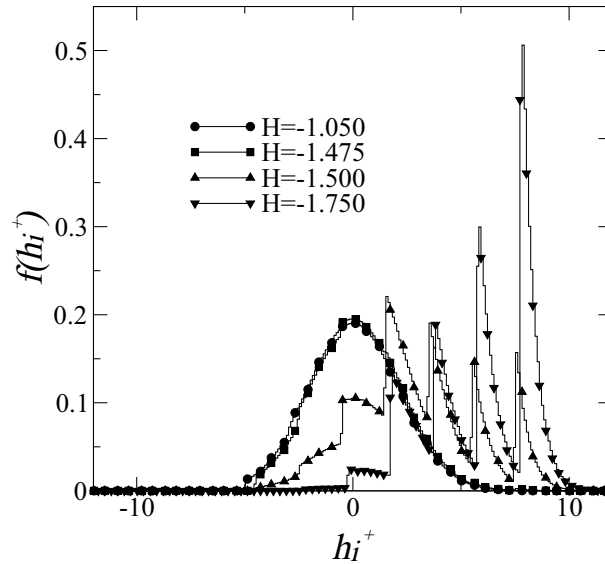
$$v = \frac{H - H_c}{H_c} + B' \frac{\sigma - \sigma_c}{\sigma_c}, \quad (6.3)$$

que incorpora una rotació amb  $B' \simeq 0.25$ . Aquesta variable d'escala permetria realitzar un anàlisi FSS més acurat i millorar els col·lapses de les figures 6.5 i 6.6.

### 6.3 Resultats

Tal i com ja s'ha explicat a la introducció d'aquest capítol, definim els *pinning fields*  $h_i^+$  com aquells camps aleatoris  $h_i$  pels quals  $S_i = +1$  per un certa configuració intermèdia durant el procés de desimantació, és a dir per la branca superior del cicle d'histèresi. Malgrat que els *pinning fields* són un subconjunt dels camps aleatoris originals, les seves propietats estadístiques depenen del moment on ens trobem en el procés de desimantació. Hem calculat el valor mig dels *pinning fields*  $\langle h_i^+ \rangle$  i els histogrames corresponents a la seva distribució estadística  $f(h_i^+)$  en funció de  $H$  i  $\sigma$  fent simulacions sobre moltes realitzacions de desordre. A part també hem computat les correlacions de les parelles  $C(h_i^+, h_j^+) = L^3 (\langle h_i^+ h_j^+ \rangle - \langle h_i^+ \rangle \langle h_j^+ \rangle)$ .

La figura 6.2 mostra l'evolució de la distribució dels *pinning fields* al llarg de la branca descendent del cicle d'histèresi corresponent a  $\sigma = 2.14 < \sigma_c$ . Aquestes distribucions es poden entendre com la distribució de les barreres energètiques creades pel desordre congelat que mantenen els spins en l'estat metastable. Inicialment la distribució dels *pinning fields* és similar a la distribució Gaussiana nominal, però a mida que la imantació va disminuint, la distribució  $f(h_i^+)$  comença a desenvolupar una estructura complexa. En general la distribució tendeix a desplaçar-se cap a la dreta, regió de *pinning fields* més grans, i també comença a desenvolupar uns pics associats amb els set possibles ambients d'imantació local.

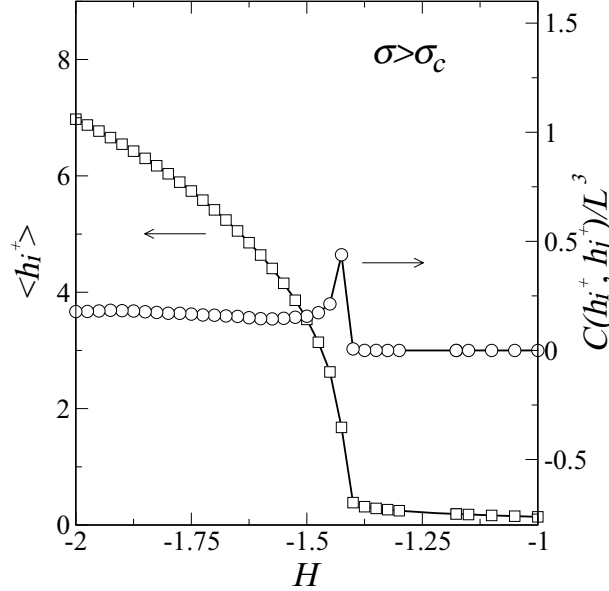


**Figura 6.2:** Exemples de les distribucions  $f(h_i^+)$  per  $L = 60$ ,  $\sigma = 2.14$  i diferents valors del camp extern com s'indica a la llegenda. Les dades s'han obtingut promitjant sobre 1000 realitzacions de desordre diferents.

Les figures 6.3 i 6.4 mostren l'evolució de  $\langle h_i^+ \rangle$  i  $C(h_i^+, h_j^+)$  en funció del camp extern  $H$  per dos valors diferents de  $\sigma$ , un per sobre i l'altre per sota del desordre crític  $\sigma_c$ . La correlació és diferent de zero pels dos casos i mostra un pic a prop



del camp coercitiu. Això significa que les distribucions  $f(h_i^+)$  són projeccions de distribucions amb varies variables molt més complexes. A més,  $\langle h_i^+ \rangle$  mostra una discontinuïtat per  $\sigma < \sigma_c$ , per tant el comportament de  $\langle h_i^+ \rangle$  és similar al comportament de un paràmetre d'ordre al voltant del punt crític.



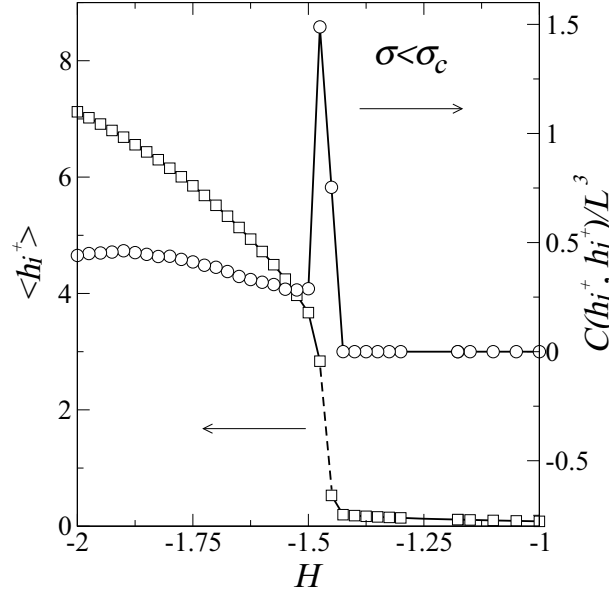
**Figura 6.3:** Exemple de l'evolució de  $\langle h_i^+ \rangle$  i  $C(h_i^+, h_j^+)$  en funció del camp extern per un sistema de mida  $L = 60$  i  $\sigma = 2.28$ . Les dades corresponen a promitjos sobre 1000 realitzacions de desordre

Per dur a terme un estudi més quantitatiu hem d'aplicar un anàlisi de FSS [94]. Les dues propietats analitzades  $\langle h_i^+ \rangle$  i  $C(h_i^+, h_j^+)$  són funcions del camp extern  $H$ , la quantitat de desordre  $\sigma$  i la mida del sistema  $L$ . La proposta de FSS ens permet expressar les contribucions singulars (crítiques) d'aquestes propietats en funció dels invariants  $x = uL^{1/\nu}$  i  $y = vL^{\beta\delta/\nu}$  :

$$\langle h_i^+ \rangle = L^{-\theta} \tilde{h}(uL^{1/\nu}, vL^{\beta\delta/\nu}) \quad (6.5)$$

$$C(h_i^+, h_j^+) = L^{3-\rho} \tilde{C}(uL^{1/\nu}, vL^{\beta\delta/\nu}) \quad (6.6)$$

Els exponents  $\theta$  i  $3 - \rho$  caracteritzen el decreixement de  $\langle h_i^+ \rangle$  i la divergència de la correlació  $C$  respectivament. Les figures 6.5 i 6.6 mostren les funcions d'escala  $\tilde{h}$  i  $\tilde{C}$ . La bona qualitat dels col·lapses de les dades per diferents mides confirma la hipòtesi d'escala. Els exponents que donen els millors col·lapses són  $\theta \simeq 0.41$  i  $3 - \rho \simeq 1.80$ . A més, el comportament de les funcions d'escala permet predir com es comporten en el límit termodinàmic el valor mig dels *pinning fields* i les correlacions. Com que  $\tilde{h}$  es comporta com  $y^{\theta\nu/\beta\delta}$ , tal com mostra la línia discontinua de la figura 6.5,  $\langle h_i^+ \rangle$  és finit per  $H < H_c$ . El comportament per  $v > 0$  no es tant bo degut a les contribucions fora de la criticalitat de les allaus microscòpiques per tots els valors de  $\sigma$  [90, 94]. Les funcions d'escala per les

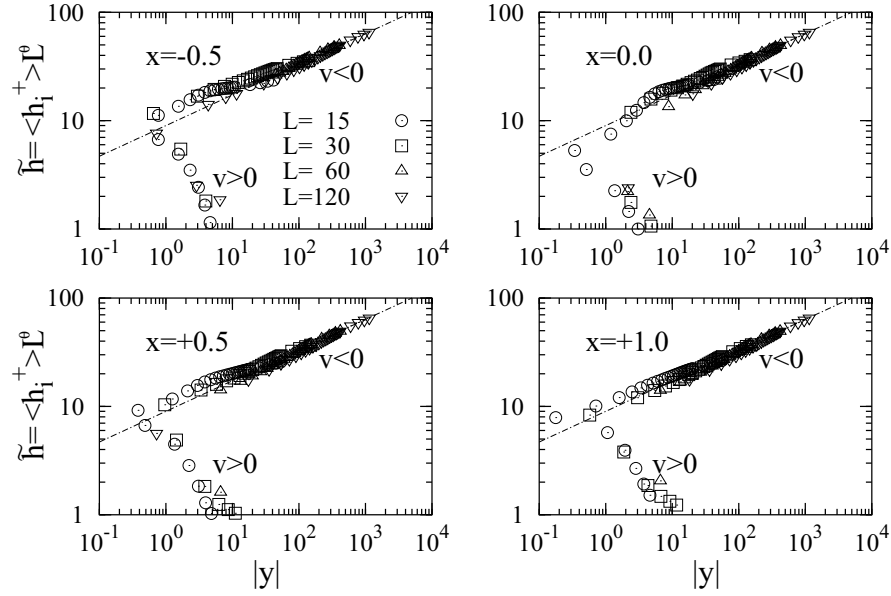


**Figura 6.4:** Exemple de l'evolució de  $\langle h_i^+ \rangle$  i  $C(h_i^+, h_j^+)$  en funció del camp extern per un sistema de mida  $L = 60$  i  $\sigma = 2.14$ . Les dades s'han obtingut fent promitjos sobre 1000 realitzacions de desordre

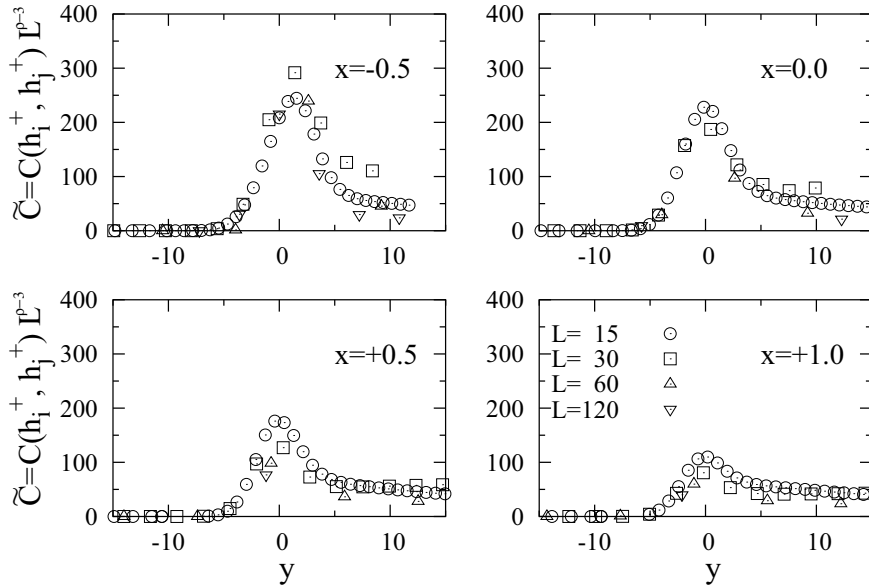
correlacions mostren un pic que indica que, a part de les contribucions que no escalen, les correlacions  $C(h_i^+, h_j^+)$  divergiran a  $H = H_c$  i  $\sigma = \sigma_c$  en el límit termodinàmic.

## 6.4 Sumari i conclusions

Els *pinning fields* són els responsables de les barreres energètiques que mantenen els spins en l'estat metastable en el context del 3d RFIM a  $T = 0$ . S'han estudiat les distribucions dels *pinning fields* durant el procés de desimantació. Al principi, quan el sistema està en l'estat saturat els *pinning fields* es distribueixen segons la distribució Gaussiana dels camps aleatoris (distribució nominal). A mesura que el procés de desimantació evoluciona i creixen dominis de spins en l'estat negatiu els *pinning fields* comencen a presentar distribucions més complexes. El seu valor mig augmenta monòtonament quan disminuïm  $H$ . Per  $\sigma > \sigma_c$  aquest increment és continu i en canvi per  $\sigma < \sigma_c$  mostra una discontinuïtat en el camp coercitiu. A més hem demostrat que a prop de la coercitivitat els *pinning fields* presenten fortes correlacions estadístiques. Finalment remarcar que aquest comportament complex de la distribució dels *pinning fields* no es considera en els models que estudien una interfície magnètica que avança pel sistema.



**Figura 6.5:** Anàlisi FSS del valor mig dels *pinning fields*  $\langle h_i^+ \rangle$ . Les figures en escala logarítmica mostren les funcions d'escala  $\tilde{h}$  en funció de  $y = vL^{\beta\delta/\nu}$  per quatre valors diferents de  $x = uL^{1/\nu}$ . Les dades inclouen el col·lapse de les mides  $L = 15, 30, 60, 120$  (tal com s'indica en la llegenda) i a promitjos sobre un gran número de realitzacions de desordre que va des de  $10^6$  a  $10^3$ . La línia discontinua mostra el comportament de la funció  $y^{\theta\nu/\beta\delta}$ .



**Figura 6.6:** Anàlisi FSS de les correlacions entre els *pinning fields*  $C(h_i^+, h_j^+)$ . Els valors dels paràmetres són els mateixos que en la figura 6.5.



# Capítol 7

## Model simple per l'*Exchange Bias*

### 7.1 Introducció

En aquest capítol es presenta una modificació del RFIM a temperatura zero ( $T = 0$ ) que permet modelitzar cicles d'histeresi amb *Exchange Bias* (EB). La característica principal d'aquests cicles d'histeresi és que no estan centrats a  $H = 0$  sinó que presenten un desplaçament en l'eix del camp, és a dir no són simètrics respecte l'origen. La quantitat que es desplacen respecte l'origen es coneix com el camp d'*Exchange Bias*  $H_{EB}$  [111, 112]. Aquest fenomen ha estat molt estudiat aquesta última dècada ja que els sistemes amb un camp  $H_{EB}$  gran tenen moltes aplicacions tecnològiques [113]. L'element essencial de l'EB és l'existència d'interfícies entre un sistema ferromagnètic (FM) i un sistema antiferromagnètic (AFM). L'acoblament entre aquests dos sistemes s'indueix després d'un refredament amb camp extern aplicat. Per fer aquest refredament es parteix d'una temperatura inicial ( $T_0$ ) per sobre de la temperatura de Néel ( $T_N$ ) de l'AFM, i per sota la temperatura de Curie ( $T_c$ ) del FM ( $T_N < T_0 < T_c$ ). Aquest tractament tèrmic clava alguns dels moments magnètics de la interfície que seran els responsables de l'aparició de l'EB.

El sistema habitual que presenta aquesta propietat és un sistema bicapa FM / AFM. Per exemple Co/CoO [114], NiFe/NiMn [115], Fe/FeF<sub>2</sub> [116] i Fe/MnF<sub>2</sub> [117]. Aquest fenomen també s'observa en sistemes granulars formats per partícules petites amb un nucli ferromagnètic envoltades pel seu òxid antiferromagnètic [118].

Una primera interpretació qualitativa ja es va donar fa 40 anys [119], però encara no s'ha trobat una explicació definitiva d'aquest fenomen [120, 121]. Malgrat que s'han proposat diferents models per intentar explicar-lo més acuradament, encara no es possible explicar algunes propietats d'aquests sistemes com: el paper que juga l'amplada de l'AFM [114, 122], la formació de parets de domini [123, 124], si els spins clavats pertanyen al FM o a l'AFM [125], etc.

Es fàcil entendre que el fenomen de l'EB aparegui quan tenim sistemes que tenen un AFM no compensat, és a dir un AFM que té una imantació neta diferent de zero després de ser refredat. Un fet especialment difícil d'explicar d'aquest fenomen és que no només apareix en AFM compensats sinó que també apareix en sistemes que tenen un AFM compensat, és a dir sistemes amb un AFM amb imantació neta nul·la a la interfície [126].

L'objectiu d'aquest capítol és introduir un model molt senzill que permeti explicar l'EB en sistemes que tenen un AFM compensat. Utilitzem el RFIM amb dinàmica metastable definit sobre una xarxa quadrada en el que suposem que algunes integrals d'intercanvi entre els spins  $J_{ij}$  presenten un fort augment. A la secció 7.2 es presenta l'Hamiltonià i la dinàmica. A la secció 7.3 es presenten els resultats obtinguts a partir de les simulacions numèriques. A la secció 7.4 es discuteix el possible origen físic de l'augment en les interaccions d'intercanvi. A la secció 7.6 comparem els resultats de les simulacions amb resultats experimentals i finalment, a la secció 7.7 es resumeixen els resultats i conclusions més rellevants.

## 7.2 Model

El model només reproduceix la capa ferromagnètica ja que considerem que la capa AFM està totalment compensada i no contribueix a la imantació neta global de tot el sistema. Malgrat que la capa AFM no es considera explícitament en el model, si que es tenen en compte els seus efectes indirectes, tal i com s'explicarà més endavant.

Per tant considerem el RFIM definit en una xarxa quadrada ( $d = 2$ ) de mida  $N = L \times L$  on en cada nus de la xarxa es defineix una variable de spin  $S_i$  la qual pot prendre valors  $\pm 1$ . L'Hamiltonià, en unitats reduïdes, pren la forma

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} S_i S_j - \sum_i h_i S_i - H \sum_i S_i \quad (7.1)$$

El primer sumatori, que s'estén a totes les parelles de primers veïns, té en compte l'energia d'intercanvi ( $J_{ij} > 0$ ). El segon sumatori considera la interacció amb els camps aleatoris  $\{h_i\}$  i l'últim terme és l'acoblament amb el camp extern  $H$ . Els camps aleatoris són independents i distribuïts seguint una densitat de probabilitat Gaussiana

$$p(h_i) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{h_i^2}{2\sigma^2}}, \quad (7.2)$$

on  $\sigma$  és la desviació estàndard que controla la quantitat de desordre introduïda al sistema. La novetat del model està en els valors que prenen les constants d'intercanvi  $J_{ij}$ . No considerem el mateix valor per totes les parelles, prendrem  $J_{ij} = J$  excepte per una fracció  $f$  d'enllaços seleccionats a l'atzar pels quals  $J_{ij} = J_E \gg J$ . Podem expressar matemàticament la distribució d'enllaços de la forma següent:

$$p(J_{ij}) = (1 - f)\delta(J_{ij} - J) + f\delta(J_{ij} - J_E) \quad (7.3)$$

Aquesta fracció d'enllaços intenten reproduir l'efecte que produeix la capa anti-ferromagnètica. Una possible explicació física d'aquest increment es discutirà a la secció 7.4. A partir d'ara aquest model l'anomenarem EE-RFIM (les sigles EE són les inicials d'*Exchange Enhancement*).

Hem centrat el nostre estudi a la regió de valors petits de  $f$  ( $f < 0.06$ ). La imantació del sistema la definim com  $m = \sum_i S_i/N$  i per analitzar els cicles d'histèresi usem la dinàmica de relaxació local explicada a la secció 2.5.3. Cada spin  $S_i$  gira alineant-se amb el seu camp local  $f_i$  que ve donat per:

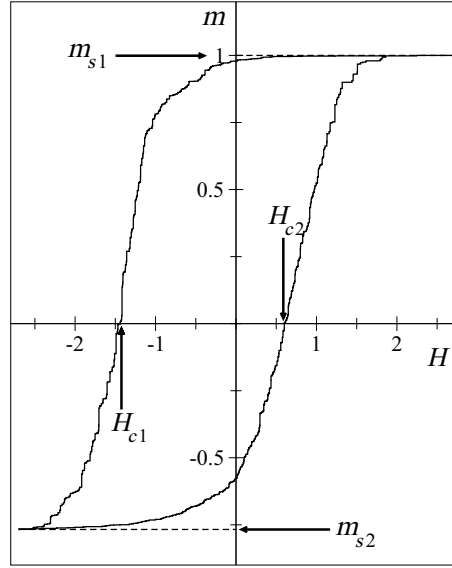
$$f_i = \sum_{j=1}^4 J_{ij} S_j + H + h_i \quad (7.4)$$

on el primer sumatori s'estén sobre tots els veïns de  $S_i$ . Comencem amb un valor de  $H$  prou gran per què l'estat estable sigui aquell en el qual tots els spins prenen el valor  $S_i = 1 \quad \forall i$ . Anem disminuint el camp extern  $H$  fins que  $f_i$  es fa zero per un cert spin, llavors girem aquest spin mantenint  $H$  constant. Aquest gir pot desestabilitzar algun dels seus veïns iniciant així un allau. Aquest es propagarà fins que no s'arribi a un nou estat metastable en el que tots els spins estiguin alineats amb el seu camp local. Llavors seguim disminuint el camp extern  $H$ .

Per suprimir la dependència amb la realització concreta de desordre s'ha de promitjar les magnituds calculades sobre moltes realitzacions ( $\sim 10^3$ ) diferents de camps aleatoris. A partir d'ara considerem  $J = 1$ , llavors tots els camps magnètics i les energies es donen en unitats de  $J$ .

## 7.3 Resultats numèrics

A la figura 7.1 es mostra un exemple de cicle d'histèresi obtingut amb simulacions numèriques en un sistema de mida  $L = 50$ ,  $J_E = 20$ ,  $f = 0.03$  i  $\sigma = 1.65$ . El camp extern es varia entre  $H = \pm 2.7$ . Tal i com es pot veure el cicle presenta un remarcable camp d'*Exchange Bias*. Sembla sorprenent que aquest model presenti aquesta asimetria donat que tenim un Hamiltonià simètric respecte la transformació  $S_i \rightarrow -S_i$  i  $H \rightarrow -H$ . El que està succeint és que el cicle que es mostra a la figura 7.1 correspon a un cicle en el que hem canviat el sentit de conducció del camp extern abans d'arribar a l'estat de saturació negatiu (i.e. hem fet un cicle parcial). Aquest fet es posa de manifest a la figura 7.2 on ciclem el sistema entre  $H = \pm 19.4$ , que és un camp un ordre de magnitud superior al camp coercitiu  $H_{c1}$ . Degut a la petita fracció de constants d'intercanvi augmentades, el cicle total presenta zones on la imantació té un comportament constant en les quals el sistema es comporta de forma reversible exactament igual que quan està en l'estat saturat. Només quan ciclem entre valors molt grans del camp extern obtenim el cicle d'histèresi simètric. Per tant en aquest model els cicles d'histèresi amb EB són cicles parcials que també presenten un desplaçament en l'eix de la imantació.



**Figura 7.1:** Exemple de cicle d'histèresi que presenta EB, obtingut amb simulacions numèriques del model per un sistema de mida  $L = 50$ ,  $J_E = 20$ ,  $f = 0.03$  i  $\sigma = 1.65$ . El camp extern varia des de 2.7 a  $-2.7$ .  $H_{c1}$  i  $H_{c2}$  indiquen els camps coercitius de la branca superior i inferior respectivament.

Per tal de fer un anàlisi quantitatiu d'aquest comportament hem de realitzar promitjos sobre realitzacions de desordre. Obtenim els cicles d'histèresi sistemàticament seguint el següent protocol: disminuïm el camp extern des de  $H = +\infty$  fins a  $2H_{c1} < 0$  on canviem el sentit de conducció del camp i comencem a augmentar-lo fins a  $H = +\infty$ , on  $H_{c1}$  és el camp coercitiu per la branca superior. També calculem el pseudo camp coercitiu  $H_{c2}$  en la branca inferior (veure la figura 7.1).

El criteri per escollir el valor  $2H_{c1}$  com a punt de retorn és similar al criteri que s'usa en molts dels casos experimentals. Un podria canviar aquest límit a  $3H_{c1}$  o  $4H_{c1}$  sense alterar els resultats obtinguts si  $J_E$  es prou gran. Aquest fet es pot entendre fàcilment si mirem les llargues cues planes del cicle total que es mostren en la figura 7.2.

El camp  $H_{EB}$ , la coercitivitat  $\Delta H$  i el desplaçament en imantació  $m_B$  es defineixen com:

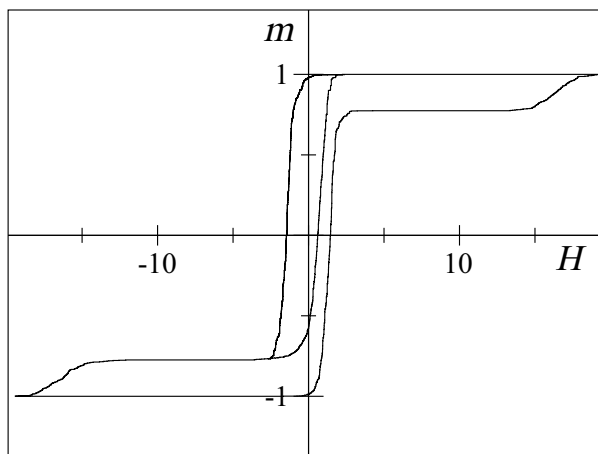
$$H_{EB} = \frac{H_{c1} + H_{c2}}{2} \quad (7.5)$$

$$\Delta H = H_{c2} - H_{c1} \quad (7.6)$$

$$m_B = \frac{m_{s1} + m_{s2}}{2} = \frac{1 + m_{s2}}{2} \quad (7.7)$$

Seguint aquestes definicions, els cicles que es desplacen cap a l'esquerra en l'eix del camp  $H$  tindran un camp EB negatiu. Les figures 7.3 i 7.4 mostren la dependència de  $\langle |H_{EB}| \rangle$  i  $\Delta H$  en funció de  $J_E$  per  $\sigma = 1$  i diferents valors de  $f$  tal i com s'indica



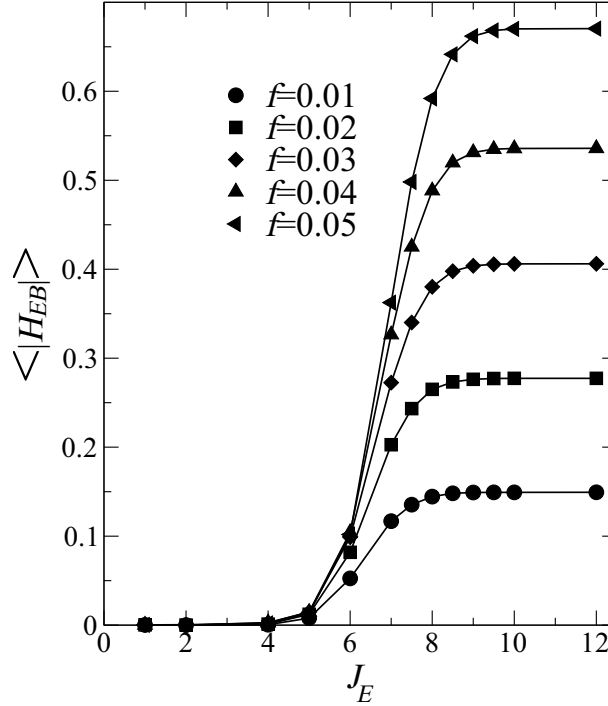


**Figura 7.2:** El mateix cas que a la figura 7.1 on es mostra el cicle parcial amb EB i el cicle total entre  $H = \pm 19.4$  que és simètric.

a la llegenda. Fins i tot per valors molt petits de  $f$  la quantitat  $\langle |H_{EB}| \rangle$  augmenta en funció de  $J_E$  fins a saturar.

Per la coercitivitat (figura 7.4) s'han de destacar dos resultats importants: l'increment (casi el 40 % en alguns casos) de la coercitivitat per valors intermedis de  $J_E$  i la saturació a un valor constant, que depèn de  $f$ , per valors grans de  $J_E$ . Aquests valors de saturació de la coercitivitat per valors grans de  $J_E$  són més petits que la coercitivitat del sistema sense constants d'intercanvi incrementades.

Per tal d'analitzar la dependència de les propietats del sistema en funció de la quantitat de desordre  $\sigma$  escollim un valor de  $J_E$  prou gran pel qual  $\langle |H_{EB}| \rangle$  hagi arribat al valor màxim de saturació (veure figura 7.3). Les figures 7.5 i 7.6 mostren el comportament de  $\langle |H_{EB}| \rangle$  i  $\langle \Delta H \rangle$  en funció de  $\sigma$  per  $J_E = 20$  i diferents valors de  $f$  tal com s'indica a la llegenda. Sorprenentment,  $\langle |H_{EB}| \rangle$  no presenta un comportament monòton amb  $\sigma$ . Primer disminueix fins que arriba a un mínim on a partir del qual creix lentament per valors grans de desordre. La important variació de  $\langle |H_{EB}| \rangle$  i  $\langle \Delta H \rangle$  per valors de  $f$  entre 0.015 i 0.025 quan  $\sigma \rightarrow 0$  està associada al fet que la branca de pujada del cicle d'histeresi és molt sensible a l'existència de nuclis de spins que no han girat en l'estat d'imantació negativa. Per valors molt baixos de  $f$  esperem que tots els nuclis de spins que no han girat estiguin formats per dos spins que estan units per un enllaç  $J_E$ . Els spins en l'estat negatiu que envolten aquest nucli saltaran amunt ( $\sigma \rightarrow 0$ ) al voltant de  $H = 2$  (veure l'equació (7.4)). Per valors més grans de  $f$  tindrem un número més gran de nuclis. Per exemple, un nucli format per tres spins que estan units per dos enllaços perpendiculars  $J_E$ , actuaran com a detonants d'una allau cap a la fase d'imantació positiva quan  $H = 0$ . Quan  $f$  és prou gran, la probabilitat de tenir nuclis d'aquest tipus és diferent de zero, llavors el camp coercitiu per la branca de pujada disminueix de 2 a 0, incrementant  $H_{EB}$  i disminuint  $\Delta H$ .

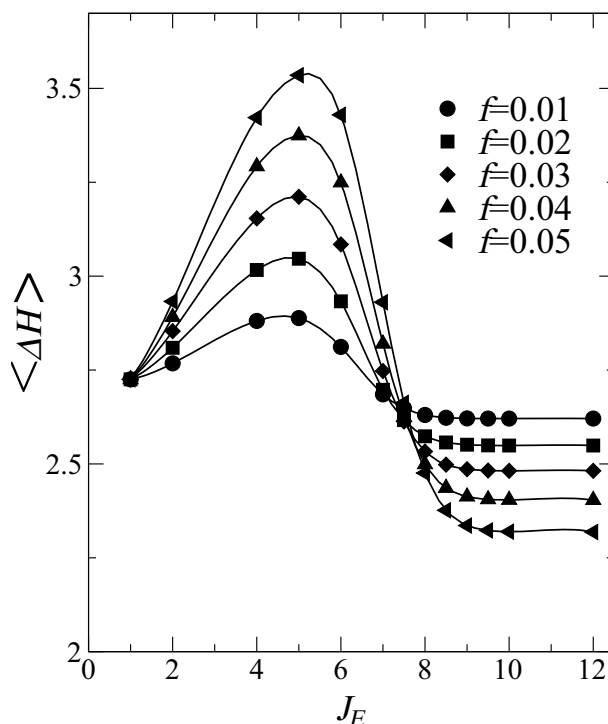


**Figura 7.3:** Dependència de l'EB  $\langle |H_{EB}| \rangle$  en funció de l'augment en la constant d'intercanvi  $J_E$  per  $\sigma = 1$  i diferents valors de  $f$  tal com s'indica a la llegenda. Aquests resultats s'han obtingut promitjant 1000 realitzacions de desordre i utilitzant un sistema de mida  $L = 50$ . Les línies són interpolacions.

El comportament no monòton de l'EB quan el desordre augmenta es pot observar millor a la figura 7.7 en la que representem  $\langle |H_B| \rangle / \langle \Delta H \rangle$ , que és una quantitat adimensional i és més rellevant des de el punt de vista experimental. Observem que per valors grans de  $f$  i  $\sigma$  trobem cicles d'histèresi que estan tan desplaçats en eix que els camps  $H_{c1}$  i  $H_{c2}$  prenen valors negatius. Un exemple d'aquest cas es pot veure en la figura 7.8 on hem variat el camp extern entre  $H = \pm 4.5$

## 7.4 Discussió

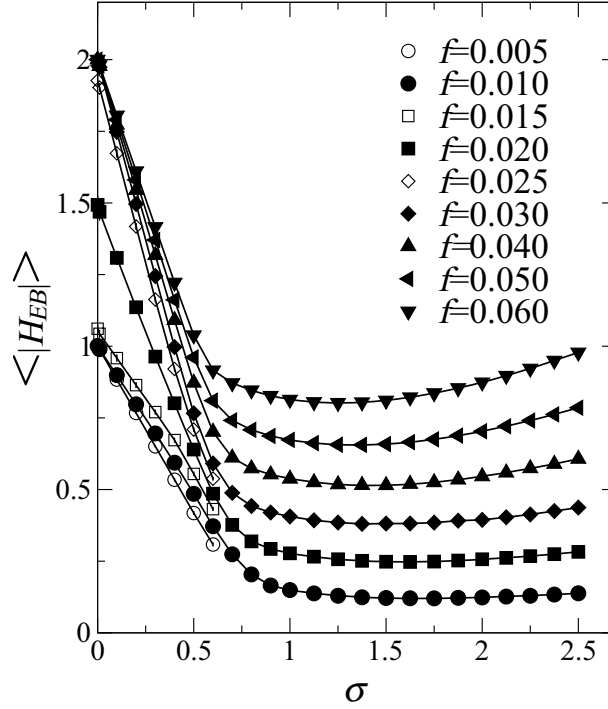
Una de les motivacions principals d'aquest estudi ha estat obtenir cicles d'histèresi amb EB utilitzant el RFIM a temperatura zero fent una modificació mínima. La idea més senzilla era utilitzar una distribució de camps aleatoris que no fos simètrica, ja que una distribució amb  $\langle h_i \rangle \neq 0$  provocarà un desplaçament en el cicle. Des de el nostre punt de vista, aquest cas correspon a tenir una capa AFM no compensada. Si ens restringim al cas compensat, hem comprovat que a partir d'una distribució simètrica de camps aleatoris no podem obtenir EB. Per entendre-ho suposem que una certa fracció de spins estan clavats amb uns camps locals molt positius i uns altres spins estan clavats amb uns camps locals



**Figura 7.4:** Dependència de l'EB  $\langle \Delta H \rangle$  en funció de l'augment en la constant d'intercanvi  $J_E$  per  $\sigma = 1$  i diferents valors de  $f$  tal com s'indica a la llegenda. Aquests resultats s'han obtingut promitjant 1000 realitzacions de desordre i utilitzant un sistema de mida  $L = 50$ . Les línies són interpolacions.

molt negatius, però de forma simètrica. Llavors la figura 7.9(a) mostra el cicle d'histèresi esquemàtic en aquest cas. Els spins amb camp aleatori més positiu, que seran els últims de girar a la branca de baixada, seran els primers de girar a la branca de pujada. Per tant el cicle d'histèresi complet (simètric i sense EB) es solaparà amb el cicle d'histèresi parcial, tal com es mostra a la figura 7.9(a). En canvi quan alterem la distribució d'enllaços, tal i com s'ha fet en el model presentat, preservant les propietats de simetria de l'Hamiltonià (7.1), els spins amb acoblament ferromagnètic més gran seran els últims de girar a la branca de baixada del cicle i també els últims en girar a la branca de pujada. Llavors, els cicles parcials no coincidiran amb els cicles complets i presentaran EB tal com mostra la figura 7.9(b).

La justificació del model proposat requereix donar una explicació física de l'increment dels enllaços d'intercanvi. Recentment s'ha suggerit que les ones de spin en la interfície FM/AFM podrien ser les responsables d'un increment de l'acoblament d'intercanvi [127]. Encara que un altre mecanisme, basat en l'existència de desordre “congelat” a la capa AFM, pot ser el responsable d'aquest increment. El cas més comú és l'existència de fronteres de domini amb anti-fase tal i com es considera a les referències [114], [128], [129] i [130]. Podem pensar que l'interacció d'intercanvi entre els moments magnètics de la capa FM té dues contribucions:



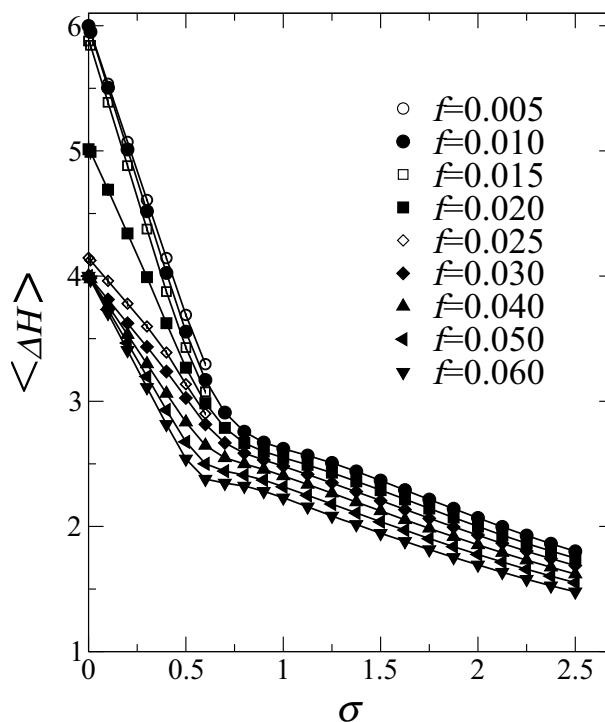
**Figura 7.5:** Dependència de l'EB  $\langle |H_{EB}| \rangle$  en funció de la quantitat de desordre  $\sigma$  i  $J_E = 20$  per diferents valors de  $f$  tal i com s'indica a la llegenda. Aquests resultats s'han obtingut promitjant 1000 realitzacions de desordre i utilitzant un sistema de mida  $L = 50$ . Les línies són interpolacions.

la primera deguda al solapament directe de les funcions d'ona electròniques dels àtoms de la capa FM i la segona provinent de l'interacció de superintercanvi a través del solapament amb els electrons de la capa AFM. L'existència de desordre congelat a la capa AFM pot modificar aquesta segona contribució de l'interacció d'intercanvi donant lloc a l'increment de les constants d'intercanvi. Com que les energies associades amb els enllaços trencats del AFM poden ser més altes que les energies d'intercanvi en el FM (per exemple per l'existència d'una forta anisotropia) és plausible imaginar que els defectes en el AFM poden influir en les interaccions d'intercanvi del FM.

Podem donar una possible formulació matemàtica per aquest mecanisme dins el marc dels models reticulars. Si considerem que l'interacció entre dos spins veïns  $S_i$  i  $S_j$  de la capa FM ve donat per:

$$E_{ij} = -J_0 S_i S_j - K S_i S_j \sigma_i \sigma_j \quad (7.8)$$

on  $\sigma_i$  i  $\sigma_j$  són les variables de spin que descriuen els moments magnètics a la capa AFM que estan just per sota dels spins  $S_i$  i  $S_j$  de la capa FM. La constant  $J_0 > 0$  és l'interacció d'intercanvi a la capa FM quan no està acoblada a la capa AFM i  $K > 0$  és l'acoblament entre les dues capes. Aquest terme d'acoblament pot incloure, d'una forma efectiva, les interaccions amb moltes capes atòmiques del



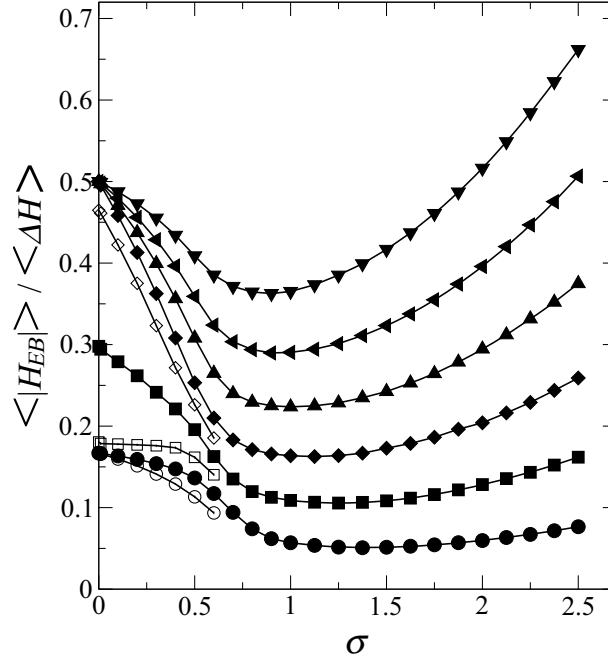
**Figura 7.6:** Dependència de la coercitivitat  $\langle \Delta H \rangle$  en funció de la quantitat de desordre  $\sigma$  i  $J_E = 20$  per diferents valors de  $f$  tal i com s'indica en la llegenda. Aquests resultats s'han obtingut promitjant 1000 realitzacions de desordre i utilitzant un sistema de mida  $L = 50$ . Les línies són interpolacions.

AFM. La figura 7.10 mostra una representació esquemàtica dels spins de la capa FM i de la capa AFM en dues situacions: (a) correspon a la situació normal de la capa AFM en que aquesta capa està ordenada, mentre que (b) correspon al cas en que la capa AFM presenta fronteres de domini en anti-fase.

En el cas (a), l'energia de la parella  $\langle ij \rangle$  és  $E_{ij} = -(J_0 - K)S_i S_j$ , i pel cas (b) l'energia val  $E_{ij} = -(J_0 + K)S_i S_j$ . La ràtio entre les dues constants d'intercanvi és  $J_E = (J_0 + K)/(J_0 - K)$  que prendrà un valor molt més gran que la unitat ( $J_E \gg 1$ ) quan  $K$  tendeixi a un valor més petit, però proper, a  $J_0$  ( $K \rightarrow J_0^-$ ).

## 7.5 Diagrames FORC's

En aquesta secció presentem els diagrames FORC's del RFIM amb constants d'intercanvi incrementades (EE-RFIM) pel cas  $J_E = 20$ ,  $f = 0.05$  i  $L = 50$ . Un conjunt de FORC's es representen a la figura 7.11. Per analitzar l'estructura d'aquest conjunt de FORC's, calculem els anomenats diagrames FORC's. Aquests s'obtenen, tal i com ja s'ha vist al capítol 3, calculant la segona derivada combinada de la imantació  $m$  al camp  $H_b$  en un FORC obtingut canviant el sentit del

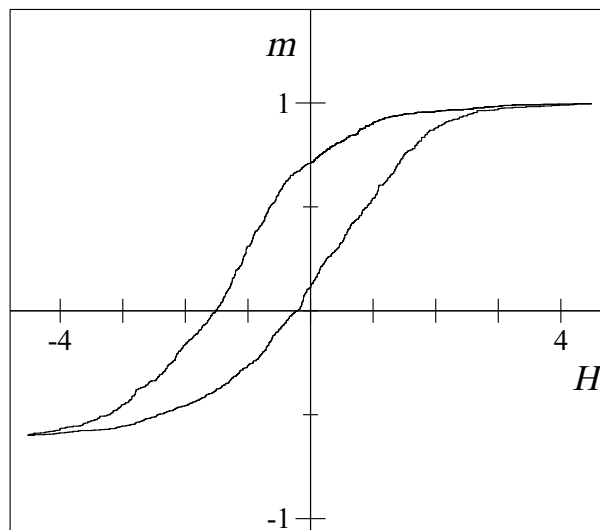


**Figura 7.7:** Dependència de l'EB relatiu  $\langle |H_{EB}| \rangle / \langle \Delta H \rangle$  en funció de la quantitat de desordre  $\sigma$  i  $J_E = 20$  per diferents valors de  $f$  tal i com s'indica en la llegenda de la figura 7.6. Aquests resultats s'han obtingut promitjant 1000 realitzacions de desordre i utilitzant un sistema de mida  $L = 50$ . Les línies són interpolacions.

camp a  $H_a$  [103]:

$$\rho(H_a, H_b) = -\frac{\partial^2 m(H_a, H_b)}{\partial H_a \partial H_b} \quad (7.9)$$

Els valors de  $\rho$  es representen en un diagrama el qual s'obté després de rotar dels coordenades amb les transformacions:  $H_v = (H_b - H_a)/2$  i  $H_u = (H_a + H_b)/2$ . Les noves coordenades permeten una comparació directa amb les distribucions de Preisach [1]. La figura 7.12 mostra la part central dels diagrames FORC's corresponents al (a) RFIM habitual i (b) al EE-RFIM. Comparant les dues figures es pot veure que l'EB es reflecteix amb un desplaçament del pic central cap avall. L'amplada vertical d'aquest pic augmenta quan augmentem l'amplada  $\sigma$  de la distribució dels camps aleatoris. El corriment cap avall es fa més important quan augmentem  $f$ . Altres característiques interessants d'aquests diagrames es poden veure en el diagrama ampliat de la figura 7.13. Les dues característiques principals són l'aparició d'una oscil·lació a la regió  $H_u < 0$  i un segon pic en la regió de valors grans de  $H_v$  ( $\sim 17$ ). Aquesta oscil·lació presenta una zona de valors negatius de  $\rho$ . Ni aquesta zona de valors negatius ni l'asimetria mostrada a la figura 7.13 no es poden entendre dins el marc del model de Preisach en el que  $\rho$  és una densitat de probabilitat la qual sempre és positiva i simètrica respecte l'eix  $H_u = 0$ . Els valors negatius de  $\rho$  estan associats amb el fet que el pendent de  $m(H)$  a  $-1 < H < 0$  augmenta quan augmentem  $H_a$ . Seria interessant analitzar si aquesta característica particular s'observa en sistemes experimentals amb EB.



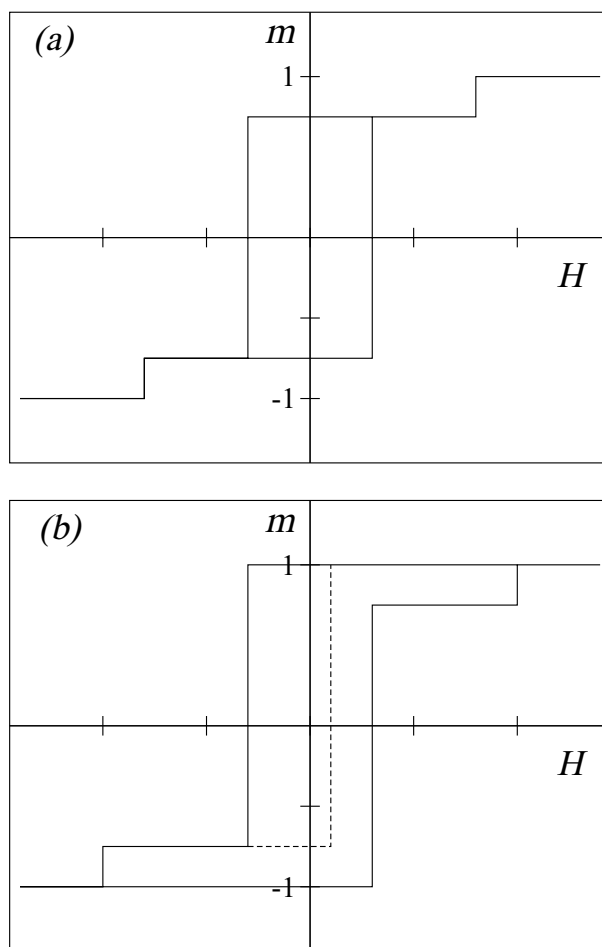
**Figura 7.8:** Cicle d'histèresi que presenta EB obtingut simulant un sistema de mida  $L = 50$  amb  $J_E = 20$ ,  $f = 0.05$  i  $\sigma = 3$ . El camp extern ha estat variat entre  $H = \pm 4.5$ .

## 7.6 Comparació amb els experiments

En aquesta secció compararem els resultats obtinguts a partir d'aquest model de spins amb resultats experimentals obtinguts per diferents autors. La idea que l'EB pugui ser conseqüència d'un ciclatge parcial ja va ser utilitzada per explicar l'influència de l'*spin-flop* a l'EB [131]. A més s'ha provat experimentalment que els spins no-compensats, que possiblement provoquen l'EB [132] i els quals són els possibles responsables de l'increment en les constants d'intercanvi, poden ser girats a camps suficientment grans [122] (camps molt més grans que els que s'usen en els estudis d'EB). Per tant l'EB pot ser considerat com un efecte de ciclatge parcial.

Per altra banda, el pic que s'observa en el comportament de la coercitivitat en funció de  $J_E$  (veure figura 7.4) pot estar relacionat amb les observacions experimentals dels pics del camp coercitiu  $H_{coe}(t_{AFM})$  (on  $t_{AFM}$  és el gruix de la capa AFM) a prop del gruix crític de l'AFM pel qual comença a aparèixer l'EB, o amb  $H_{coe}(T)$  a prop de la temperatura de Néel (veure les figures 10 i 13 de la referència [111]). Podem argumentar que quan el gruix de l'AFM o la temperatura augmenten, l'acoblament FM-AFM, el qual provoca l'increment de  $J_E$ , disminueix i conseqüentment el camp coercitiu  $H_{coe}$  augmenta, tal com indica la teoria. D'una forma similar, els canvis de  $\langle H_{EB} \rangle$  i  $\langle \Delta H \rangle$  en funció de  $J_E$  es poden relacionar amb el comportament experimental observat en Fe/MnF<sub>2</sub> quan refredem amb camp [117].

Un altre resultat interessant d'aquest model és la dependència de l'EB en funció del desordre  $\sigma$  que s'ha mostrat a les figures 7.5 i 7.7. Experimentalment el paper que juga el desordre no està clar. Per alguns sistemes al augmentar el

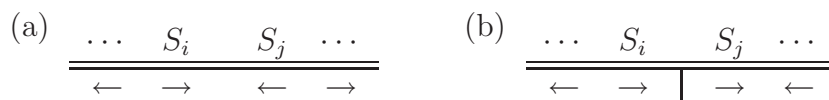


**Figura 7.9:** Exemples esquemàtics de cicles d'histèresi obtinguts amb (a) un model amb camps aleatoris incrementats  $\pm h$  i (b) amb un model amb integrals d'intercanvi incrementades. En els dos casos el cicle complet és simètric, però només el cicle parcial del cas (b) presenta EB.

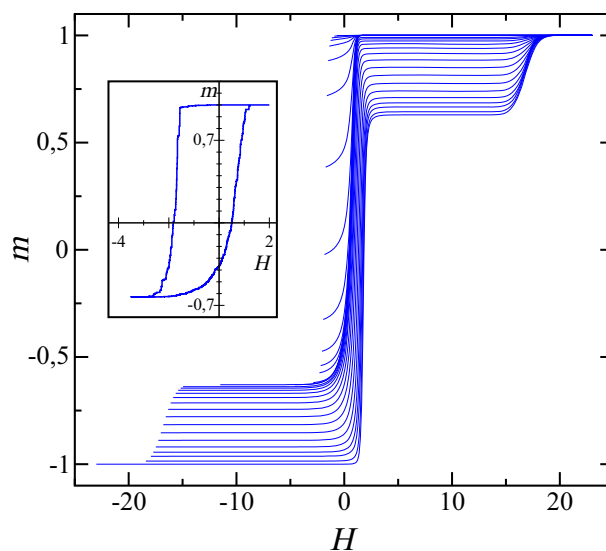
desordre el camp  $H_{EB}$  augmenta i en altres casos s'observa l'efecte contrari [133]. El nostre model és capaç de reproduir les dues possibilitats. A més, és important adonar-se de la dependència experimental no monòtona de  $H_{EB}$  amb el desordre descrita a les referències [114, 134, 135].

Finalment, un altre resultat remarcable del model és que els cicles que presenten EB també presenten un desplaçament vertical en l'eix d'imantació. Aquest efecte també ha estat observat experimentalment [129, 133, 136–138]. Encara que al considerar una fracció  $f$  molt petita, el desplaçament vertical també és petit i llavors és difícil d'observar experimentalment. La figura 7.14 mostra la dependència del desplaçament en imantació  $m_B$  en funció de  $H_{EB}$  per diferents valors de  $f$ . Els punts corresponen a diferents valors de  $\sigma$  entre 0 i 2. En vista d'aquests resultats, seria interessant mesurar aquest desplaçament per diferents sistemes experimentals.





**Figura 7.10:** Representació esquemàtica de dos spins  $S_i$  i  $S_j$  de la capa FM en (a) capa AFM ordenada i (b) en amb una frontera de domini en anti-fase.

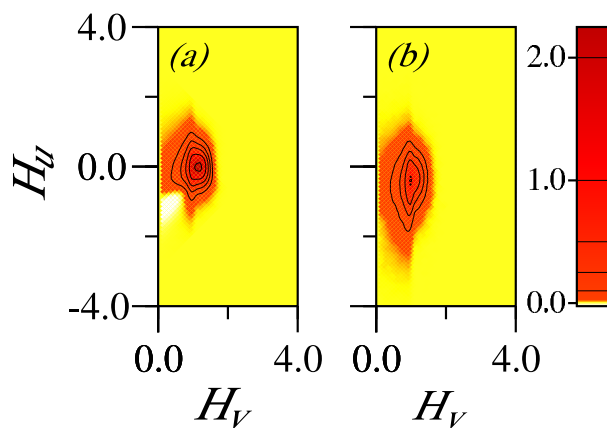


**Figura 7.11:** Conjunt de FORCS pel EE-RFIM. Corresponen a promitjos sobre 1000 realitzacions de desordre amb  $\sigma = 1.0$  i  $f = 0.05$ . La figura interior mostra un exemple de cicle d'histèresi amb EB obtingut amb els mateixos paràmetres, girant el camp a  $H = -4$ .

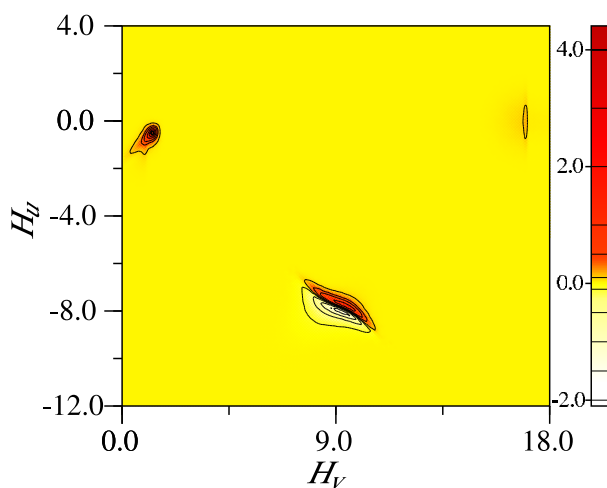
## 7.7 Sumari i conclusions

En aquest capítol hem presentat un model senzill (EE-RFIM) que ens ha permès estudiar el fenomen d'*Exchange Bias*. El model es basa amb el RFIM conduït amb un camp extern seguint una dinàmica metastable a  $T = 0$ . L'element essencial és l'existència d'una petita fracció d'enllaços ferromagnètics que han estat fortament augmentats. Aquest fet provoca un comportament reversible a la branca de baixada del cicle d'histèresi. Si quan s'arriba a aquest estat pseudo-saturat es canvia el sentit de conducció del camp extern, s'obté un cicle amb EB. S'han estudiat diferents propietats d'aquests cicles en funció de la fracció d'enllaços augmentats i del desordre del sistema. S'ha donat un possible mecanisme per justificar l'existència d'aquests enllaços incrementats a la capa FM que es basa en l'existència d'un acoblament de superintercanvi entre les dues capes.

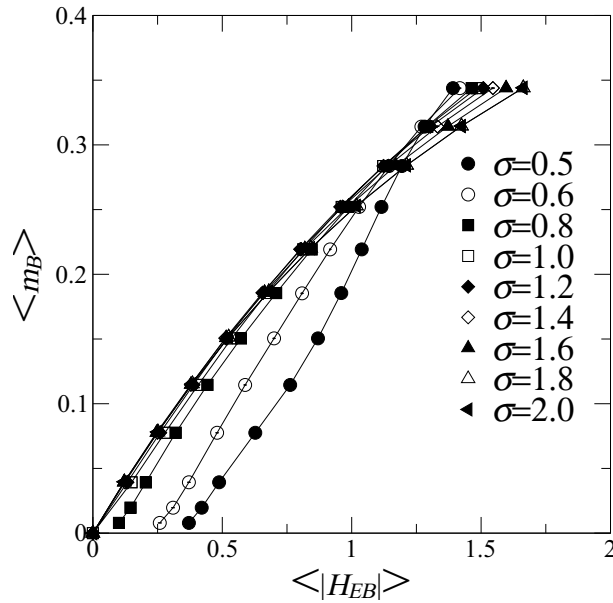
Les conclusions principals d'aquest estudi són: (i) l'EB és un efecte de ciclatge parcial, (ii) els sistemes amb l'AFM compensat que presenten cicles amb EB també presenten un desplaçament en la imantació. (iii) Molts dels comportaments experimentals relacionats amb l'EB com per exemple: els pics del camp coercitiu,



**Figura 7.12:** Diagrames FORC del RFIM (a) i del EE-RFIM (b) corresponent a  $\sigma = 2$ . L'escala de la dreta indica els valors  $\rho$ .



**Figura 7.13:** Diagrama FORC corresponen al conjunt de corbes de la figura 7.11.



**Figura 7.14:** Desplaçament de la imantació  $m_B$  en funció de  $H_{EB}$  per diferents valors de  $f \in (0, 0.01)$  i  $\sigma$ . Els diferents punts corresponen a sistemes amb diferents valors de  $\sigma \in (0, 2]$ . Les línies són interpolacions.

el desplaçament en la imantació, l'augment de la coercitivitat o la dependència no monòtona de  $H_{EB}$  amb el desordre es poden reproduir amb aquest model.

També hem obtingut els diagrames FORC's pel EE-RFIM. En aquests diagrames es posa de manifest l'EB amb un desplaçament del pic central. En el RFIM habitual el pic central dels diagrames FORC's es situa al camp  $H_u \simeq 0$  i en canvi pel EE-RFIM el pic central dels diagrames FORC's es situa al camp  $H_u < 0$ . Aquest corriment cap a valors negatius del camp  $H_u$  es fa més important al anar augmentant la concentració d'enllaços augmentats  $f$ . Les altres peculiaritats d'aquests diagrames pel model EE-RFIM són l'aparició d'una oscil·lació de  $\rho$  i l'aparició d'un pic secundari per valors grans de  $H_v$ .



# Capítol 8

## Conducció amb la imantació

### 8.1 Introducció

En aquest capítol ens disposem utilitzar el RFIM per intentar entendre el comportament dels sistemes conduïts amb la imantació. Fins ara hem considerat sistemes conduïts amb el camp  $H$  i la imantació era la resposta del sistema. En aquest capítol conduïrem el sistema amb la imantació, és a dir la imposarem externament, i el camp extern serà una variable de sortida que anomenem *camp resposta*. Des de un punt de vista més general, el que volem descriure és el comportament dels sistemes atèrmics en els que controlem la variable extensiva, la variable conjugada a la força intensiva. Casos en que es donen aquestes circumstàncies són per exemple les corbes dels materials amb memòria de forma que usualment s'obtenen controlant la deformació de la mostra i mesurant la força induïda [139]. També es pot utilitzar un mecanisme de control amb *feedback* que imposi una variació constant en el flux magnètic en el cas dels sistemes ferromagnètics amb una corba d'imatació amb molt pendent [140].

Pels sistemes en equilibri, controlar la força o la seva variable conjugada és equivalent ja que el sistema segueix una corba ben definida que correspon al mínim d'un potencial termodinàmic. Aquesta corba pot ser contínua o discontinua, com en el cas d'una transició de fase de primer ordre. La situació és més complicada quan les fluctuacions tèrmiques són tant petites que el sistema no pot superar les barreres energètiques i es queda en estats metastables lluny de l'equilibri. Els sistemes es comporten atèrmicament quan el sistema típicament no pot relaxar a l'equilibri en el temps d'escala experimental. Llavors aquest segueix un camí metastable que depèn de la història i no hi ha cap motiu per observar el mateix comportament pels dos protocols de control. De fet, hi ha evidències experimentals que els cicles d'histeresi obtinguts variant la variable extensiva ( $M$ ) presenten trajectòries amb un comportament re-entrant i grans fluctuacions en la mesura de la força o camp resposta [140].

Per tal de simular aquesta situació amb el RFIM a  $T = 0$  necessitem introduir una regla dinàmica que determini com girar els spins al canviar la imantació.

Òbviament hi ha diferents maneres de minimitzar l'energia localment i l'elecció de la dinàmica no és única. El que sí que cal demanar és que sigui una regla determinista, que ens permeti obtenir els mateixos resultats quan repetim les simulacions. En aquest treball, proposem una mínima modificació de la dinàmica metastable usual *1-spin-flip*. Per tant aquesta nova dinàmica podrà ser considerada com la dinàmica anàloga quan conduïm amb la imantació (protocol *M-driven*) de la dinàmica usada habitualment en el cas de conducció amb el camp extern (protocol *H-driven*) [2] que s'ha utilitzat en els capítols precedents. Podrem establir una connexió entre les trajectòries seguides pel sistema amb els dos protocols i els resultats per les quantitats macroscòpiques, com per exemple l'energia interna, podran ser comparats.

Un altra qüestió molt més complicada és la definició del camp magnètic com una variable resposta. La solució que adoptem és la més senzilla, encara que no es pot considerar completament satisfactòria. En un estudi recent [26] hem proposat un procediment alternatiu que estén el model a temperatura finita i defineix el camp com un multiplicador de Lagrange. Part dels resultats que es presentaran en aquest capítol s'han realitzat sobre una xarxa de Bethe amb connectivitat  $z = 4$  (equivalent a un graf aleatori amb la mateixa connectivitat) per poder utilitzar les expressions analítiques de les referències [80, 83] i les obtingudes al capítol 3. Comparar les simulacions amb aquests resultats exactes ens ajudarà a entendre les semblances i diferències entre els dos protocols.

A la secció 8.2 fem un breu recordatori de la dinàmica *H-driven* i introduïm la nova dinàmica *M-driven*. Els resultats de les simulacions sobre xarxes de Bethe es presenten a la secció 8.3 i els resultat per la xarxa cúbica a la secció 8.4. Resumim els resultats principals i concloem a la secció 8.5.

## 8.2 Model

El RFIM amb relaxació local d'un spin va ser específicament introduït per estudiar el cas *H-driven*. Usualment es parteix de l'Hamiltonià microscòpic  $\mathcal{H}$  que correspon a l'entalpia microscòpica magnètica, però pel present estudi és convenient introduir primer l'energia interna  $\mathcal{U}$ :

$$\mathcal{U} = - \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - \sum_i h_i S_i \quad (8.1)$$

on  $S_i = \pm 1$  són les variables de spin definides sobre cada nus  $i = 1, \dots, N$  de la xarxa. El primer sumatori s'estén sobre totes les parelles de primers veïns i els camps aleatoris  $\{h_i\}$  segueixen una distribució Gaussiana

$$f(h_i) = \exp(-h_i^2/2\sigma^2)/\sqrt{2\pi}\sigma \quad (8.2)$$

amb desviació estàndard  $\sigma$ . L'entalpia  $\mathcal{H}$  es defineix com:

$$\mathcal{H} = \mathcal{U} - HM \quad (8.3)$$

on  $M = \sum_i S_i$  és la imantació del sistema. En aquest estudi considerarem les xarxes de Bethe amb  $z = 4$  i les xarxes cúbiques. Tal i com ja s'ha fet en capítols anteriors, per obtenir resultats numèrics per les xarxes de Bethe farem simulacions sobre grafs aleatoris clàssics amb connectivitat  $z = 4$ . En les simulacions sobre xarxes cúbiques amb  $N = L^3$  nusos utilitzarem condicions periòdiques de contorn.

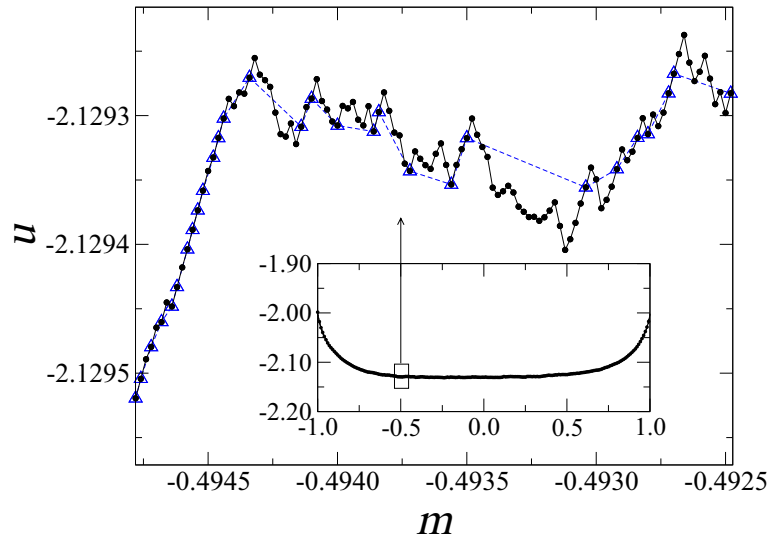
### 8.2.1 Dinàmica $H$ -driven

La dinàmica  $H$ -driven estàndard, tal i com ja s'ha explicat en el capítol 2, consisteix en minimitzar localment l'entalpia  $\mathcal{H}$ . A mesura que es canvia el camp extern  $H$  cada spin s'alinea amb el seu camp local  $f_i = \tilde{f}_i + H$  amb

$$\tilde{f}_i = \sum_{\langle j/i \rangle} S_j + h_i. \quad (8.4)$$

La suma s'estén sobre tots els  $z$  veïns del spin  $S_i$ . Llavors una configuració  $\{S_i\}$  és metastable quan tots els spins satisfan la condició

$$S_i = \text{sign}(\tilde{f}_i + H) \quad (8.5)$$



**Figura 8.1:** Comparació entre les trajectòries  $H$ -driven i  $M$ -driven en el pla energia-imantació.  $u = \mathcal{U}/N$  és l'energia interna per spin. Les dades corresponen a una realització de desordre amb  $\sigma = 2$  sobre un graf aleatori amb connectivitat  $z = 4$  i mida  $N = 10^5$ . Els triangles corresponen als estats visitats per la dinàmica  $H$ -driven que estan separats per les allaus (línies discontinües). Els punt són els estats visitats per la dinàmica  $M$ -driven.

La figura 8.1 mostra un exemple d'evolució  $H$ -driven en un graf aleatori amb connectivitat  $z = 4$ . Per poder comparar amb el protocol  $M$ -driven representem

l'energia interna per spin  $u = \mathcal{U}/N$  en funció de la imantació per spin  $m = M/N$ . Les dues quantitats estan parametritzades pel camp extern  $H$ . Els estats metastables  $\{S_i\}_1, \{S_i\}_2, \{S_i\}_3, \dots$  visitats per la dinàmica es representen amb triangles i les línies discontinües intermèdies indiquen les allaus. El número total d'estats quan canviem  $H$  des de  $-\infty$  a  $+\infty$  depèn de la quantitat de desordre i de la realització concreta de camps aleatoris. Típicament hi ha pocs estats quan  $\sigma$  és baixa, ja que la majoria de les allaus són grans, mentre que el número d'estats s'apropa al seu valor màxim  $N$  quan  $\sigma$  es fa gran.

Finalment cal destacar que les barreres energètiques entre els estats metastables queden completament definides per la dinàmica. De fet, la definició dels estats metastables, és a dir la regla d'estabilitat 8.5, no es pot separar de l'ús de la dinàmica de relaxació local d'un spin *1-spin-flip*. Tal i com s'ha vist al capítol 4 la dinàmica *2-spin-flip* representa una petita millora en la minimització local de l'entalpia. Aquesta millora es fruit de permetre els girs cooperatius de dos primers veïns que fa que obtinguem cicles d'histèresi molt més estrets sense canviar el comportament crític del sistema [75].

## 8.2.2 Dinàmica *M-driven*

Ara definim una dinàmica irreversible pel cas on la imantació del sistema és la quantitat que canviem externament. No hi ha camp extern i per tant el potencial termodinàmic que hem de minimitzar, encara que sigui localment, és l'energia interna  $\mathcal{U}$ . L'objectiu és generar una seqüència d'estats  $\{S_i\}_1, \{S_i\}_2, \{S_i\}_3, \dots$  on  $M$  sigui incrementada des de  $M = -N$  a  $M = +N$  amb canvis elementals  $\Delta M = 2$ . Tal i com s'ha dit a l'introducció del capítol, volem que aquesta dinàmica sigui el més anàloga possible a la dinàmica metastable d'un spin feta servir pel cas *H-driven*. Per exemple, podem demanar que els dos mecanismes de conducció siguin equivalents en el cas límit en que els spins es comporten independentment i la histèresi desapareix. Aquest comportament independent dels spins es pot donar o bé perquè les constants d'intercanvi tendeixen a zero  $J \rightarrow 0$  o bé perquè estem en el límit de molt desordre  $\sigma \rightarrow \infty$ ). En aquests casos límit hem de girar, per cada valor de  $M$ , el spin amb el camp aleatori més gran  $h_i^{max}$ . Llavors pel cas general proposem fer servir la dinàmica "extrema" més simple: girem els spins un per un (com en el cas de *H-driven*) i per cada valor de  $M$  escollim el spin que decreixi més l'energia interna o almenys el que la incrementi el mínim possible. Aquest és el spin amb el camp local més gran,  $\tilde{f}_i^{max}$ , i girar aquest spin comporta un canvi d'energia  $\Delta\mathcal{U} = -2\tilde{f}_i^{max}$ . Després de girar aquest spin, el camp local  $\tilde{f}_i$  dels veïns s'ha de recalculer i seguim aplicant aquest procediment fins que tots els spins han girat. Obtenim una seqüència d'estats diferent quan comencem des de  $M = +N$  i disminuïm la imantació, la qual cosa dóna un cicle d'histèresi. Podem remarcar que aquesta nova dinàmica comparteix alguna similitud amb la dinàmica "extrema" feta servir en els models senzills de *self-organized criticality* [141–143].

És fàcil adonar-se que el número total d'estats visitats per aquesta nova dinàmica és de  $N$  i la seqüència d'estats visitats conté tots els estats a que arribem amb la



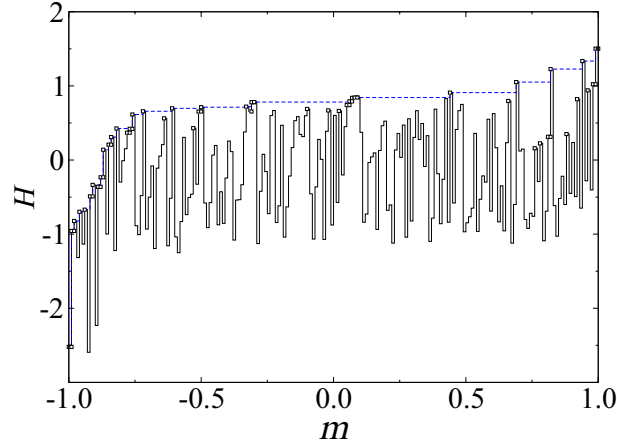
dinàmica *H-driven* com una subseqüència. Això és conseqüència de la propietat abeliana de la dinàmica *H-driven* i es pot entendre fàcilment si considerem que i) les dues dinàmiques comencen amb el mateix estat inicial (amb tots els spins  $S_i = -1$  o  $+1$ ), i ii) els spins que girem successivament amb la dinàmica *M-driven* són aquells que inicien una allau amb la dinàmica *H-driven* o aquells que giren dins l'allau. En altres paraules, la regla dinàmica que s'ha escollit genera una seqüència d'estats que poden ser obtinguts utilitzant la dinàmica *H-driven* si girem de manera apropiada els spins involucrats dins de les allaus. Aquest fet s'il·lustra a la figura 8.1 on es mostra la seqüència d'estats obtinguts amb les dues dinàmiques en el pla  $u - m$ . Es pot veure que la trajectòria *M-driven* és una mena de camí aleatori que uneix els estats metastables que pertanyen a la trajectòria *H-driven*.

Una qüestió més problemàtica fa referència a la definició del camp  $H$  associat als canvis en imantació. Tal i com es discuteix posteriorment amb més detall, apareix una dificultat relacionada amb que molts dels estats visitats per la dinàmica no són metastables. Dins aquest marc, que un estat no sigui metastable significa que no es possible trobar un camp extern  $H$  que permeti satisfer la condició (8.5) per tots els spins. Aquesta impossibilitat és a causa de que el camp local  $f_i$  d'alguns spins que estan avall és més gran que el camp local d'alguns spins que estan amunt. A partir de l'equació (8.5) és fàcil veure que la condició per què una configuració microscòpica  $\{S_i\}$  sigui metastables per algun valor de  $H$  és que  $\tilde{f}_i^{\min}$ , el valor mínim dels camps locals dels spins que estan amunt, sigui més gran que  $\tilde{f}_i^{\max}$ , el valor màxim dels camps locals dels spins que estan avall. Aquesta situació és totalment diferent a la que es proposa a la referència [26] que es considera el RFIM amb un model de camp mig local i tots els estats obtinguts amb la dinàmica *M-driven* són metastables. Una dificultat addicional és que no tenim una manera òbvia de definir una quantitat intensiva conjugada a  $M$  que jugui el mateix paper que el multiplicador de Lagrange que s'introdueix a la referència [26]. La solució simple que proposem és la de definir el camp com aquell que hem d'aplicar per anar de l'estat  $M$  a  $M + \Delta M$  fent un treball mínim. Llavors el camp s'identifica amb la força interna,

$$H(m) \equiv \Delta\mathcal{U}/\Delta M = -\tilde{f}_i^{\max}(m) . \quad (8.6)$$

Per tal de permetre la comparació amb la dinàmica *H-driven* fem servir la mateixa notació pel camp extern i pel camp resposta. Pels estats que són comuns a les dues dinàmiques, el camp definit per l'equació (8.6) és exactament el camp extern pel qual aquests estats són metastables.  $H(m)$  no és una funció monòtona creixent de la imantació. De fet, tal i com es veu a la figura 8.2 pel cas de sistemes molt petits, fluctua molt amb  $m$ . Aquest comportament és molt diferent del que s'observa per la imantació pel cas *H-driven*. És important adonar-se que es pot deduir la trajectòria *H-driven* a partir de la trajectòria *M-driven*. Per fer-ho podem posar la imantació en l'eix horitzontal, llavors la trajectòria *H-driven* és l'envolvent que connecta els màxims de la trajectòria *M-driven*  $H(m)$ .

Una conseqüència directa de l'equació (8.6) és que la dinàmica *M-driven* no



**Figura 8.2:** Comparació entre les trajectòries  $H$ -driven (línia discontinua) i  $M$ -driven (línia contínua) en el pla camp-imatció. Les dades corresponen a una realització de desordre amb  $\sigma = 2$  en un graf aleatori amb connectivitat  $z = 4$  i mida  $N = 200$ . Els símbols representen els estats metastables segons la dinàmica  $1$ -spin-flip. Alguns d'aquests estats no pertanyen a la trajectòria  $H$ -driven.

dissipa energia. De fet, com que el treball  $H\Delta M$  es igual a la variació d'energia interna, l'àrea de qualsevol cicle tancat en que es torni al mateix estat microscòpic del qual s'ha partit és zero. Aquest fet contrasta amb el que succeeix pel cas  $H$ -driven en que el treball és més gran que  $\Delta U$  dins de les allaus. Malgrat que els cicles experimentals obtinguts amb les dinàmiques  $M$ -driven tenen una àrea molt més petita que els cicles  $H$ -driven [140], no és cert que la dissipació sigui zero. Tornarem a discutir sobre aquest fet a la secció 8.5 on es proposaran algunes possibles modificacions a la definició del camp per tal d'evitar aquesta propietat amb poc sentit físic.

### 8.2.3 Fluctuacions i quantitats *self-averaging*

Els dos procediments descrits anteriorment permetent realitzar simulacions per sistemes finits amb una certa realització de camps aleatoris  $\{h_i\}$ . Per poder comparar amb els experiments hauríem de considerar el límit termodinàmic  $N \rightarrow \infty$ . Per tant és desitjable que els resultats siguin *self-averaging*, és a dir que no depenguin, en el límit termodinàmic, de la realització de desordre.

La situació és completament diferent quan controlem el camp extern  $H$  o la imantació  $M$ . En el primer cas, podem dividir el sistema macroscòpic en molts subsistemes macroscòpics que estan tots ells sotmesos al mateix camp extern. Llavors seguint l'argument estàndard [144], lluny de la criticalitat, el valor de la densitat de qualsevol quantitat extensiva pel sistema total, per exemple la imantació  $m(H)$ , és igual al promig dels valors d'aquesta quantitat sobre tots els subsistemes. Segons el teorema central del límit aquesta quantitat es distribueix seguint una distribució de probabilitat Gaussiana i és (fortament) *self-averaging*

[39]. En canvi, pel segon cas, no podem dividir el sistema en subsistemes amb la mateixa imantació i l'argument estàndard no es pot aplicar. Això implica que (i) hem d'estudiar el comportament de les fluctuacions estadístiques de l'observable al augmentar la mida del sistema per decidir si l'observable és *self-averaging* o no, i (ii) s'ha de ser cautelós en donar un significat físic als promitjos sobre desordre.

Per analitzar el caràcter *self-averaging* d'un observable  $X$  hem de calcular els histogrames d'aquest, a partir de moltes realitzacions de desordre, per una certa mida fixada  $N$ . Aquest histograma ens donarà la distribució de probabilitat  $P_N(X)$ . Estudiem ara el comportament de la variança  $V_X = \langle X^2 \rangle_M - \langle X \rangle_M^2$  al incrementar  $N$ . La simbologia  $\langle \cdot \rangle_M$  significa el promig sobre desordre a una  $M$  constant, que s'ha de distingir de  $\langle \cdot \rangle_H$  que és el promig sobre desordre per un camp  $H$  constant. Direm que l'observable  $X$  és (fortament) *self-averaging* si  $V_X \sim 1/N$  quan  $N \rightarrow \infty$ .

### 8.3 Resultats per la xarxa de Bethe amb $z = 4$

En aquesta secció presentem els resultats numèrics obtinguts a partir de simulacions amb la dinàmica *M-driven* sobre grafs aleatoris de connectivitat fixada  $z = 4$ . Per completesa, primer recordem les expressions analítiques que s'han obtingut per la branca inferior del cicle d'histèresi al capítol 3 de la tesi. A partir de les equacions (3.17) i (3.16) trobem la imantació promig per spin en funció del camp extern

$$\langle m \rangle_H = 2 \sum_{n=0}^z \binom{z}{n} [P_l^*(H)]^n [1 - P_l^*(H)]^{z-n} p_n(H) - 1, \quad (8.7)$$

i a partir de les equacions (3.38) i (3.45) trobem l'energia interna promig per spin en funció del camp extern

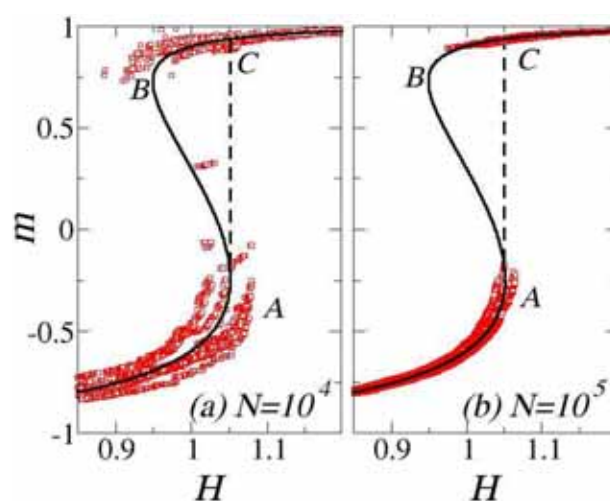
$$\langle u \rangle_H = -\frac{1}{2} z J + \sum_{n=0}^z \binom{z}{n} [P_l^*(H)]^n [1 - P_l^*(H)]^{z-n} \left\{ 2Jn(1 - p_n(H)) - \frac{2\sigma}{\sqrt{2\pi}} \exp \left[ -\frac{(-J(2n - z) - H)^2}{2\sigma^2} \right] \right\} \quad (8.8)$$

A part, també usarem l'expressió de la probabilitat per spin que una allau s'iniciï quan augmentem el camp des de  $H$  a  $H + dH$  a la branca inferior del cicle d'histèresi. Aquesta probabilitat és  $G(H)dH$ , on

$$G(H) = \binom{z}{n} [P_l^*(H)]^n [1 - P_l^*(H)]^{z-n} \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp \left[ -\frac{(-J(2n - z) - H)^2}{2\sigma^2} \right] \quad (8.9)$$

(aquesta expressió correspon a l'equació (14) de la referència [83] amb  $x = 1$ ). Aquestes expressions analítiques depenen de la quantitat  $P_l^*(H)$  que hem calculat a la secció 3.3, on hem vist que l'equació auto-consistent que ens permet trobar aquesta quantitat (3.9) té tres solucions reals per un cert rang de  $H$  per sota  $\sigma_c$ .

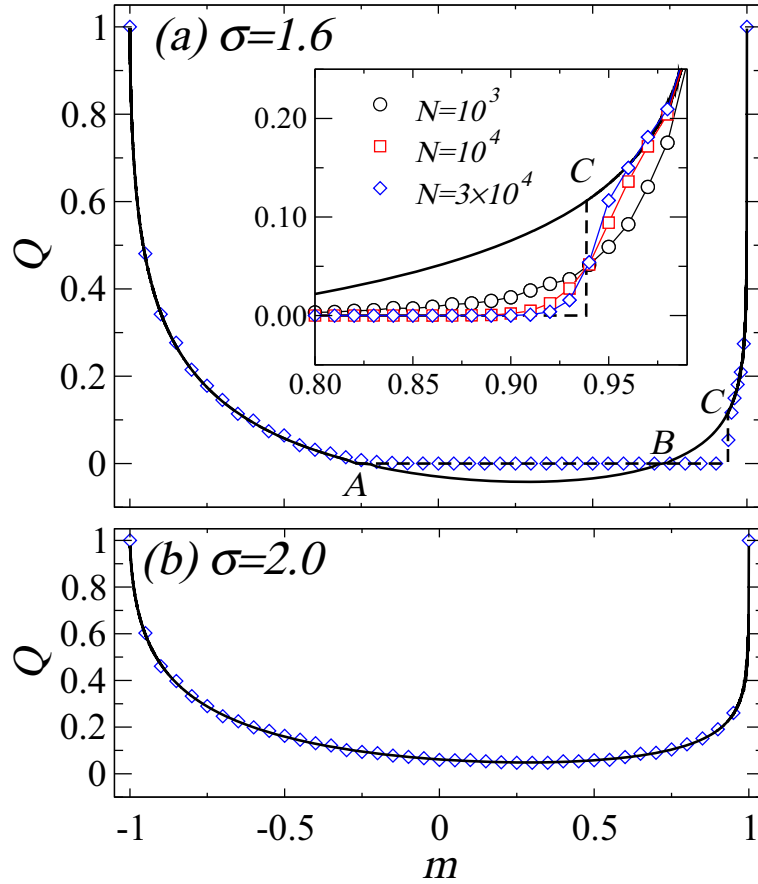
Per tant la corba d'imantació obtinguda a partir de l'equació (8.7) té una forma que anomenem *S-shape* [80], tal com s'il·lustra a la figura 8.3. La solució física correcta, que coincideix amb la branca inferior del cicle d'histèresi, correspon a la solució més petita. Per un cert valor de  $H$ , aquesta solució desapareix (es torna complexa) i llavors  $P_l^*(H)$  salta a la solució més gran provocant una discontinuïtat en la imantació associada a l'existència d'una allau infinita. En aquest context, la branca intermèdia i inestable de la corba *S-shape* (i.e. dels punts A al B a la figura) no té significat físic. Per altra banda, la branca BC s'hi pot arribar a través dels FORC's obtinguts a partir de la branca de baixada del cicle d'histèresi [101] tal i com s'ha vist a la secció 3.8.



**Figura 8.3:** Branca inferior del cicle d'histèresi amb dinàmica *H-driven* per una xarxa de Bethe amb connectivitat  $z = 4$  per  $\sigma = 1.6$ . La línia contínua correspon a la solució de les equacions (8.7). Els símbols representen tots els estats metastables obtinguts al llarg de les trajectòries *M-driven* per 10 realitzacions de desordre sobre grafs aleatoris per la mida  $N = 10^4$  (a) i  $10^5$  (b).

### 8.3.1 Fracció d'estats metastables

Tal com es pot veure a la figura 8.2 que correspon a simulacions per sistemes petits, hi ha alguns estats al llarg de la trajectòria *M-driven* que són metastables encara que no pertanyin a la subseqüència *H-driven*. Naturalment, el fet de que un estat visitat per la dinàmica sigui metastable o no dependrà de la realització de desordre considerada. Per tant, és útil introduir la quantitat  $Q(m)$  que representa la fracció promig d'estats que són metastables. Tal com es mostra a la figura 8.3, aquests estats metastables addicionals apareixen amb menys freqüència a mesura que la mida del sistema augmenta i hi ha evidències numèriques que mostren que desapareixen totalment en el límit termodinàmic. Per tant, quan  $N \rightarrow \infty$ ,  $Q(m)$  representa la fracció promig d'estats metastables al llarg de la trajectòria *H-driven*.



**Figura 8.4:** Fracció  $Q(m)$  d'estats metastables al llarg de la branca inferior del cicle d'histèresi per la xarxa de Bethe amb  $z = 4$ . Els punts A, B i C són els mateixos que a la figura 8.3. Els símbols són els resultats de simulacions numèriques de la dinàmica  $M$ -driven. La línia contínua correspon a l'expressió analítica (8.10) i la línia discontinua indica l'allau infinita per sota  $\sigma_c$ . El dibuix interior de (a) mostra que  $Q(m)$  convergeix a 0 entre els punts B i C en el límit termodinàmic.

Els resultats de les simulacions amb la dinàmica  $M$ -driven per sota i per sobre  $\sigma_c$  per diferents mides es mostren a la figura 8.4. Per  $\sigma > \sigma_c$  trobem que  $Q(m)$  és mínim en el rang de  $m$  que correspon a la regió amb més pendent de la corba d'imantació amb la dinàmica  $H$ -driven on les allaus són més grans. Per  $\sigma < \sigma_c$ , tenim que  $Q(m) = 0$  en el rang de l'allau infinita, incloent la porció BC de la corba d'imantació tal i com es pot veure a la figura interior de la figura 8.4(a).

El fet que la quantitat  $Q(m)$  sigui més petita que 1 (excepte per  $m = \pm 1$ ) és sorprenent i necessita alguna interpretació. Amb el protocol  $H$ -driven hi ha una certa probabilitat, per un sistema finit, que per un valor de  $M$  correspongui a una porció horitzontal de la corba d'imantació (estat metastable) o a un salt vertical (una allau). Malgrat que la corba d'imantació és contínua en el límit termodinàmic (excepte pel salt per sota  $\sigma_c$ ), la probabilitat de caure un estat metastable és més petita que 1 quan  $N \rightarrow \infty$ . Dit d'una altra manera,  $Q(m)$  té

en compte la presència aleatòria de forats a la corba d'imantació corresponents a les allaus. Aquest fet suggereix que  $Q(m)$  està relacionat amb la probabilitat de tenir un allau al canviar el camp extern entre  $H$  i  $H + dH$ , on  $H$  és el camp corresponent a  $m$  en el límit termodinàmic. Aquesta probabilitat ve donada per la quantitat  $G(H)$  definida en l'equació (8.9) i la relació buscada és

$$Q(m) = 2G(H) \frac{dH}{dm} \quad (8.10)$$

on  $dH/dm$  és l'invers del pendent de la corba d'imantació en el límit termodinàmic, quantitat que podem computar fàcilment a partir de l'equació (8.7). A la figura 8.4 es pot observar que la coincidència entre les simulacions i la corba analítica és molt bona. Per demostrar l'equació (8.10) hem d'assumir que l'esdeveniment de que el sistema presenti una allau a mesura que incrementem  $H$ , correspon a un procés de Poisson no estacionari [2]. Per un sistema finit de mida  $N$ , tenim un allau a l'interval  $dH$  amb una ràtio  $dP/dH = NG(H)$ . El rang mig d'estabilitat  $\langle \Delta H \rangle_H$  d'un estat metastable abans que es produeixi un allau està donat per l'invers de la ràtio, és a dir

$$\langle \Delta H \rangle_H \sim \frac{1}{NG(H)} \quad (8.11)$$

Aquesta quantitat es fa infinitesimal en el límit termodinàmic. Donat que només els estats metastables contribueixen a la variació de  $H$  en l'interval  $M, M + 2$ , ja que durant les allaus el camp es manté constant, el pendent promig de la corba d'imantació al límit termodinàmic és

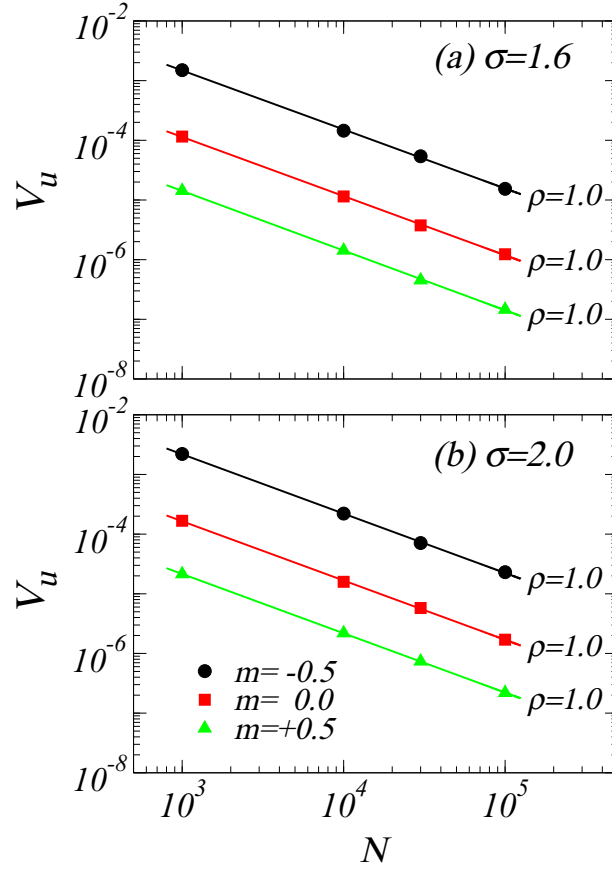
$$\frac{dH}{dm} = Q(m) \lim_{N \rightarrow \infty} N \frac{\langle \Delta H \rangle_H}{\Delta M} \quad (8.12)$$

que ens condueix a l'equació (8.10).

És interessant remarcar que l'equació (8.10) dona valors finits i positius de  $Q(m)$  entre B i C a la figura 8.4(a) quan calculem  $m(H)$  fent servir la solució més gran de l'equació (3.9). Tal i com s'ha comentat anteriorment, aquesta part del cicle d'histeresi *H-driven* es pot obtenir aplicant una història de camp concreta començant des de la saturació, això implica que la fracció d'estats metastables no és zero. Per altra banda, obtenim un resultat negatiu sense significat per  $Q(m)$  entre els punts A i B on el resultat físicament correcte és  $Q(m) = 0$ , que indica que totes les configuracions són inestables. Aquest valor s'obté imposant  $dm/dH \rightarrow \infty$  a l'equació (8.10).

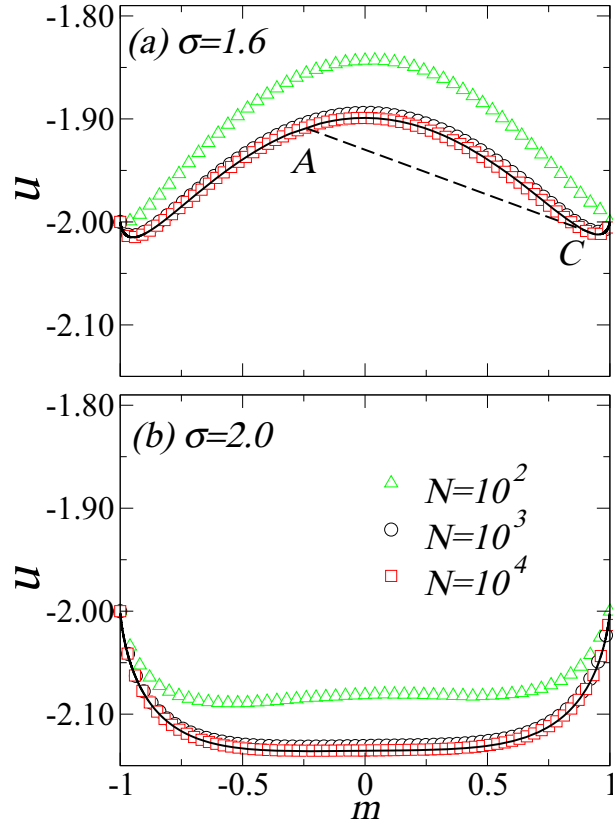
### 8.3.2 Energia interna

En aquest apartat discutim els resultats de les simulacions numèriques de l'energia interna per spin  $u(m)$ . A la figura 8.5 representem en escala logarítmica la variància  $V_u(m) = \langle u(m)^2 \rangle_M - \langle u(m) \rangle_M^2$  en funció de la mida del sistema  $N$  per certs



**Figura 8.5:** Variança de l'energia interna  $V_u(m)$  per spin  $u(m)$  en funció de la mida del sistema per grafs aleatoris amb connectivitat  $z = 4$  per certs valors seleccionats de  $m$ . S'han realitzat promitjos sobre  $10^4$  realitzacions de desordre. Per clarificar la figura, les variàncies de  $m = 0$  i  $m = 0.5$  s'han dividit per 10 i 100 respectivament. Les línies són ajustos de la forma  $V_u(m) \sim N^{-\rho}$  amb  $\rho \simeq 1.0$  per tots els casos.

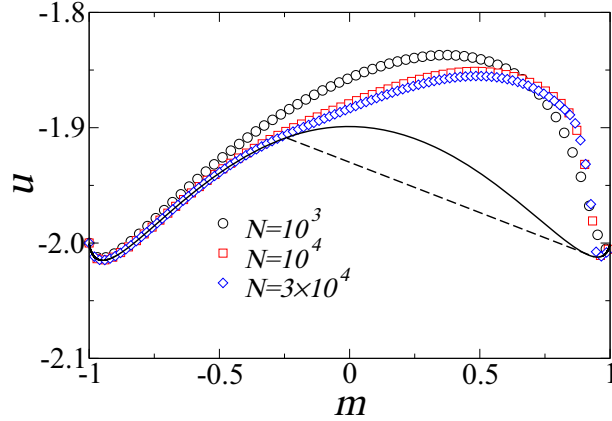
valors seleccionats de  $m$ . Tant per sobre com per sota de  $\sigma_c$  trobem que  $V_u(m)$  decreix com  $1/N$ , mostrant que l'energia és una quantitat fortament *self-averaging*. Aquest resultat, que a priori no és obvi, permet usar el valor mig de  $u(m)$  per comparar amb els resultats exactes obtinguts amb la dinàmica *emphH*-driven en el límit termodinàmic. Malgrat que l'energia  $\langle u(m) \rangle_M$  és *self-averaging* pot ser que aquesta quantitat no estigui ben definida físicament tal i com s'ha explicat anteriorment, però podem usar els promitjos sobre desordre per eliminar els efectes de les realitzacions concretes de desordre i obtenir un resultat que depengui únicament de la quantitat de desordre  $\sigma$ . A la figura 8.6 comparem  $\langle u(m) \rangle_M$ , que obtenim a partir de les simulacions, amb  $\langle u(m) \rangle_H$ , que obtenim representant  $\langle u \rangle_H$  en funció de  $\langle m \rangle_H$ , considerant el camp  $H$  com un paràmetre. Quan estem per sota del desordre crític  $\sigma < \sigma_c$ , hi ha un salt en la imantació i la corresponen discontinuïtat a  $\langle u(m) \rangle_H$  es representa amb una línia discontinua. La línia contínua representa l'energia interna al llarg de la part intermèdia i inestable de la corba



**Figura 8.6:** Energia interna per spin en la xarxa de Bethe amb  $z = 4$  per  $\sigma = 1.6 < \sigma_c$  i per  $\sigma = 2.0 > \sigma_c$ . Els símbols són els resultats de les simulacions de l'algorisme *M-driven* sobre grafs aleatoris per diferents mides fent  $10^4$  promitjos sobre desordre. La línia contínua correspon a l'expressió analítica de l'equació (8.8). La línia discontinúta indica la discontinuïtat associada a l'allau infinita per  $\sigma < \sigma_c$ .

d'imantació. També podem estudiar com el comportament de  $u(m)$  canvia amb  $\sigma$ . Per desordres petits l'energia té una estructura de doble pou mentre que per valors més grans de desordre el comportament d'aquesta presenta un únic pou. Aquest canvi de comportament té lloc a  $\sigma \simeq 2.0$  i no sembla que estigui relacionat al valor crític de desordre  $\sigma_c$  del cas *H-driven*, en el que la discontinuïtat en la imantació desapareix. De les gràfiques també es pot observar que les corbes no són simètriques respecte  $m = 0$ , per tant hi ha histèresi quan representem la trajectòria que obtenim al augmentar la imantació i la trajectòria que obtenim al disminuir-la. El fet més remarcable de la figura 8.6 és que el promig de l'energia interna obtingut amb l'algorisme *M-driven* sembla coincidir, en el límit termodinàmic, amb la corba analítica obtinguda a partir de l'equació (8.8) fins i tot quan  $m$  està a la zona de l'allau infinita per  $\sigma < \sigma_c$ . Hem comprovat amb detall que aquest comportament no estigui lligat a efectes de la mida finita del sistema tal i com es pot veure a la figura 8.6. Per les simulacions amb mida  $N = 10^4$ , la diferència entre els resultats de les simulacions i la corba obtinguda a partir de les expressions analítiques anteriors és de  $10^{-3}$ . Aquest resultat sembla confirmar la





**Figura 8.7:** Els mateixos casos que a la figura 8.6 però utilitzant una variació de la dinàmica  $M$ -driven. En aquesta girem el spin que decreix menys l'energia dins de les allaus.

coincidència de les dues corbes.

La coincidència de l'energia al llarg de les dues trajectòries, per  $\sigma > \sigma_c$  on totes les allaus són de mida microscòpica, es deu a que tots els estats metastables difereixen només amb una quantitat finita (és a dir que no és extensiva) de spins. Per tant, l'energia d'aquests estats no pot variar amb una quantitat extensiva i s'ha de complir que

$$\langle u(m) \rangle_M = \langle u(m) \rangle_M^{stable} = \langle u(m) \rangle_M^{unstable} \quad (8.13)$$

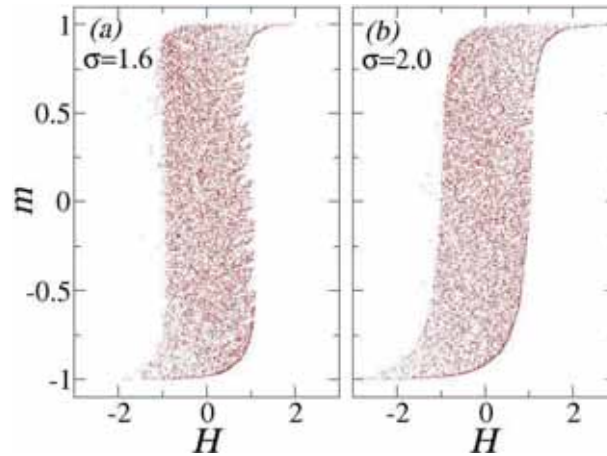
en el límit termodinàmic tal i com es pot comprovar numèricament. Com que l'energia i la imantació són quantitats *self-averaging* els primitjos que es fan fixant  $m$  o fixant  $H$  condueixen al mateix resultat. Llavors,

$$\langle u(m) \rangle_H \equiv \langle u(m) \rangle_H^{stable} = \langle u(m) \rangle_M^{stable} = \langle u(m) \rangle_M . \quad (8.14)$$

El més sorprenent és que la igualtat  $\langle u(m) \rangle_H = \langle u(m) \rangle_M$  sigui vàlida dins de l'allau infinita quan usem la solució sense sentit físic de l'equació (3.9) per calcular  $\langle u(m) \rangle_H$  al llarg de la branca inestable de la corba d'imantació en la dinàmica  $H$ -driven. No podem donar una explicació òbvia per aquest resultat, però volem remarcar que depèn crucialment de l'ordre escollit en que girem els spins durant les allaus. De fet tal i com es pot veure a la figura 8.7, obtenim una corba diferent  $\langle u(m) \rangle_M$  si optem, per exemple, per girar el spin que disminueixi menys l'energia. Per tant, la dinàmica  $M$ -driven que hem escollit és precisament aquella que fa que els resultats numèrics de l'energia interna calculats amb la dinàmica  $M$ -driven coincideixin amb els resultats analítics calculats amb les expressions del capítol 3, corresponents al protocol  $H$ -driven. Aquest fet suggereix que darrera del càlcul probabilístic desenvolupat al capítol 3 [80] potser hi ha algun principi de minimització que fixa la trajectòria al llarg de la branca inestable.

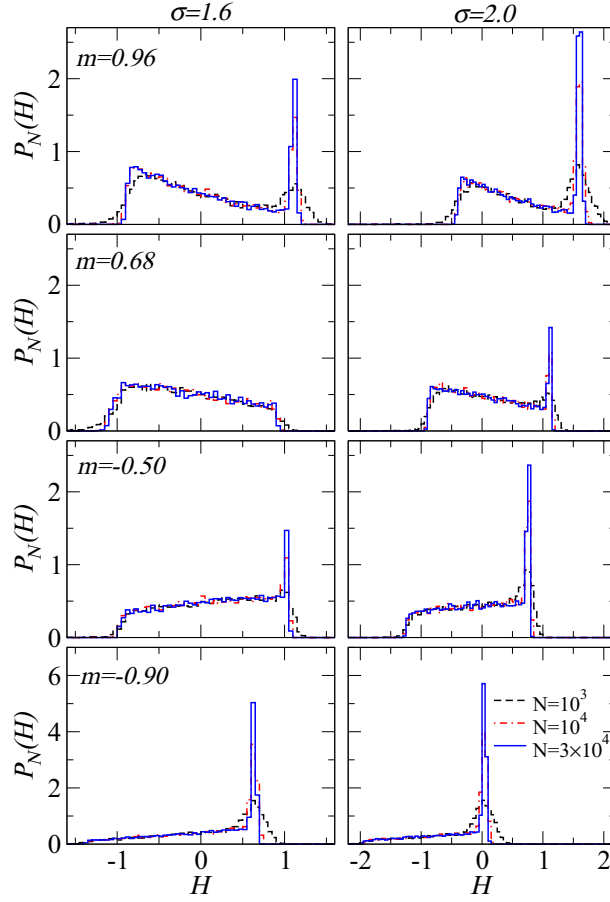
### 8.3.3 Comportament estadístic del camp resposta

Tal com es pot veure a les figures 8.2 i 8.8, el camp resposta  $H(m)$  (definit per l'equació 8.6) presenta un comportament discontinu i aleatori amb la imantació. Quan un spin gira, el camp local dels seus veïns canvia amb  $\pm 2$ , aquesta és aproximadament la mida de les fluctuacions observades a la figura 8.8. Naturalment aquestes fluctuacions no tenen una dependència amb la mida del sistema i el mateix comportament s'ha d'observar en el límit termodinàmic. Tornarem a analitzar aquesta qüestió tant rellevant a la secció 8.5. Una altra conseqüència de la definició del camp com una quantitat extremal és que presenta grans fluctuacions per diferents realitzacions de desordre. La seva variança no decreix amb  $N$ , la qual cosa significa que cada realització té un comportament diferent respecte les altres, fins hi tot en el límit termodinàmic. Malgrat tot, és interessant estudiar amb detall la distribució de probabilitat  $P_N(H; m)$  per diferents valors de  $m$  tant per sobre com per sota  $\sigma_c$ .



**Figura 8.8:** Branca de pujada de la trajectòria  $M$ -driven en el pla camp-imantació. Les dades corresponen a un graf aleatori de mida  $N = 10^4$  i connectivitat  $z = 4$ . S'ha considerat únicament una sola realització de desordre.

L'evolució dels histogrames normalitzats en funció de la mida del sistema es mostra a la figura 8.9. Es pot observar que les distribucions són amples i amb un comportament complex. Presenten un pic molt ben definit al costat dret de l'histograma. A mesura que augmentem la mida del sistema  $N$  la alçada del pic augmenta i la seva amplada disminueix. Aquest pic no apareix per  $\sigma < \sigma_c$  quan  $m$  està al rang de l'allau infinita, per exemple pel cas  $\sigma = 1.6$  i  $m = 0.68$ . A part del pic, presenten una altra contribució que s'estén en un rang finit i que és casi independent de la mida, això provoca que el camp no sigui una quantitat *self-averaging*. Analitzant la seqüència de microestats al llarg de cada trajectòria  $M$ -driven hem comprovat que aquestes dues contribucions provenen dels estats metastables i dels estats no metastables respectivament. Com que no hi ha altres estats metastables que aquells que provenen de la corba d'imantació  $H$ -driven, tal



**Figura 8.9:** Histogrames normalitzats del camp resposta  $H$  per diferents valors de  $m$  i diferents mides de sistema. Les dades corresponen a promitjos sobre  $10^4$  realitzacions de desordre.

i com es mostra a la figura 8.3, fem la conjectura que la distribució  $P_N(H; m)$  té la següent forma asimptòtica:

$$P_\infty(H; m) = Q(m)\delta(H - \hat{H}) + [1 - Q(m)]w(H; m) \quad (8.15)$$

on  $\delta(H - \hat{H})$  és una delta de Dirac centrada al valor  $\hat{H}(m)$ , que és el camp al llarg de la corba d'imantació obtinguda amb el protocol  $H$ -driven (i.e. invertint la funció  $m(H)$  i expressant el camp en funció de la imantació). La funció  $w(H; m)$  és una distribució contínua en un interval finit  $\{H_{min}(m), H_{max}(m)\}$ . A més hi ha fortes evidències numèriques que  $H_{max}(m) = \hat{H}(m)$  per  $\sigma > \sigma_c$  i per  $\sigma < \sigma_c$  fora del rang de l'allau infinita. En el rang on apareix l'allau infinita es compleix que  $H_{max}(m) < \hat{H}(m)$ .

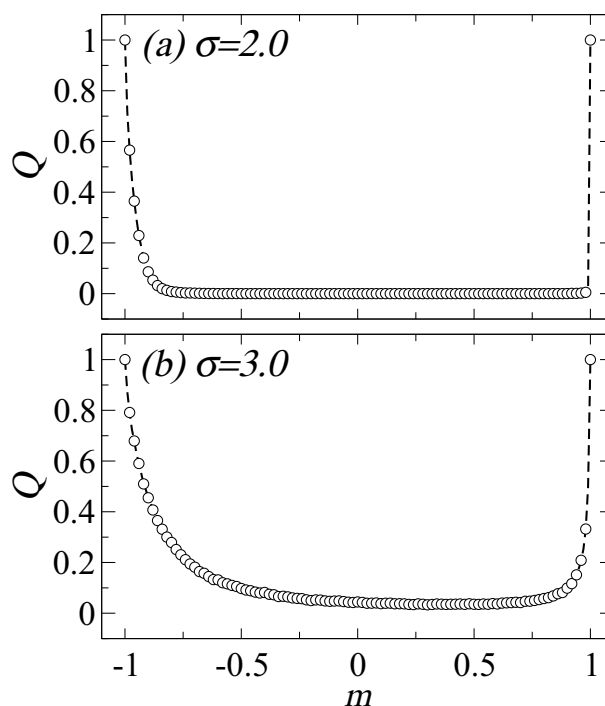
El comportament estadístic del camp per un valor donat de la imantació és diferent segons si estem per sobre o per sota de  $\sigma_c$ . Per  $\sigma > \sigma_c$ , el valor més probable de  $H(m)$  és el corresponent a la corba d'imantació  $H$ -driven, però hi ha una probabilitat finita que prengui un valor més petit. Per  $\sigma < \sigma_c$  i  $m$  dintre el

rang de l'allau infinita tenim  $Q(m) = 0$  i el pic desapareix. En aquest rang el valor del camp té un comportament estocàstic i distribuït segons  $w(H; m)$ .

## 8.4 Resultats per la xarxa cúbica

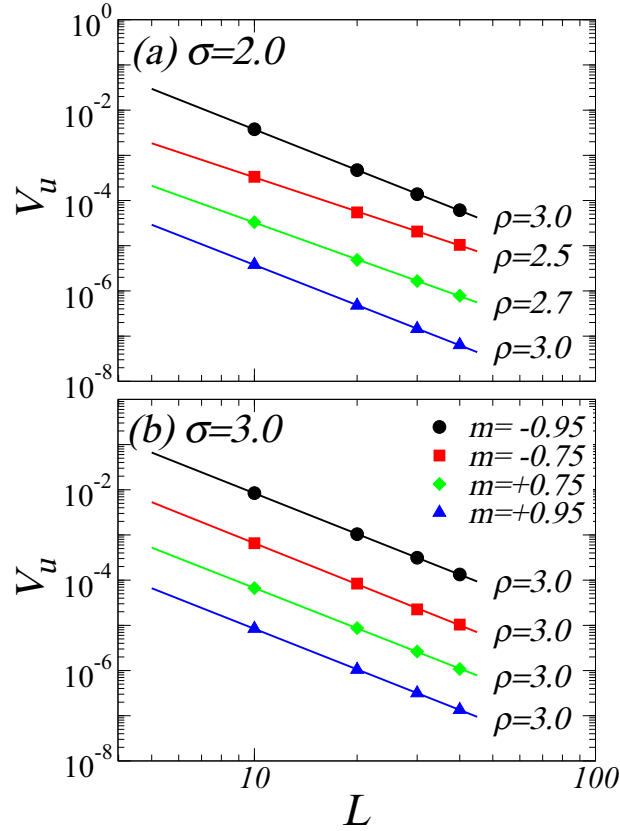
El que hem analitzat fins ara són resultats per xarxes de Bethe. Resultats molt similars s'obtenen per la xarxa cúbica. En aquest cas, el comportament en el límit termodinàmic del protocol  $H$ -driven no es pot resoldre analíticament i hem de fer simulacions en sistemes finits.

La figura 8.10 mostra la fracció d'estats metastables al llarg de la trajectòria  $M$ -driven. Les corbes són similars a les que es mostren a la figura 8.4 excepte que presenten una asimetria superior. Tornem a trobar  $Q(m) = 0$  quan  $m$  es troba dins el rang de l'allau infinita de la trajectòria  $H$ -driven per sota  $\sigma_c$ .



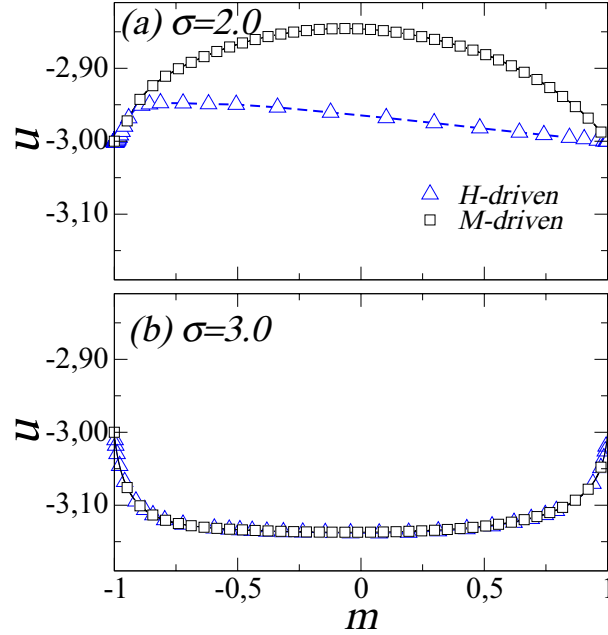
**Figura 8.10:** Fracció  $Q(m)$  d'estats metastables al llarg de la trajectòria  $M$ -driven en una xarxa cúbica (només es mostra la branca ascendent). La mida de la xarxa és  $L = 30$  i els promitjos s'han fet sobre  $3 \times 10^4$  realitzacions de desordre.

La figura 8.11 mostra que l'energia interna obtinguda amb l'algorisme  $M$ -driven és una quantitat *self-averaging* tant per sobre com per sota  $\sigma_c$  ( $\sigma_c \simeq 2.2$ ). Sembla que la variança disminueix més lentament que  $1/L^3$  quan  $m$  està en el rang de l'allau infinita. Aquest comportament de les fluctuacions pot ser degut al fet que  $\sigma = 2$  és un valor proper al valor crític  $\sigma_c$ . En general no esperem que els sistemes desordenats crítics siguin *self-averaging* [145].



**Figura 8.11:** Variança  $V_u(m)$  de l'energia interna per spin  $u(m)$  per una xarxa cúbica per certs valors de  $m$  en funció de la mida del sistema. Els promitjos estan fets sobre més de  $3 \times 10^4$  realitzacions de desordre. Per clarificar la figura, les variàncies per  $m = -0.75, m = 0.75$  i  $m = 0.95$  les hem dividit per 10, 100 i 1000 respectivament. Les línies són ajustos de la forma  $V_u(m) \sim L^{-\rho}$ .

La comparació entre els dos algorismes per l'energia interna en funció de  $m$  es realitza a la figura 8.12. Per aquest tipus de xarxes l'energia també presenta una estructura de doble pou per desordres baixos, malgrat que els dos mínims estan molt propers a  $m = \pm 1$ . Només hi ha un mínim per sobre de  $\sigma \approx 3$ , que és un valor bastant diferent a  $\sigma_c$ . Sembla que els dos algorismes donen la mateixa energia en el límit termodinàmic fora del rang de l'allau infinita, malgrat que per les xarxes cúbiques els efectes de mida finita són molt més importants que per les xarxes de Bethe. Finalment els histogrames del camp  $H(m)$  es mostren a la figura 8.13. El comportament global d'aquests és similar al que mostra la figura 8.9 i conjecturem que la forma asimptòtica de la distribució de probabilitat també ve donada per l'equació 8.15. De tota manera la part contínua  $w(H; m)$  té una forma molt diferent que en el cas de la xarxa de Bethe.

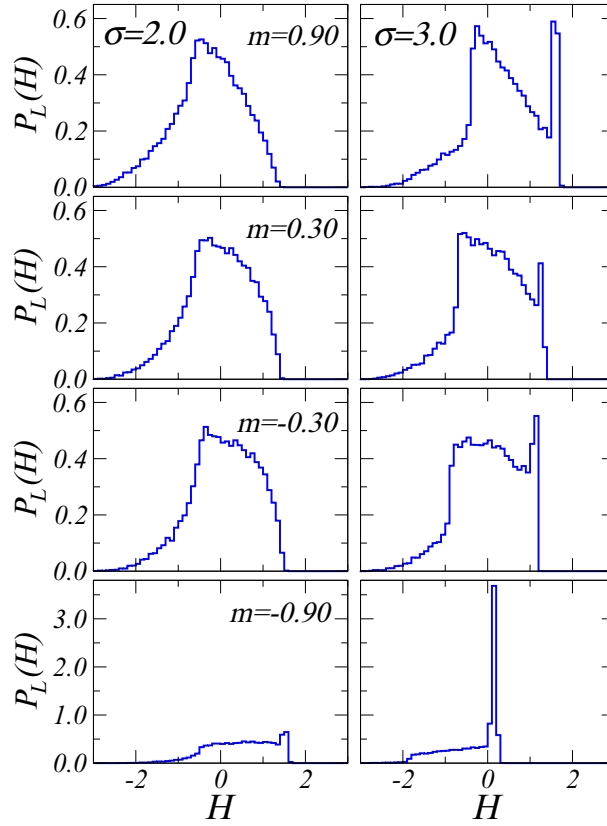


**Figura 8.12:** Promig de l'energia interna per spin a la xarxa cúbica pels dos règims de desordre. Els símbols representen els resultats de les simulacions de un sistema de mida  $L = 30$  amb els algorismes *H-driven* i *M-driven* com s'indica. Els promitjos s'han fet sobre  $3 \times 10^4$  realitzacions de desordre.

## 8.5 Sumari i conclusions

En aquest capítol hem proposat una modificació simple de la dinàmica metastable estàndard per tal d'estudiar el RFIM a  $T = 0$  conduït amb la imantació. Aquesta dinàmica consisteix en girar successivament els spins amb un cert ordre determinat, sempre escollim el spin amb el camp local més gran. Les trajectòries que segueix el sistema amb aquesta nova dinàmica es poden comparar de forma detallada amb les trajectòries microscòpiques que el sistema segueix en el cas de conducció amb camp extern, tant per sobre com per sota del desordre crític. Trobem que les dues trajectòries comparteixen els mateixos estats metastables en el límit termodinàmic, i hem estat capaços de calcular la fracció mitjana d'aquests, i hem obtingut una expressió exacta d'aquesta quantitat pel cas de la xarxa de Bethe. Les simulacions numèriques mostren que les dues dinàmiques coincideixen amb el valor de l'energia interna per valors d'imantació fora del rang de l'allau infinita. Quan considerem valors d'imantació dins el rang de l'allau macroscòpica per la xarxa de Bethe, obtenim que l'energia obtinguda amb l'algorisme *M-driven* també coincideix amb el que es pot calcular analíticament pel cas *H-driven* fent servir la solució inestable de les equacions auto-consistents de  $P_l^*$ .

El diagrama camp-imantació que obtenim en el cas *M-driven* presenta algunes peculiaritats degudes al fet de definir el camp resposta  $H$  com  $\Delta U / \Delta M$ : (i) Tots els cicles tancats tenen àrea zero, implicant que no hi ha dissipació en el sistema;



**Figura 8.13:** Histogrames normalitzats pel camp resposta  $H$  per certs valors de  $m$  i diferents mides. Les dades corresponen a promitjos sobre  $3 \times 10^4$  realitzacions de desordre en un sistema de mida  $L = 30$ .

(ii) El camp  $H$  fluctua fortament amb  $m$  i aquestes fluctuacions són independents de la mida del sistema; (iii) Les fluctuacions de  $H$  degudes a les diferents realitzacions tampoc disminueixen amb la mida del sistema. Hem demostrat que aquest problema està causat per la presència d'una part contínua en la distribució de probabilitat de  $H$ , que correspon als camps associats als estats inestables. Tot seguit discutim algunes possibles modificacions en la definició de la dinàmica i en la definició del camp resposta.

La primera consisteix en permetre una relaxació addicional en el sistema usant una dinàmica de Kawasaki, que és la dinàmica estàndard per una situació amb un paràmetre d'ordre conservat ( $M$ ). Podem imaginar una dinàmica que primer giri el spin amb el camp local més gran, per tal de canviar  $M$ , i llavors realitzi tots els possibles intercanvis entre spins de signe oposat que decreixin l'energia. Ens adonem que la implementació d'aquesta modificació no representa cap millora respecte la dinàmica inicial ja que no s'accepta cap intercanvi de spins. Aquests intercanvis no s'accepten ja que no es possible trobar un estat amb menys energia interna a partir d'un estat obtingut amb la dinàmica simple considerada en que girem el spin que decreix més l'energia localment.

Una segona possibilitat és mantenir la mateixa dinàmica però canviar la definició del camp resposta. És molt probable que la imantació, o qualsevol variable extensiva, només es pugui controlar a un nivell macroscòpic amb una certa resolució. Per exemple, en un experiment fet amb una variació constant  $dM/dt$  probablement no mesurem la força instantània (en el nostre cas  $-\tilde{f}_i^{max}(m)$ ) sinó algun promig  $\bar{H}$  sobre un cert rang  $\Delta m$ , el qual pot dependre fins hi tot del ritme de conducció. En aquest cas es pot comprovar fàcilment que les fluctuacions de  $\bar{H}$  desapareixen en el límit termodinàmic ja que imposar una certa resolució  $\Delta m$  implica fer promitjos sobre intervals més i més grans de  $\Delta M$  quan augmentem  $N$ . Llavors  $\bar{H}$  esdevé una quantitat *self-averaging*. Podem pensar que l'aparell que mesura el camp (o la força) no pot ajustar-se infinitament ràpid a la força o que té algun valor llindar. Naturalment en tots aquests casos els resultats depenen fortament de la modelització que fem dels instruments de mesura o del mètode de conducció que emprin. Per tant des d'un punt de vista experimental, la realització d'experiments "*M-driven*" amb diferents equips i amb diferents ritmes de conducció permetria entendre i modelitzar aquests problemes.

Finalment, des d'un punt de vista teòric, no podem descartar la possibilitat que no existeixi cap definició satisfactòria del camp resposta quan usem variables d'Ising. Una aproximació alternativa usant variables contínues s'ha proposat a l'article [26].



# Capítol 9

## Sumari i conclusions

En aquesta tesi hem estudiat diferents aspectes del model d'Ising amb camps aleatoris (RFIM) a temperatura zero amb dinàmica metastable. Podríem classificar els aspectes que hem estudiat en tres grans grups: càlculs analítics, estudi de propietats del model i aplicacions.

Els càlculs analítics s'han realitzat sobre xarxes de Bethe ja que presenten una topologia peculiar que permet tractar analíticament el model. S'han dut a terme tractaments analítics considerant que el model evoluciona amb una dinàmica de relaxació d'un sol spin (*1-spin-flip*) i considerant una dinàmica de relaxació de parelles de spins (*2-spin-flip*). Els resultats més rellevants són els següents:

- Pel RFIM a  $T = 0$  amb dinàmica metastable *1-spin-flip* hem calculat analíticament el terme energètic de l'Hamiltonià associat a la interacció ferromagnètica dels spins  $\mathcal{U}_e$  i el terme energètic associat a l'acoblament del sistema amb el desordre  $\mathcal{U}_d$ . Juntament amb l'expressió per la imantació trobada per Dhar et al. [80] ens han permès escriure una expressió analítica per l'Hamiltonià del model. Com que aquest model presenta una transició de fase fora de l'equilibri induïda per desordre per xarxes amb connectivitat  $z > 4$ , tenir les expressions exactes ens ha permès estudiar el paper que juga cada terme a la transició i estudiar el comportament de l'energia dissipada en els cicles d'histèresi. Un altre resultat rellevant ha estat el càlcul dels diagrames FORC's a partir de les expressions analítiques per les trajectòries de tornada de primer ordre. Aquests diagrames ens han permès caracteritzar la histèresi d'aquests models. Finalment, a partir d'aquests resultats exactes, hem estat capaços de demostrar que el comportament del sistema en una xarxa de Bethe amb connectivitat  $z \rightarrow \infty$  tendeix al comportament del model de camp mig (MFM).
- Pel RFIM a  $T = 0$  amb dinàmica metastable *2-spin-flip* hem obtingut les expressions formals que ens permeten calcular la imantació del model sobre una xarxa de Bethe amb connectivitat  $z$ , utilitzant una generalització del mètode utilitzat en la dinàmica *1-spin-flip*. Hem obtingut una expressió

explícita de la imantació pel cas  $z = 2$  (xarxa unidimensional) que hem comparat amb els resultats obtinguts de simulacions numèriques sobre grafs aleatoris. Per altra banda, hem estat capaços de demostrar que el model sobre una xarxa de Bethe amb  $z = 3$  presenta una transició de fase fora de l'equilibri induïda per desordre. Aquest resultat dóna solidesa a la hipòtesi de que el punt crític fora de l'equilibri i el punt crític de l'equilibri del model pertanyen a la mateixa classe d'universalitat i estan controlats pels mateixos punts fixos. Sense els nostres resultats aquesta hipòtesi es podria posar en dubte davant el fet peculiar que es dóna pel RFIM sobre una xarxa de Bethe amb  $z = 3$ , que no presenta transició per la dinàmica *1-spin-flip* i en canvi sí que en presenta per l'evolució d'equilibri. El fet de trobar transició per la dinàmica més cooperativa *2-spin-flip* demostra la solidesa de la resposta fora de l'equilibri del RFIM sota qualsevol de les dinàmiques de relaxació local utilitzades.

Hem estudiat diferents propietats del RFIM a  $T = 0$  amb dinàmica metastable *1-spin-flip* definit sobre xarxes cúbiques. Aquests estudis s'han realitzat mitjançant simulacions numèriques del model i s'han hagut de realitzar estudis de mida finita per poder trobar el comportament en el límit termodinàmic. Les propietats estudiades han estat:

- Hem estudiat el canvi en les propietats crítiques del model al introduir-li dilució mitjançant una concentració de vacants  $c$ . Aquest nou paràmetre ens ha servit per generalitzar el desordre i estudiar les interaccions entre els dos tipus de desordre: la desviació estàndard dels camps aleatoris  $\sigma$  i les vacants  $c$ . Hem vist que el punt crític del model no diluït, associat al canvi de forma dels cicles d'histèresi de discontinus a continus, es converteix en una línia crítica que hem estat capaços de determinar en el pla  $\sigma - c$ . També hem comprovat que els exponents crítics que caracteritzen el comportament crític del sistema són els mateixos. Un altre resultat rellevant ha estat l'explicació per entendre la curvatura observada de la línia crítica quan la concentració de vacants està per sobre del límit de percolació. Hem relacionat aquest comportament amb la correlació que existeix entre l'allau macroscòpica del sistema i la frontera del clúster percolant de vacants.
- L'altre estudi que hem dut a terme és l'anàlisi estadística dels *pinning fields*. Hem definit els *pinning fields* com els camps locals que provoquen que els spins es mantinguin en un estat metastable en el procés de desimantació en el RFIM a  $T = 0$  amb dinàmica metastable *1-spin-flip* i hem estudiat les seves propietats estadístiques. Inicialment aquests spins tenen la mateixa distribució amb que generem els camps aleatoris del sistema, però a mesura que es va disminuint el camp  $H$  comencen a presentar distribucions més complexes. El valor mig dels *pinning fields* va augmentant a mesura que el procés de desimantació avança i prop del camp coercitiu presenten fortes correlacions entre ells.

---

Finalment hem utilitzat variants del RFIM per modelitzar sistemes ferromagnètics amb *Exchange Bias* i per estudiar la resposta dels sistemes ferromagnètics quan són conduïts externament controlant la imantació en lloc de ser conduïts externament controlant el camp extern:

- Hem presentant el model EE-RFIM que ens ha permès estudiar el fenomen de l'*Exchange Bias*. Aquest model es basa en el RFIM a  $T = 0$  amb dinàmica metastable. L'ingredient nou i essencial és la presència d'una petita fracció de constants d'intercanvi fortament incrementades que permeten l'existència dels cicles amb *Exchange Bias*. Aquest model posa de manifest que podem entendre aquest fenomen com un efecte de ciclatge parcial. Conseqüentment tots els sistemes que presenten cicles amb *Exchange Bias* amb un AFM compensat, d'acord amb aquest model, també presenten un desplaçament en l'eix de la imantació. Moltes de les propietats experimentals d'aquest fenomen s'han pogut interpretar a partir d'aquest model tan senzill. A banda també hem obtingut, a partir de simulacions, els diagrames FORC's del model EE-RFIM. Aquests diagrames ens han permès caracteritzar millor el comportament histerètic del model.
- Finalment hem proposat una lleugera modificació de la dinàmica metastable del RFIM a  $T = 0$  que ens ha permès analitzar com canvia el comportament dels sistemes considerats fins ara, quan els conduïm amb una variable extensiva com la imantació en lloc de conduir-los amb la quantitat intensiva habitual que és el camp magnètic aplicat  $H$ . Hem calculat la fracció d'estats metastables dels cicles d'histeresi, i hem obtingut una expressió analítica d'aquesta fracció per les xarxes de Bethe. Aquesta fracció d'estats ens ha permès adonar-nos que malgrat que obtenim cicles continus aquests tenen una certa probabilitat de tenir "forats" degut a les allaus. Un altre resultat rellevant que sembla posar de manifest aquest estudi és el caràcter no determinista que sembla adquirir el camp extern. Aquest camp ara s'ha d'obtenir a partir de consideracions microscòpiques del sistema i sembla que per cada valor d'imatció no tendeix a un valor determinat en el límit termodinàmic sinó que té un comportament aleatori. Aquesta dinàmica modelitza el cas extrem en que el sistema s'adapta "infinitament" ràpid als canvis en imantació i per això s'obtenen cicles d'histeresi sense energia dissipada.



# Bibliografia

- [1] G. Bertotti, *Hysteresis in magnetism : For physicists, materials scientists, and engineers* (Academic Press, San Diego, 1998).
- [2] J. P. Sethna, K. Dahmen, S. Kartha, J. A. Krumhansl, B. W. Roberts i J. D. Shore, “Hysteresis and hierarchies: Dynamics of disorder-driven first-order phase transformations”, *Phys. Rev. Lett.* **70**, 3347–3350 (1993).
- [3] P. J. Cote i L. V. Meisel, “Self-organized criticality and the Barkhausen effect”, *Phys. Rev. Lett.* **67**, 1334–1337 (1991).
- [4] G. Durin i S. Zapperi, “Scaling Exponents for Barkhausen Avalanches in Polycrystalline and Amorphous Ferromagnets”, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 4705–4708 (2000).
- [5] E. Puppini, “Statistical Properties of Barkhausen Noise in Thin Fe Films”, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 5415–5418 (2000).
- [6] G. Durin i S. Zapperi, a *The science of hysteresis*, editat per I. Mayergoyz i G. Bertotti (Academic Press, Oxford, 2006), vol. 2, Cap. 3, pàgs. 181–267.
- [7] E. Vives, J. Ortín, L. Mañosa, I. Ràfols, R. Pérez-Magrané i A. Planes, “Distributions of avalanches in martensitic transformations”, *Phys. Rev. Lett.* **72**, 1694–1697 (1994).
- [8] L. Carrillo, L. Mañosa, J. Ortín, A. Planes i E. Vives, “Experimental Evidence for Universality of Acoustic Emission Avalanche Distributions during Structural Transitions”, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 1889–1892 (1998).
- [9] J. Ortín, A. Planes i L. Delaey, a *The science of hysteresis*, editat per I. Mayergoyz i G. Bertotti (Academic Press, Oxford, 2006), vol. 3, Cap. 5, pàgs. 467–541.
- [10] E. V. Colla, L. K. Chao i M. B. Weissman, “Barkhausen Noise in a Relaxor Ferroelectric”, *Phys. Rev. Lett.* **88**, 017601-1–017601-4 (2001).
- [11] B. Tadić, “Switching current noise and relaxation of ferroelectric domains”, *Eur. Phys. J. B* **28**, 81-89 (2002).

- [12] W. Wu i P. W. Adams, “Avalanches and Slow Relaxation: Dynamics of Ultrathin Granular Superconducting Films in a Parallel Magnetic Field”, *Phys. Rev. Lett.* **74**, 610–613 (1995).
- [13] E. Altshuler i T. H. Johansen, “Colloquium: Experiments in vortex avalanches”, *Reviews of Modern Physics* **76**, 471–488 (2004).
- [14] M. P. Lilly, P. T. Finley i R. B. Hallock, “Memory, congruence, and avalanche events in hysteretic capillary condensation”, *Phys. Rev. Lett.* **71**, 4186–4189 (1993).
- [15] J. P. Sethna, K. A. Dahmen i C. R. Myers, “Crackling noise”, *Nature* **410**, 242–250 (2001).
- [16] J. P. Sethna, K. Dahmen i O. Perković, a *The science of hysteresis*, editat per I. Mayergoyz i G. Bertotti (Academic Press, Oxford, 2006), vol. 2, Cap. 2, pàgs. 107–179.
- [17] M. W. Zemansky i R. H. Dittman, *Calor y termodinàmica*, 6a ed. (McGraw-Hill, Madrid, 1984).
- [18] H. B. Callen, *Termodinàmica: introducción a las teorías físicas de la termostática del equilibrio y de la termodinàmica irreversible*. (AC, Madrid, 1981).
- [19] L. D. Landau i E. M. Lifshitz, *Statistical physics* (Pergamon Press, London, 1959).
- [20] R. K. Pathria, *Statistical mechanics*, 2a ed. (Butterworth Heinemann, Oxford, 1996).
- [21] M. LeBellac, F. Mortessagne i G. G. Batrouni, *Equilibrium and non-equilibrium statistical thermodynamics* (Cambridge University Press, Cambridge, 2004).
- [22] K. Huang, *Statistical Mechanics*, 2a ed. (Wiley, New York, 1987).
- [23] H. Barkhausen, “Zwei mit Hilfe der neuen Verstärken entdeckte Erscheinungen”, *Physik Z* **20**, 401–403 (1919).
- [24] D. Sornette, *Critical phenomena in natural sciences* (Springer, Berlin, 2000).
- [25] K. A. Dahmen, J. P. Sethna, M. C. Kuntz i O. Perković, “Hysteresis and avalanches: Phase transitions and critical phenomena in driven disordered systems”, *JMMM* **226-230**, 1287–1292 (2001).
- [26] X. Illa, M. L. Rosinberg i E. Vives, “Influence of the driving mechanism on the response of systems with athermal dynamics: The example of the random-field Ising model”, *Phys. Rev. B* **74**, 224403-1–224403-10 (2006).

- 
- [27] M. Mézard i G. Parisi, “The cavity method at zero temperature”, *J. Stat. Phys.* **111**, 1–34 (2003).
- [28] R. J. Baxter, *Exactly solved models in statistical mechanics* (Academic Press, London, 1982).
- [29] E. Ising, “Beitrag zur Theorie des Ferromagnetismus”, *Z. Phys* **31**, 253–258 (1925).
- [30] W. L. Bragg i E. J. Williams, “The Effect of Thermal Agitation on Atomic Arrangement in Alloys”, *Proc. Soc. London Ser. A* **145**, 699–730 (1934).
- [31] T. P. Eggarter, “Cayley trees, the Ising problem, and the thermodynamic limit”, *Phys. Rev. B* **9**, 2989–2992 (1974).
- [32] E. Müller-Hartmann i J. Zittartz, “New Type of Phase Transition”, *Phys. Rev. Lett.* **33**, 893–897 (1974).
- [33] H. A. Kramers i G. H. Wannier, “Statistics of the Two-Dimensional Ferromagnet. Part I”, *Phys. Rev.* **60**, 252–262 (1941).
- [34] H. A. Kramers i G. H. Wannier, “Statistics of the Two-Dimensional Ferromagnet. Part II”, *Phys. Rev.* **60**, 263–276 (1941).
- [35] L. Onsager, “Crystal statistics I. A two-dimensional model with an order-disorder transition”, *Phys. Rev.* **65**, 117–149 (1944).
- [36] B. Kaufman, “Crystal Statistics. II. Partition Function Evaluated by Spinor Analysis”, *Phys. Rev.* **76**, 1232–1243 (1949).
- [37] B. M. McCoy i T. T. Wu, *The two-dimensional Ising model* (Harvard Univ. Press, Cambridge, 1973).
- [38] J. J. Binney, N. J. Dowrick, A. J. Fisher i M. E. J. Newman, *The theory of critical phenomena: an introduction to the renormalization group* (Clarendon Press, Oxford, 1992).
- [39] K. Binder i D. W. Heermann, *Montecarlo simulations in statistical physics: An introduction*, 3era ed. (Springer, Berlin, 1997).
- [40] M. E. J. Newman i G. T. Barkema, *Monte Carlo methods in statistical physics* (Clarendon Press, Oxford, 1999).
- [41] K. Binder i E. Luijten, “Monte Carlo tests of renormalization-group predictions for critical phenomena in Ising models”, *Physics Reports* **344**, 179–253 (2001).
- [42] B. Liu i M. Gitterman, “The critical temperature of two-dimensional and three-dimensional Ising models”, *Am. J. Phys.* **71**, 806–808 (2003).

- [43] K. H. Fischer i J. A. Hertz, *Spin glasses* (Cambridge University Press, Cambridge, 1993).
- [44] D. Sherrington i S. Kirkpatrick, “Solvable Model of a Spin-Glass”, *Phys. Rev. Lett.* **35**, 1792–1795 (1975).
- [45] T. Schneider i E. Pytte, “Random-field instability of the ferromagnetic state”, *Phys. Rev. B* **15**, 1519–1522 (1977).
- [46] A. Aharony, “Tricritical points in systems with random fields”, *Phys. Rev. B* **18**, 3318–3327 (1978).
- [47] O. Entin-Wohlman i C. Hartzstein, “Random field Ising model in the Bethe-Peierls approximation”, *J. Phys. A: Math. Gen.* **18**, 315–320 (1985).
- [48] R. Bruinsma i G. Aeppli, “One-Dimensional Ising Model in a Random Field”, *Phys. Rev. Lett.* **50**, 1494–1497 (1983).
- [49] R. Bruinsma, “Random-field Ising model on a Bethe lattice”, *Phys. Rev. B* **30**, 289–299 (1984).
- [50] C. Hartzstein i O. Entin-Wohlman, “Comment on ‘Random field Ising model on a Bethe lattice’”, *Phys. Rev. B* **32**, 491–494 (1985).
- [51] M. J. Alava, V. Basso, F. Colaiori, L. Dante, G. Durin, A. Magni i S. Zapperi, “Ground-state optimization and hysteretic demagnetization: The random-field Ising model”, *Phys. Rev. B* **71**, 064423-1–064423-12 (2005).
- [52] M. R. Swift, A. Maritan, M. Cieplak i J. R. Banavar, “Phase diagrams of random-field Ising systems”, *J. Phys. A: Math. Gen.* **27**, 1525–1532 (1994).
- [53] M. E. J. Newman i G. T. Barkema, “Monte Carlo study of the random-field Ising model”, *Phys. Rev. E* **53**, 393–404 (1996).
- [54] J. Machta, M. E. J. Newman i L. B. Chayes, “Replica-exchange algorithm and results for the three-dimensional random field Ising model”, *Phys. Rev. E* **62**, 8782–8789 (2000).
- [55] F. Wang i D. P. Landau, “Determining the density of states for classical statistical models: A random walk algorithm to produce a flat histogram”, *Phys. Rev. E* **64**, 056101-1–056101-16 (2001).
- [56] I. Dukovski i J. Machta, “Ground-state numerical study of the three-dimensional random-field Ising model”, *Phys. Rev. B* **67**, 014413-1–014413-6 (2003).
- [57] Y. Wu i J. Machta, “Ground States and Thermal States of the Random Field Ising Model”, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 137208-1–137208-4 (2005).



- 
- [58] Y. Wu i J. Machta, “Numerical study of the three-dimensional random-field Ising model at zero and positive temperature”, *Phys. Rev. B* **74**, 064418-1–064418-11 (2006).
- [59] J. C. A. d’Auriac, M. Preissmann i R. Rammal, “The random field Ising-model - algorithmic complexity and phase-transition”, *J. Phys. (Paris) Lett.* **46**, L173–L180 (1985).
- [60] A. V. Goldberg i R. E. Tarjan, “A New Approach to the Maximum-Flow Problem”, *J. Assoc. Comput. Mach.* **35**, 921–940 (1988).
- [61] B. V. Cherkassky i A. V. Goldberg, “On Implementing the Push-Relabel Method for the Maximum Flow Problem”, *Algorithmica* **19**, 390–410 (1997).
- [62] A. A. Middleton, “Critical Slowing Down in Polynomial Time Algorithms”, *Phys. Rev. Lett.* **88**, 017202-1–017202-4 (2002).
- [63] A. T. Ogielski, “Integer Optimization and Zero-Temperature Fixed Point in Ising Random-Field Systems”, *Phys. Rev. Lett.* **57**, 1251–1254 (1986).
- [64] J. C. A. d’Auriac i N. Surlas, “The 3d random field Ising model at zero temperature”, *Eurphys. Lett.* **39**, 473–478 (1997).
- [65] A. K. Hartmann i U. Nowak, “Universality in three dimensional random-field ground states”, *Eur. Phys. J. B* **7**, 105–109 (1999).
- [66] A. A. Middleton, “Three-dimensional random-field Ising magnet: Interfaces, scaling, and the nature of states”, *Phys. Rev. B* **65**, 134411-1–134411-31 (2002).
- [67] G. Parisi i N. Surlas, “Scale Invariance in Disordered Systems: The Example of the Random-Field Ising Model”, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 257204-1–257204-4 (2002).
- [68] E. T. Seppälä, A. M. Pulkkinen i M. J. Alava, “Percolation in three-dimensional random field Ising magnets”, *Phys. Rev. B* **66**, 144403-1–144403-7 (2002).
- [69] C. Frontera, J. Goicoechea, J. Ortín i E. Vives, “Efficient Algorithm for Finding Ground-States in the Random Field Ising Model with an External Field”, *J. Comp. Phys.* **160**, 117–125 (2000).
- [70] C. Frontera i E. Vives, “Studying avalanches in the ground state of the two-dimensional random-field Ising model driven by an external field”, *Phys. Rev. E* **62**, 7470–7473 (2000).
- [71] C. Frontera i E. Vives, “‘Avalanches’ in the ground state of the 3D Gaussian random field Ising model driven by an external field”, *J. Comp. Phys.* **147**, 455–458 (2002).

- [72] E. T. Seppälä, V. Petäjä i M. J. Alava, “Disorder, order, and domain wall roughening in the two-dimensional random field Ising model”, *Phys. Rev. E* **58**, R5217–R5220 (1998).
- [73] C. Frontera i E. Vives, “Numerical signs for a transition in the two-dimensional random field Ising model at  $T = 0$ ”, *Phys. Rev. E* **59**, R1295–R1298 (1999).
- [74] E. T. Seppälä i M. J. Alava, “Susceptibility and percolation in two-dimensional random field Ising magnets”, *Phys. Rev. E* **63**, 066109-1–066109-14 (2001).
- [75] E. Vives, M. L. Rosinberg i G. Tarjus, “Hysteresis and avalanches in the  $T = 0$  random-field Ising model with two-spin-flip dynamics”, *Phys. Rev. B* **71**, 134424-1–134424-8 (2005).
- [76] A. Travesset, R. A. White i K. A. Dahmen, “Crackling noise, power spectra, and disorder-induced critical scaling”, *Phys. Rev. B* **66**, 024430-1–024430-11 (2002).
- [77] R. A. White i K. A. Dahmen, “Driving Rate Effects on Crackling Noise”, *Phys. Rev. Lett.* **91**, 085702-1–085702-4 (2003).
- [78] F. J. Pérez-Reche, B. Tadić, L. Mañosa, A. Planes i E. Vives, “Driving Rate Effects in Avalanche-Mediated First-Order Phase Transitions”, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 195701-1–195701-4 (2004).
- [79] P. Shukla, “Exact solution of zero-temperature hysteresis in a ferromagnetic Ising chain with quenched random fields”, *Physica A* **233**, 235–241 (1996).
- [80] D. Dhar, P. Shukla i J. P. Sethna, “Zero-temperature hysteresis in the random-field Ising model on a Bethe lattice”, *J. Phys. A: Math. Gen.* **30**, 5259–5267 (1997).
- [81] P. Shukla, “Exact solution of return hysteresis loops in a one-dimensional random-field Ising model at zero temperature”, *Phys. Rev. E* **62**, 4725–4729 (2000).
- [82] P. Shukla, “Exact expressions for minor hysteresis loops in the random field Ising model on a Bethe lattice at zero temperature”, *Phys. Rev. E* **63**, 027102-1–027102-4 (2001).
- [83] S. Sabhapandit, P. Shukla i D. Dhar, “Distribution of avalanche sizes in the hysteretic response of the random-field Ising model on a Bethe lattice at zero temperature”, *J. Stat. Phys.* **98**, 103–129 (2000).
- [84] K. Dahmen i J. P. Sethna, “Hysteresis loop critical exponents in  $6-\epsilon$  dimensions”, *Phys. Rev. Lett.* **71**, 3222–3225 (1993).
- [85] K. Dahmen i J. P. Sethna, “Hysteresis, avalanches, and disorder-induced critical scaling: A renormalization-group approach”, *Phys. Rev. B* **53**, 14872–14905 (1996).

- 
- [86] M. C. Kuntz, O. Perković, K. A. Dahmen, B. W. Roberts i J. P. Sethna, “Hysteresis, avalanches, and noise”, *Computing in Science & Engineering* **1**(4), 73–81 (1999).
- [87] O. Perković, K. Dahmen i J. P. Sethna, “Avalanches, Barkhausen Noise, and Plain Old Criticality”, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 4528–4531 (1995).
- [88] O. Perković, K. A. Dahmen i J. P. Sethna, “Disorder-induced critical phenomena in hysteresis: A numerical scaling analysis”, *cond-mat/9609072*, (unpublished) (1996).
- [89] O. Perković, K. A. Dahmen i J. P. Sethna, “Disorder-induced critical phenomena in hysteresis: Numerical scaling in three and higher dimensions”, *Phys. Rev. B* **59**, 6106–6119 (1999).
- [90] F. J. Perez-Reche i E. Vives, “Finite-size scaling analysis of the avalanches in the three-dimensional Gaussian random-field Ising model with metastable dynamics”, *Phys. Rev. B* **67**, 134421-1–134421-16 (2003).
- [91] Y. Imry i S.-k. Ma, “Random-Field Instability of the Ordered State of Continuous Symmetry”, *Phys. Rev. Lett.* **35**, 1399–1401 (1975).
- [92] J. Z. Imbrie, “Lower Critical Dimension of the Random-Field Ising Model”, *Phys. Rev. Lett.* **53**, 1747–1750 (1984).
- [93] A. P. Young i M. Nauenberg, “Quasicritical Behavior and First-Order Transition in the  $d = 3$  Random-Field Ising Model”, *Phys. Rev. Lett.* **54**, 2429–2432 (1985).
- [94] F. J. Perez-Reche i E. Vives, “Spanning avalanches in the three-dimensional Gaussian random-field Ising model with metastable dynamics: Field dependence and geometrical properties”, *Phys. Rev. B* **70**, 214422-1–214422-14 (2004).
- [95] F. Colaiori, M. J. Alava, G. Durin, A. Magni i S. Zapperi, “Phase Transitions in a Disordered System in and out of Equilibrium”, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 257203-1–257203-4 (2004).
- [96] A. Berger, A. Inomata, J. S. Jiang, J. E. Pearson i S. D. Bader, “Experimental Observation of Disorder-Driven Hysteresis-Loop Criticality”, *Phys. Rev. Lett.* **85**, 4176–4179 (2000).
- [97] J. Marcos, E. Vives, L. Manosa, M. Acet, E. Duman, M. Morin, V. Novak i A. Planes, “Disorder-induced critical phenomena in magnetically glassy Cu-Al-Mn alloys”, *Phys. Rev. B* **67**, 224406-1–224406-5 (2003).
- [98] Y. Liu i K. A. Dahmen, “Random Field Ising Model In and Out of Equilibrium”, *cond-mat/0609609*, (2006).

- [99] M. Mézard i G. Parisi, “The Bethe lattice spin glass revisited”, *Eur. Phys. J. B* **20**, 217–233 (2001).
- [100] P. Shukla, “Zero-temperature hysteresis in an anti-ferromagnetic Ising chain with quenched random fields”, *Physica A* **233**, 242–252 (1996).
- [101] F. Detcheverry, M. L. Rosinberg i G. Tarjus, “Metastable states and  $T = 0$  hysteresis in the random-field Ising model on random graphs”, *Eur. Phys. J. B* **44**, 327–343 (2005).
- [102] J. Ortín i J. Goicoechea, “Dissipation in quasistatically driven disordered systems”, *Phys. Rev. B* **58**(9), 5628–5631 (1998).
- [103] C. R. Pike, A. P. Roberts i K. L. Verosub, “Characterizing interactions in fine magnetic particle systems using first order reversal curves”, *J. Appl. Phys.* **85**, 6660–6667 (1999).
- [104] H. G. Katzgraber, F. Pázmándi, C. R. Pike, K. Liu, R. T. Scalettar, K. L. Verosub i G. T. Zimányi, “Reversal-Field Memory in the Hysteresis of Spin Glasses”, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 257202-1–257202-4 (2002).
- [105] R. J. Barlow, *Statistics: A guide to the use of statistical methods in the physical sciences* (Wiley, Chichester, 1989).
- [106] B. Tadić, “Nonuniversal Scaling Behavior of Barkhausen Noise”, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 3843–3846 (1996).
- [107] D. Stauffer i A. Aharony, *Introduction to percolation theory*, 2ona ed. (Taylor & Francis, Washington, D.C., 1992).
- [108] E. Vives i A. Planes, “Avalanches in a fluctuationless first-order phase transition in a random-bond Ising model”, *Phys. Rev. B* **50**, 3839–3848 (1994).
- [109] B. Koiller i M. O. Robbins, “Morphology transitions in three-dimensional domain growth with Gaussian random fields”, *Phys. Rev. B* **62**, 5771–5778 (2000).
- [110] L. Roters, A. Hucht, S. Lübeck, U. Nowak i K. D. Usadel, “Depinning transition and thermal fluctuations in the random-field Ising model”, *Phys. Rev. E* **60**, 5202–5207 (1999).
- [111] J. Nogués i I. K. Schuller, “Exchange bias”, *J. Magn. Magn. Mater.* **192**, 203–232 (1999).
- [112] A. E. Berkowitz i K. Takano, “Exchange anisotropy - a review”, *J. Magn. Magn. Mater.* **200**, 552–570 (1999).
- [113] B. Dieny, V. S. Speriosu, S. S. P. Parkin, B. A. Gurney, D. R. Wilhoit i D. Mauri, “Giant magnetoresistive in soft ferromagnetic multilayers”, *Phys. Rev. B* **43**, 1297–1300 (1991).

- [114] P. Miltényi, M. Gierlings, J. Keller, B. Beschoten, G. Güntherodt, U. Nowak i K. D. Usadel, “Diluted Antiferromagnets in Exchange Bias: Proof of the Domain State Model”, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 4224–4227 (2000).
- [115] G. Li, T. Yang, Q. Hu i W. Lai, “Exchange coupling in NiFe/NiMn films studied by pseudo-Hall effect”, *Appl. Phys. Lett.* **77**, 1032–1034 (2000).
- [116] J. Nogués, D. Lederman, T. J. Moran i I. K. Schuller, “Positive Exchange Bias in  $FeF_2$ -Fe Bilayers”, *Phys. Rev. Lett.* **76**, 4624–4627 (1996).
- [117] C. Leighton, J. Nogués, B. J. Jönsson-Åkerman i I. K. Schuller, “Coercivity Enhancement in Exchange Biased Systems Driven by Interfacial Magnetic Frustration”, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 3466–3469 (2000).
- [118] S. Gangopadhyay, G. C. Hadjipanayis, C. M. Sorensen i K. J. Klabunde, “Exchange anisotropy in oxide passivated Co fine particles”, *J. Appl. Phys.* **73**, 6964–6966 (1993).
- [119] W. H. Meiklejohn, “Exchange Anisotropy—A Review”, *J. Appl. Phys.* **33**, 1328–1335 (1962).
- [120] M. Kiwi, “Exchange bias theory”, *J. Magn. Magn. Mater.* **234**, 584–595 (2001).
- [121] R. L. Stamps, “Mechanisms for exchange bias”, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **33**, R247–R268 (2000).
- [122] T. Ambrose i C. L. Chien, “Finite-Size Effects and Uncompensated Magnetization in Thin Antiferromagnetic CoO Layers”, *Phys. Rev. Lett.* **76**, 1743–1746 (1996).
- [123] A. P. Malozemoff, “Random-field model of exchange anisotropy at rough ferromagnetic-antiferromagnetic interfaces”, *Phys. Rev. B* **35**, 3679–3682 (1987).
- [124] D. Mauri, H. C. Siegmann, P. S. Bagus i E. Kay, “Simple model for thin ferromagnetic films exchange coupled to an antiferromagnetic substrate”, *J. Appl. Phys.* **62**, 3047–3049 (1987).
- [125] M. Kiwi, J. Mejía-López, R. D. Portugal i R. Ramírez, “Exchange bias model for  $Fe/FeF_2$ : Role of domains in the ferromagnet”, *Europhys. Lett.* **48**, 573–579 (1999).
- [126] N. C. Koon, “Calculations of Exchange Bias in Thin Films with Ferromagnetic/Antiferromagnetic Interfaces”, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 4865–4868 (1997).
- [127] H. Suhl i I. K. Schuller, “Spin-wave theory of exchange-induced anisotropy”, *Phys. Rev. B* **58**, 258–264 (1998).

- [128] U. Nowak, K. D. Usadel, J. Keller, P. Miltényi, B. Beschoten i G. Güntherodt, “Domain state model for exchange bias. I. Theory”, Phys. Rev. B **66**, 014430-1–014430-9 (2002).
- [129] J. Keller, P. Miltényi, B. Beschoten, G. Güntherodt, U. Nowak i K. D. Usadel, “Domain state model for exchange bias. II. Experiments”, Phys. Rev. B **66**, 014431-1–014431-11 (2002).
- [130] U. Nowak, A. Misra i K. D. Usadel, “Modeling exchange bias microscopically”, J. Magn. Magn. Mater. **240**, 243–247 (2002).
- [131] J. Nogués, L. Morellon, C. Leighton, M. R. Ibarra i I. K. Schuller, “Antiferromagnetic spin flop and exchange bias”, Phys. Rev. B **61**, R6455–R6458 (2000).
- [132] K. Takano, R. H. Kodama, A. E. Berkowitz, W. Cao i G. Thomas, “Interfacial Uncompensated Antiferromagnetic Spins: Role in Unidirectional Anisotropy in Polycrystalline  $Ni_{81}Fe_{19}/CoO$  Bilayers”, Phys. Rev. Lett. **79**, 1130–1133 (1997).
- [133] J. Nogués, T. J. Moran, D. Lederman, I. K. Schuller i K. V. Rao, “Role of interfacial structure on exchange-biased  $FeF_2 - Fe$ ”, Phys. Rev. B **59**, 6984–6993 (1999).
- [134] C. Leighton, J. Nogués, H. Suhl i I. K. Schuller, “Competing interfacial exchange and Zeeman energies in exchange biased bilayers”, Phys. Rev. B **60**, 12837–12840 (1999).
- [135] A. Mougin, T. Mewes, R. Lopusnik, M. Jung, D. Engel, A. Ehresmann, H. Schmoranzler i B. Hillebrads, “Modification of the exchange bias effect by He ion irradiation”, IEEE Trans. Magn. **36**, 2647–2649 (2000).
- [136] W. H. Meiklejohn i C. P. Bean, “New Magnetic Anisotropy”, Phys. Rev. **105**, 904–913 (1957).
- [137] F. Radu, M. Etzkorn, R. Siebrecht, T. Schmitte, K. Westerholt i H. Zabel, “Interfacial domain formation during magnetization reversal in exchange-biased CoO/Co bilayers”, Phys. Rev. B **67**, 134409-1–134409-11 (2003).
- [138] J. Nogués, C. Leighton i I. K. Schuller, “Correlation between antiferromagnetic interface coupling and positive exchange bias”, Phys. Rev. B **61**, 1315–1317 (2000).
- [139] K. Otsuka i C. M. Wayman, *Shape memory materials* (Cambridge University Press, Cambridge New York, 1998).
- [140] W. Grosse-Nobis, “Frequency spectrum of the Barkhausen noise of a moving  $180^\circ$  domain wall”, J. Magn. Magn. Mater. **4**, 247–253 (1977).

- 
- [141] K. Sneppen, “Self-organized pinning and interface growth in a random medium”, *Phys. Rev. Lett.* **69**, 3539–3542 (1992).
- [142] P. Bak i K. Sneppen, “Punctuated equilibrium and criticality in a simple model of evolution”, *Phys. Rev. Lett.* **71**, 4083–4086 (1993).
- [143] M. Paczuski, S. Maslov i P. Bak, “Avalanche dynamics in evolution, growth, and depinning models”, *Phys. Rev. E* **53**, 414–443 (1996).
- [144] R. Brout, “Statistical Mechanical Theory of a Random Ferromagnetic System”, *Phys. Rev.* **115**, 824–835 (1959).
- [145] S. Wiseman i E. Domany, “Finite-Size Scaling and Lack of Self-Averaging in Critical Disordered Systems”, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 22–25 (1998).

## Articles publicats per l'autor

La realització d'aquesta tesi ha donat lloc a la publicació dels següents articles en revistes internacionals:

- X. Illa, E. Vives i A. Planes, “Metastable random-field Ising model with exchange enhancement: A simple model for exchange bias”, *Phys. Rev. B* **66**, 224422-1–224422-7 (2002).
- X. Illa i E. Vives, “Statistical properties of pinning fields in the 3d-Gaussian RFIM”, *Physica B* **343**, 308-313 (2004).
- E. Vives, X. Illa i A. Planes, “A simple Lattice Model for hysteresis loops with exchange bias”, *JMMM* **272-276**, 703-704 (2004).
- X. Illa, J. Ortín i E. Vives, “Exact calculation of the energy contributions to the  $T = 0$  random-field Ising model with metastable dynamics on the Bethe lattice”, *Phys. Rev. B* **71**, 184435-1–184435-6 (2005).
- X. Illa, P. Shukla i E. Vives, “Zero-temperature hysteresis in a random-field Ising model on a Bethe lattice: Approach to mean-field behavior with increasing coordination number  $z$ ”, *Phys. Rev. B* **73**, 092414-1–092414-4 (2006).
- X. Illa i E. Vives, “Diluted three-dimensional random field Ising model at zero temperature with metastable dynamics”, *Phys. Rev. B* **74**, 104409-1–104409-8 (2006).
- X. Illa, M. L. Rosinberg, P. Shukla i E. Vives, “Magnetization-driven random-field Ising model at  $T = 0$ ”, *Phys. Rev. B* **74**, 224404-1–224404-10 (2006).
- X. Illa, M. L. Rosinberg i G. Tarjus, “Hysteresis behavior of the random-field Ising model with 2-spin-flip dynamics: Exact results on a Bethe lattice”, acceptat a *Eur. Phys. J. B* (2007).

A més, durant el període de realització d'aquesta tesi, l'autor ha participat en la realització dels articles següents:

- X. Illa, M. L. Rosinberg i E. Vives, “Influence of the driving mechanism on the response of systems with athermal dynamics: The example of the random-field Ising model”, *Phys. Rev. B* **74**, 224403-1–224403-10 (2006).
- E. Bonnot, R. Romero, X. Illa, L. Mañosa, A. Planes i E. Vives “Hysteresis in a system driven by either generalized force or displacement variables”, enviat a *Phys. Rev. Lett.* (2007)