

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL  
Instituto de Física

# EVOLUÇÃO DE DOMÍNIOS NO MODELO DE POTTS BIDIMENSIONAL

Marcos Paulo de Oliveira Loureiro

Tese realizada sob orientação do Prof. Dr. Jeferson J. Arenzon, co-orientação do Prof. Dr. Daniel A. Stariolo, e apresentada ao Instituto de Física da UFRGS em preenchimento parcial dos requisitos para a obtenção do título de Doutor em Ciências.

---

Trabalho financiado pelo Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq).

Porto Alegre, RS - Setembro de 2010



*À minha esposa,  
sinônimo de amor,  
paciência, carinho  
e compreensão.*

*Juntos damos um passo por vez,  
ora apoiados,  
ora carregados,  
mas sempre juntos!*

# Agradecimentos

- Aos meus orientadores Jeferson Arenzon e Daniel Stariolo pelos ensinamentos, discussões e paciência;
- À Profa Márcia Barbosa pelas tantas vezes que me ajudou nas mais inúmeras burocracias;
- Ao CNPq pelo financiamento que possibilitou a realização deste trabalho;
- Em especial aos amigos Celso Piaseski e Victor Mabilia por tudo o que fizeram por mim.

# Sumário

Resumo	iii
Abstract	iv
<b>1 Introdução</b>	<b>1</b>
1.1 Estrutura e resultados apresentados neste manuscrito	3
1.2 Conceitos fundamentais	5
1.2.1 Efeitos da dinâmica em sistemas fora do equilíbrio	5
1.2.2 Definições geométricas: domínios e <i>hulls</i>	6
1.2.3 A hipótese de escala	7
1.2.4 Tamanho típico dos domínios	7
<b>2 Modelos magnéticos e o método computacional</b>	<b>10</b>
2.1 O modelo de Ising	11
2.2 O modelo de Potts com $q$ estados	12
2.3 O método computacional	13
<b>3 Crescimento de domínios</b>	<b>17</b>
3.1 Introdução	17
3.2 Sistema com o parâmetro de ordem não conservado	18
3.2.1 Fronteira entre domínios e a equação de Allen-Cahn	19
3.3 Solução analítica para a distribuição das áreas dos <i>hulls</i>	20
3.3.1 A equação da área do <i>hull</i> para $q = 2$	20
3.3.2 A distribuição de áreas dos <i>hulls</i> para $q = 2$	21
3.4 Concordância com os resultados numéricos	23
<b>4 Sistema com múltiplos graus de degenerescência</b>	<b>27</b>
4.1 A lei de von Neumann	28
4.2 Condições iniciais	29
4.3 A forma da distribuição inicial	30

---

4.3.1	Equilíbrio a temperatura infinita . . . . .	30
4.3.2	Temperatura crítica e transição de segunda ordem . . . . .	31
4.3.3	Temperatura crítica e transição de primeira ordem . . . . .	33
4.4	Correlação ao longo da evolução . . . . .	33
4.4.1	Correlação nula no estado inicial . . . . .	34
4.4.2	Correlação infinita no estado inicial . . . . .	36
4.4.3	Correlação finita no estado inicial . . . . .	37
4.5	Efeitos da temperatura na dinâmica de crescimento . . . . .	38
4.5.1	Regime de crescimento a baixas temperaturas . . . . .	39
4.6	A distribuição das áreas . . . . .	40
4.6.1	Transição de segunda ordem e correlação nula . . . . .	42
4.6.2	Transição de segunda ordem e correlação infinita . . . . .	43
4.6.3	Transição de primeira ordem e correlação nula ou finita . . . . .	46
<b>5</b>	<b>Efeitos da desordem na distribuição das áreas</b>	<b>49</b>
5.1	Relação entre a desordem e a transição de fase no modelo de Potts . . . . .	50
5.2	Correlação no sistema desordenado . . . . .	51
5.3	Distribuição das áreas dos <i>hulls</i> . . . . .	55
<b>6</b>	<b>Conclusão</b>	<b>59</b>
6.1	Perspectivas . . . . .	61
	<b>Referências Bibliográficas</b>	<b>70</b>

# Resumo

Domínios formados durante a evolução de misturas possuem grande importância tanto teórica quanto experimental. Diversos estudos das propriedades de crescimento de domínios podem ser vistos no contexto de espumas, tecidos celulares, domínios magnéticos, supercondutores, absorção de átomos em superfícies, etc. Particularmente, na ciência metalúrgica e de superfícies, entender a formação das microestruturas policristalinas e suas respectivas evoluções temporais é importante na determinação das propriedades do material. O modelo de Potts permite representar a estrutura multicelular dos sistemas mencionados e, por esta razão, é muito empregado em seus estudos.

Nesta tese apresentamos os resultados do estudo do ordenamento de fases dinâmico do modelo de Potts puro e com desordem ferromagnética fraca, do ponto de vista geométrico, através de simulações computacionais. Basicamente, estudamos a distribuição das áreas dos *hulls* do modelo com  $q > 2$  estados, após ser submetido a um súbito resfriamento a partir da fase de alta temperatura (paramagnética) para dentro da fase ordenada (ferromagnética). Nesta fase, domínios com diferentes orientações se formam devido à intensidade das interações locais. A evolução temporal de cada domínio é regida basicamente pela curvatura da interface e a lei de crescimento depende, em geral, de fatores como a conservação (ou não) do parâmetro de ordem, da presença de desordem e da dimensão do parâmetro de ordem.

Uma vez que a solução analítica para a distribuição das áreas dos *hulls* obtida para o modelo de Ising ( $q = 2$ ) não pode ser facilmente extrapolada para o modelo de Potts com  $q > 2$ , nossa análise é baseada em simulações numéricas. Surpreendentemente, alguns resultados permanecem válidos (como por exemplo, quando a transição é contínua e o sistema está equilibrado em  $T_c$  antes do *quench*). Além das distribuições das áreas dos *hulls* para vários valores de  $q$  e diferentes condições iniciais, apresentamos uma visão geral, geométrica, do processo de crescimento de domínios no modelo de Potts, tanto para o modelo puro quanto na presença de desordem ferromagnética.

# Abstract

Domains formed during the evolution of mixtures are of both theoretical and technological importance, applications including foams, cellular tissues, superconductors, magnetic domains, adsorbed atoms on surfaces, etc. In particular, in metallurgy and surface science, understanding the formation of the polycrystalline microstructure, and its time evolution are important in determining the material properties. The Potts model, being able to represent the multicellular structure of these systems, is widely used in their study.

In this thesis we present results for the phase ordering dynamics of the Potts model with and without weak quenched disorder, from a geometrical point of view, through computer simulations. Basically we studied the hull-enclosed area distributions of the model with  $q > 2$  states, after a sudden quench from the high temperature phase (paramagnetic) into the ordered phase (ferromagnetic). In this phase, domains with different orientations are formed due to the strength of local interactions. The temporal evolution of a single domain is essentially ruled by curvature-driven processes, and the growth law depends, in general, on features such like the conservation (or not) of the order parameter, the presence of quenched disorder, and the dimension of the order parameter.

Once the analytical solution for the hull-enclosed areas obtained for the Ising model ( $q = 2$ ) cannot be easily extrapolated to the  $q > 2$  Potts model, our analysis is based on numerical simulations. Surprisingly, some of the results remain valid (as, for example, when the equilibrium state before the quench is the second-order transition critical temperature). Besides the hull-enclosed areas, we present an overall, geometric description of the domain growth process for the Potts model, both with and without ferromagnetic disorder.

# Capítulo 1

## Introdução

Uma grande variedade de sistemas naturais apresentam estruturas particularmente semelhantes, com padrões morfológicos que geram grande interesse em diferentes áreas como na biologia, medicina, química, física e nas ciências de materiais. Em alguns sistemas a presença de desordem topológica (estrutural) é regra e não exceção. Esta “desorganização” estrutural do material dificulta o estudo destes tipos de sistemas, uma vez que uma ordem cristalina global ou algum tipo de homogeneidade não se faz presente.

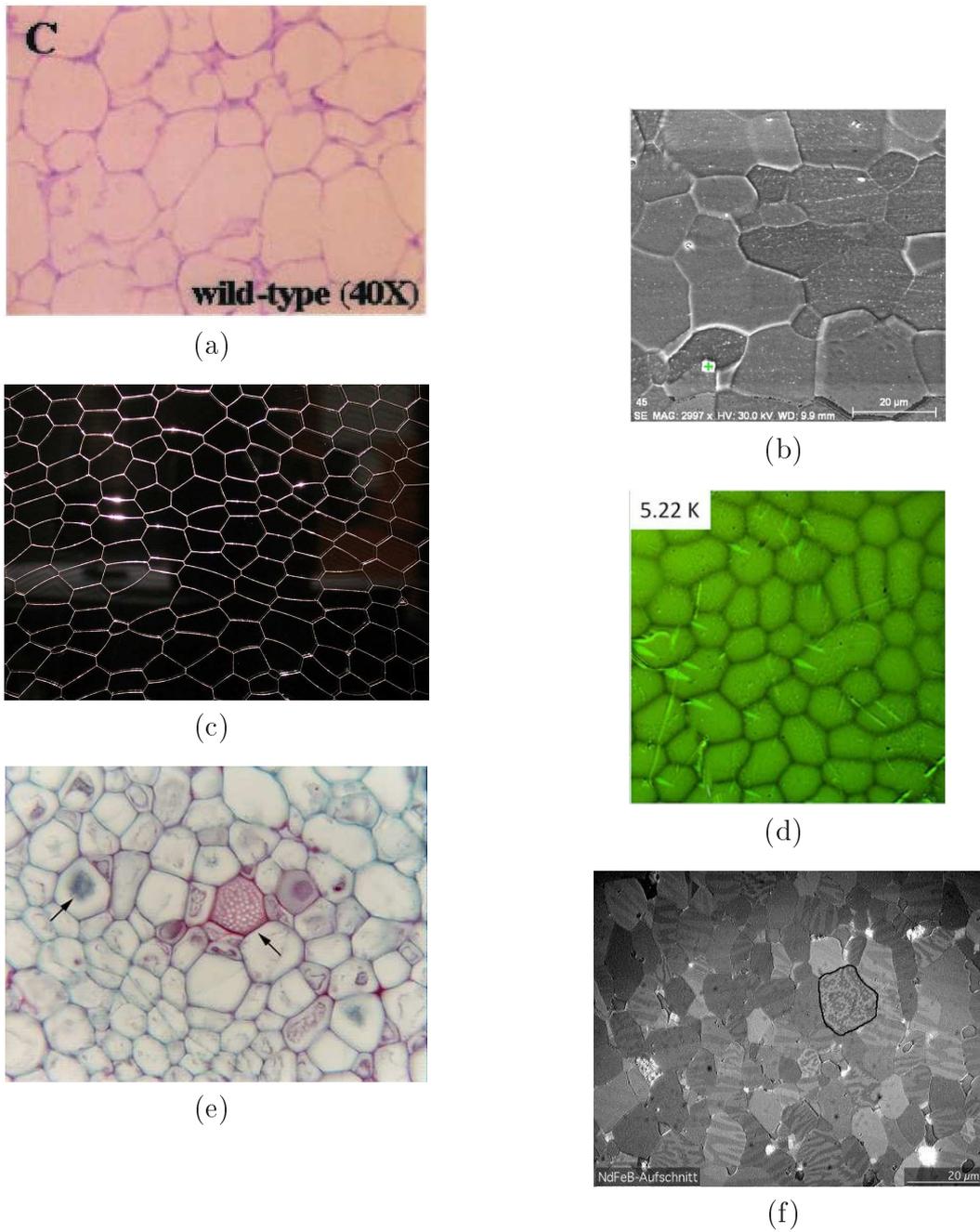
Nas últimas décadas grandes avanços foram obtidos no intuito de caracterizar estes sistemas por meio de modelos simples, e com isso estudar as propriedades dinâmicas tanto teórica quanto computacionalmente. No entanto, uma das primeiras questões a ser abordada diz respeito a análise e caracterização da geometria das estruturas. Muitas leis (empíricas ou não) foram formuladas e tentam descrever as semelhanças entre as diversas estruturas.

A figura 1.1 apresenta uma série de imagens de sistemas que apresentam padrões morfológicos semelhantes. A figura em (a) corresponde à estrutura formada por células do tecido adiposo de camundongos [1]; em (b) temos a imagem obtida de um microscópio eletrônico de varredura, da estrutura do aço dopado com titânio durante o processo de soldagem [2]; em (c) temos o padrão formado por espumas secas (bolhas de sabão<sup>1</sup>) em duas dimensões (entre placas); em (d) temos a imagem de uma espuma supercondutora [3]; em (e) temos uma imagem microscópica de uma seção transversal que mostra a estrutura celular do pepino [4]; em (f) temos uma fotomicrografia (obtida de um microscópio Kerr) de um material magnético ( $NdFeB$ ) mostrando o padrão dos domínios magnéticos<sup>1</sup>. Em todos estes sistemas as interfaces delimitam os domínios, sendo que algumas destas imagens correspondem a fatias (ou seções retas) do material.

Algumas dessas estruturas evoluem no tempo em função de parâmetros externos como temperatura, campo magnético, etc. Entender o mecanismo relevante por trás da evolução

---

<sup>1</sup>Imagens de domínio público obtidas em <http://commons.wikimedia.org>



**Figura 1.1:** Imagens de diversos sistemas que apresentam morfologia semelhante. As figuras mostram: (a) células do tecido adiposo; (b) aço dopado; (c) bolhas de sabão; (d) espuma supercondutora; (e) células de pepino; (f) domínios magnéticos.

de uma estrutura específica permite determinar as propriedades estatísticas do sistema a longo prazo. Naturalmente, a observação e a descrição do crescimento celular, de agregados metálicos, das espumas de sabão, etc, é de grande interesse.

Diversos estudos das propriedades geométricas de crescimento de domínios podem ser vistos no contexto de espumas [5], tecidos celulares [6], supercondutores [3], sistemas magnéticos [7,8], átomos absorvidos em superfícies, etc. Particularmente, em metalurgia, entender a formação de estruturas policristalinas e sua respectiva evolução temporal é importante na determinação de muitas das propriedades do material.

Após uma súbita diminuição da temperatura (ou uma adequada mudança em algum outro parâmetro de controle), levando o sistema da fase de alta temperatura para a região de coexistência de fases, o sistema tende a se organizar progressivamente formando estruturas ordenadas. A evolução temporal do sistema é governada por processos térmicos, difusivos, ou devido à curvatura da interface. A lei de crescimento depende, em geral, da presença de desordem, da dimensão do parâmetro de ordem e se ele é conservado ou não.

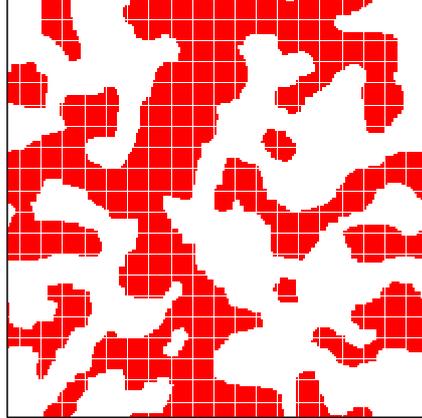
Atualmente muito se conhece a respeito de misturas binárias e sistemas com duplo grau de degenerescência [9], mas muito pouco é conhecido sobre polimisturas e sistemas com múltiplos graus de degenerescência. No último caso, a dinâmica das paredes dos domínios é afetada pelas baixas temperaturas, sendo necessário fazer uso de ativação térmica para sobrepor as barreiras de energia.

## 1.1 Estrutura e resultados apresentados neste manuscrito

Neste trabalho estudamos o ordenamento de fases dinâmico de um sistema em duas dimensões do ponto de vista geométrico, através de simulações computacionais. Partimos de uma base analítica e numérica conhecida para um sistema com degenerescência dupla (modelo de Ising) e generalizamos para o caso de um sistema com múltiplos graus de degenerescência (modelo de Potts).

Este trabalho está estruturado da seguinte forma:

- Na continuação deste capítulo será feita uma breve revisão e apresentação de conceitos fundamentais para o entendimento do trabalho.
- No capítulo 2 serão apresentados alguns modelos magnéticos e naturalmente o modelo no qual baseamos nosso estudo. Discutiremos alguns pontos relativos ao trabalho computacional, principalmente sobre a metodologia ligada à simulação de sistemas fora do equilíbrio.
- No capítulo 3 apresentaremos uma breve síntese do crescimento de domínios de um sistema com duplo grau de degenerescência, com ênfase nos resultados exatos para a



**Figura 1.2:** A figura representa um sistema de dois estados (branco e vermelho) que evoluiu dentro da fase ferromagnética após ser submetido a um *quench* a partir de um estado de equilíbrio na fase paramagnética. As fronteiras que separam os aglomerados de cada fase correspondem aos defeitos topológicos.

distribuição das áreas das estruturas definidas como *hulls* e a excelente concordância com as simulações numéricas.

- O capítulo 4 expõe os resultados a respeito da dinâmica de crescimento de um modelo bidimensional com múltiplos graus de degenerescência e parâmetro de ordem não conservado. Neste caso, onde a forma analítica das distribuições não é conhecida, a hipótese de escala se mantém válida.
- No capítulo 5 serão apresentados os resultados para o modelo de Potts com desordem ferromagnética fraca. Uma característica importante de sistemas que apresentam transição de fase descontínua é que a presença de desordem muda a ordem da transição. Nossa análise nos permite determinar o limite da validade da hipótese de super-universalidade em sistemas com diferentes graus de degenerescência. Veremos que a presença de desordem influencia diretamente a forma da distribuição das áreas dos domínios e *hulls*.
- Finalmente, no último capítulo apresentaremos um resumo das conclusões bem como as perspectivas futuras.

Os resultados apresentados neste trabalho foram publicados em [10, 11].

## 1.2 Conceitos fundamentais

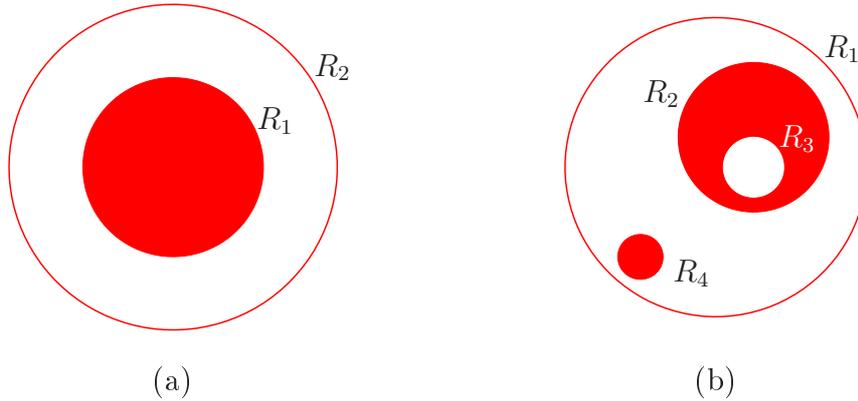
### 1.2.1 Efeitos da dinâmica em sistemas fora do equilíbrio

Quando uma rápida mudança em um dos parâmetros de controle força o sistema a sair de uma situação de equilíbrio, levando-o para uma nova fase, o sistema irá relaxar para o novo estado de equilíbrio correspondente aos novos valores do parâmetro de controle. Geralmente, este processo de relaxação exibe uma dinâmica lenta e o tempo de relaxação diverge no limite termodinâmico.

O processo de relaxação irá depender da natureza da transição sofrida. Em sistemas magnéticos, onde o parâmetro de controle usualmente é a temperatura, é conhecido como *quench* o rápido processo de resfriamento que leva o sistema da condição de equilíbrio na fase paramagnética para a região de coexistência abaixo da temperatura crítica. No caso de uma transição de segunda ordem, devido a quebra de simetria, a fase de baixa temperatura apresenta diversos estados fundamentais no qual o parâmetro de ordem pode assumir diferentes valores. Por exemplo, no caso do ferromagneto de Ising a fase ferromagnética é caracterizada por dois mínimos de energia livre, onde cada mínimo corresponde a um estado fundamental. Quando o sistema é subitamente resfriado, diferentes regiões começam a formar estruturas correspondentes a cada um dos estados fundamentais. Surgem então os defeitos topológicos, que correspondem às fronteiras que separam os diferentes aglomerados (domínios) de spins. Para alcançar o estado de equilíbrio uniforme, o sistema precisa eliminar os defeitos topológicos. Este processo correspondente ao ordenamento de fase dinâmico é chamado de *coarsening*.

A figura 1.2 mostra o padrão formado por um sistema de dois estados submetido a um *quench* para o interior da fase ordenada. O parâmetro de ordem apresenta diferentes valores em diferentes regiões do espaço e, conseqüentemente, defeitos topológicos aparecem (interfaces entre domínios). Para um sistema infinito, o equilíbrio nunca será alcançado, pois o tempo para atingir o equilíbrio cresce com o tamanho do sistema.

O comportamento descontínuo do parâmetro de ordem nas transições de primeira ordem gera, em torno do ponto de transição, estados metaestáveis correspondentes à região do diagrama de fases definida pela linha espinodal. A metaestabilidade é consequência da barreira de energia que o sistema precisa superar para alcançar a fase de baixa temperatura. Dentro desta região o processo de relaxamento se dá por meio de nucleação [12], após o sistema superar a barreira de energia graças às flutuações térmicas. Novamente, defeitos topológicos surgem formando um mosaico de fases ordenadas correspondentes a cada um dos mínimos de energia livre.



**Figura 1.3:** A figura apresenta duas configurações diferentes de domínios. Em (a) temos dois domínios de raios  $R_1$  e  $R_2$ . O domínio de raio  $R_1$  possui área igual a  $A_d^{(1)} = \pi R_1^2$ . O *hull* corresponde a fronteira do domínio. Como não existem outros domínios dentro do domínio  $R_1$ , a área do *hull* de raio  $R_1$  corresponde à área do domínio,  $A_h^{(1)} = A_d^{(1)}$ . O domínio mais externo, de raio  $R_2$ , tem uma área equivalente a  $A_d^{(2)} = \pi(R_2^2 - R_1^2)$ . A área do *hull* de raio  $R_2$  corresponde à toda área englobada, ou seja,  $A_h^{(2)} = \pi R_2^2$ . Em (b) temos um outro exemplo de configuração de domínios. Dentro do domínio de raio  $R_1$  existe a primeira geração de domínios (os de raio  $R_2$  e  $R_4$ ) sendo que dentro do domínio de raio  $R_2$  existe a segunda geração do domínio de raio  $R_1$  (primeira geração do domínio de raio  $R_2$ ).

### 1.2.2 Definições geométricas: domínios e *hulls*

Após ser submetido a um *quench*, o sistema se encontra em um estado de não-equilíbrio dentro da fase ordenada. A competição entre os estados acessíveis promovem o aparecimento de aglomerados de spins correspondentes a cada uma das fases. Estes aglomerados, onde todos os spins apontam na mesma direção, são chamados de domínios. Usualmente, dá-se o nome de *cluster* ao aglomerado de spins correlacionados entre si [13, 14].

A presença de defeitos topológicos limita as áreas dos domínios, que corresponde ao número total de spins que formam o aglomerado. Em um modelo contínuo, o domínio é definido como a região onde o parâmetro de ordem tem o mesmo sinal, e a área corresponde à superfície da região. Dentro de um domínio podem existir “buracos”, correspondentes a presença de outros domínios, chamados de gerações de domínios. O contorno mais externo de um domínio, a fronteira, é chamado de *hull* e a área do *hull* corresponde a toda área do domínio mais as áreas de todas as gerações presentes no seu interior. A figura 1.3 ilustra estes conceitos.

Manter as interfaces dos domínios demanda um alto custo energético, relacionado à tensão superficial. O processo de crescimento dos domínios está associado ao movimento das interfaces, resultando na diminuição da curvatura e por sua vez da tensão superficial. A análise das estruturas definidas pelos *hulls* é interessante pois se tratam de quantidades que dependem apenas do movimento de uma única interface.

### 1.2.3 A hipótese de escala

Uma característica comum de alguns sistemas que evoluem em um estado de não-equilíbrio é a observação experimental e numérica de que o padrão das estruturas se mantém estatisticamente o mesmo em diferentes tempos, a menos de uma correção global associada a um fator de escala. Esta observação deu origem a chamada hipótese de escalamento dinâmico (*dynamical scaling hypothesis*). Sistemas que apresentam crescimento de domínios são, em geral, bem descritos por esta teoria fenomenológica de escalas na qual há um único comprimento característico  $R(t)$  (por exemplo, raio médio) que cresce com o tempo. A morfologia dos domínios é estatisticamente a mesma em todos os tempos quando os comprimentos são medidos em unidades de  $R(t)$ .

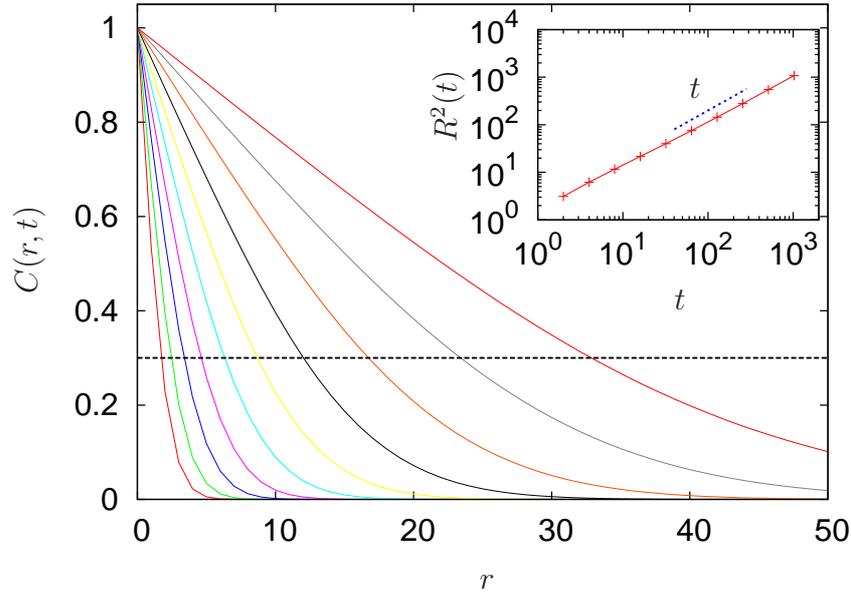
Apesar do sucesso da hipótese de escala em descrever resultados experimentais e de simulação, sua validade foi provada analiticamente apenas para modelos bastante simples, de limitada relevância experimental, incluindo o modelo de Ising unidimensional com dinâmica de Glauber [15, 16], o modelo  $n$ -vetorial  $O(n)$  no limite em que  $n \rightarrow \infty$  [17] e o modelo XY unidimensional [18]. A lei de crescimento depende da natureza e da dimensão do parâmetro de ordem, bem como da presença de leis de conservação. Os tamanhos característicos médios dos domínios crescem com o tempo na forma de lei de potência,

$$R \sim t^\alpha. \quad (1.1)$$

Um dos primeiros resultados consistentes sobre a teoria de escalas foi apresentado por Lifshitz-Slyozov [19, 20] em 1961. O expoente que descreve o crescimento dos domínios depende do mecanismo cinético, embora possa ser necessário um certo transiente de tempo para que o comportamento assintótico apareça. Para modelos onde o parâmetro de ordem não é conservado, o raio médio dos domínios cresce na forma de lei de potência com  $\alpha = 1/2$ . Por outro lado, para modelos onde o parâmetro de ordem é conservado o crescimento dos domínios torna-se mais lento, ainda como lei de potência, mas com o expoente de crescimento  $\alpha = 1/3$ .

### 1.2.4 Tamanho típico dos domínios

Existem diversas formas de estimar o valor do comprimento característico dos domínios. Uma delas consiste em medir a área de todos os domínios do sistema num certo tempo e dividir a soma destes valores pelo número de domínios, obtendo assim a área média e conseqüentemente uma aproximação para o raio médio dos domínios. Outra forma seria através da densidade de defeitos topológicos, onde o tamanho típico dos domínios pode ser encontrado dividindo o comprimento total das paredes pelo número de domínios. Entretanto, todas estas formas fornecem apenas pobres estimativas para o valor de  $R$ , devido



**Figura 1.4:** Comportamento da função de correlação  $C(r, t)$  para o modelo de Potts com dois estados ( $q = 2$ ), medido em diversos tempos ( $2^1$  até  $2^{10}$ ). A pequenas distâncias o valor da correlação é devido a maior probabilidade dos spins estarem num mesmo estado. Para  $r$  maiores, a probabilidade dos spins estarem correlacionados diminui e o valor da correlação cai. Os detalhes a respeito da simulação serão apresentados nos capítulos seguintes. O detalhe mostra o comprimento característico em função do tempo,  $R^2(t) \sim t$ .

a fragilidade das medidas frente, por exemplo, à flutuações térmicas.

A melhor maneira de se estimar o comprimento característico dos domínios é através da medida da função de correlação  $C(\mathbf{r}, t)$ , que mede a correlação entre duas variáveis em dois diferentes pontos do espaço distantes de  $\mathbf{r}$  no mesmo instante de tempo. Entre duas variáveis idênticas a correlação é máxima e naturalmente  $C(0, t) = 1$ . Dada uma variável escalar  $\phi(\mathbf{r}, t)$  a função de correlação é definida como

$$C(\mathbf{r}, t) = \langle \phi(\mathbf{x} + \mathbf{r}, t) \phi(\mathbf{x}, t) \rangle, \quad (1.2)$$

onde o valor entre  $\langle \cdot \cdot \rangle$  representa a média sobre duas variáveis escalares distantes de  $\mathbf{r}$ . De acordo com a hipótese de escala, a existência de um único comprimento característico permite escrever a função de correlação reescalada na forma

$$C(\mathbf{r}, t) \sim m^2(T) f\left(\frac{r}{R(t)}\right), \quad (1.3)$$

onde  $m(T)$  corresponde ao valor de equilíbrio do parâmetro de ordem a temperatura  $T$ . O estado de equilíbrio a temperatura nula corresponde a uma configuração homogênea da variável escalar e, neste caso, o comprimento característico é da ordem do tamanho do sistema. O regime de escala é definido por  $r \gg \xi$ ,  $R \gg \xi$  e  $r/R$  arbitrário, onde  $\xi$

corresponde ao comprimento de correlação no equilíbrio, que fornece a escala do alcance das correlações entre flutuações [21, 22].

O comprimento característico pode ser obtido a partir da escolha de um certo valor constante da função de correlação. A figura 1.4 ilustra o comportamento da correlação de um modelo magnético de spins conhecido como modelo de Potts. Neste caso, o grau de degenerescência do estado fundamental é duplo, correspondendo ao modelo de Ising. Estes modelos serão devidamente apresentados no capítulo 2. Durante a evolução do sistema, a correlação entre os spins aumenta. Os respectivos valores de  $R(t)$  foram obtidos a partir do valor da correlação  $C(R, t) = 0.3$ . Como previsto pela hipótese de escala, o comprimento característico dos domínios cresce com o tempo na forma de lei de potência,  $R(t) \sim t^{1/2}$ , como pode ser visto no detalhe da figura.

## Capítulo 2

# Modelos magnéticos e o método computacional

Muitos sistemas encontrados na natureza podem ser representados por modelos teóricos que simplificam a análise e ajudam no entendimento de eventos que ocorrem em tais sistemas. Diversos materiais compostos por metais de transição (Fe, Co e Ni), que apresentam magnetização espontânea abaixo da temperatura de Curie, são descritos através de modelos microscópicos importantes como o modelo de Heisenberg e suas generalizações. Apesar de parecerem super simplificados, os modelos magnéticos formam a base dos estudos dos fenômenos críticos e, graças à universalidade, diferentes modelos podem levar ao mesmo conjunto de expoentes críticos.

Os spins em sistemas magnéticos podem apresentar uma grande variedade de estruturas ordenadas, tão diversas quanto as encontradas no ordenamento atômico cristalino. Isto se deve aos diferentes tipos de interações existentes entre os spins: as interações de troca, as interações dipolares e as interações spin-órbita. Na presença destas três formas de interações magnéticas o sistema pode apresentar diferentes estruturas no estado fundamental, dependendo da intensidade relativa de cada interação e transições de fase entre diferentes tipos de ordem magnética podem surgir à temperatura finita.

Dentre as interações, a principal responsável pelo surgimento do ferromagnetismo é a interação de troca entre os spins. O modelo mais bem sucedido para descrever uma série de propriedades dos materiais ferromagnéticos, como a transição de fase para-ferromagnética, correlação entre spins, susceptibilidade magnética, calor específico, etc, é o modelo de Heisenberg descrito pelo Hamiltoniano,

$$-\mathcal{H} = \sum_{i,j} J_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \quad (2.1)$$

onde as constantes de troca  $J_{ij}$  interagem com todos os pares de spins primeiro vizinhos.

A modulação de  $J$  define o tipo de alinhamento do estado fundamental, dando origem à configuração ferromagnética (spins alinhados apontando no mesmo sentido) para  $J > 0$  ou antiferromagnética (spins alinhados antiparalelamente) para  $J < 0$ .

Uma das generalizações do modelo de Heisenberg é conhecida como modelo  $n$ -vetorial (ou simplesmente modelo  $O(n)$ ), onde os graus de liberdade do vetor que representa o parâmetro de ordem estão dentro do grupo de simetria  $O_n$ . Isto significa que o número de componentes que definem o vetor de spin  $\mathbf{S}$  é limitado pelo espaço  $n$ -dimensional do parâmetro de ordem. Na fase desordenada, o Hamiltoniano deste modelo torna-se invariante frente a rotações neste espaço. O modelo  $n$ -vetorial se reduz ao modelo de Ising no caso  $n = 1$ , ao modelo  $XY$  para  $n = 2$ , ao modelo de Heisenberg para  $n = 3$ , e é exatamente solúvel no limite de  $n \rightarrow \infty$ . O modelo  $XY$  (ou modelo planar) corresponde a um ferromagneto com um “plano fácil”, ou seja, onde o vetor magnetização é forçado a estar sobre o plano. Este modelo encontra-se na mesma classe de universalidade da transição superfluida. O modelo de Ising representa a classe dos ferromagnetos uniaxiais (ou de “eixo fácil”) como  $YFeO_3$ ,  $CrBr_3$ , ou  $LiHoF_4$ .

## 2.1 O modelo de Ising

O modelo de Ising corresponde, talvez, ao modelo simplificado mais estudado da mecânica estatística. Proposto em 1920 por Wilhelm Lenz ao seu aluno de doutorado Ernest Ising, tinha como objetivo compreender o fenômeno do ferromagnetismo através do estudo de um sistema de spins dispostos nos  $N$  sítios de uma rede linear. A solução exata do modelo unidimensional foi obtida por Ising em 1925 mas não apresentou nenhum tipo de transição a temperatura não nula. Em 1944 Lars Onsager obteve a solução exata do modelo em duas dimensões (na rede quadrada a campo externo nulo) onde finalmente foi detectada a transição ferromagnética. Em três dimensões o modelo não possui solução analítica conhecida mas, através de resultados numéricos, já se sabe basicamente todas as suas características.

A liberdade uniaxial dos spins força o modelo a ter apenas dois estados, representados pelos dois mínimos da energia livre do estado fundamental. De maneira geral, assume-se o vetor de spins  $\mathbf{S}$  como uma variável escalar  $S = \pm 1$ , e o Hamiltoniano de Ising pode ser escrito como

$$-\mathcal{H} = J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j \quad (2.2)$$

onde o termo  $\langle i, j \rangle$  representa as interações entre os  $z = 2d$  spins primeiros vizinhos. Em duas dimensões ( $d = 2$ ), a transição ferromagnética é contínua e ocorre a temperatura crítica bem definida,  $T_c = 1/\ln(1 + \sqrt{2})$ . Diversas interpretações são dadas ao modelo de

Ising graças a sua natureza binária, e suas aplicações vão desde modelos de gás de rede à modelos celulares (neurônios).

## 2.2 O modelo de Potts com $q$ estados

O modelo de Potts [23] é a generalização do modelo de Ising, onde o estado fundamental é descrito em termos de  $q$  mínimos de energia livre. Trata-se de um modelo mais rico e geral, que apresenta diferentes tipos de transições e estruturas de fases. O modelo, que foi estudado por Renfrey B. Potts como parte de seu trabalho de doutorado em 1952, possui solução exata em uma dimensão e em duas dimensões para  $q = 2$  (solução de Onsager). Embora tenha sido proposto inicialmente para estudos dos fenômenos críticos em física estatística, o modelo também se destacou devido a sua grande variedade de aplicações; entre elas, o estudo do crescimento de grãos metálicos, espumas de sabão, espumas magnéticas, células biológicas, etc.

O modelo de Potts padrão com interações entre primeiros vizinhos e campo externo nulo é descrito pelo Hamiltoniano,

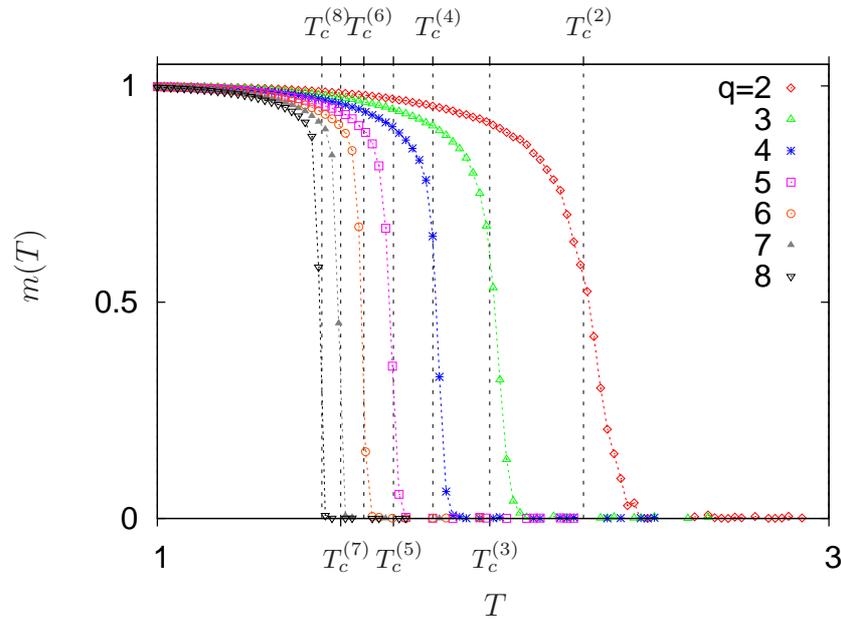
$$-\mathcal{H} = \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \delta_{S_i S_j}, \quad (2.3)$$

onde a variável de spin  $S_i = 0, 1, 2, \dots, (q - 1)$  especifica o estado do spin do  $i$ -ésimo sítio. O símbolo  $\delta$  representa a função delta de Kronecker que vale 1 quando o par de spins vizinhos encontram-se no mesmo estado e 0 caso os spins encontram-se em estados diferentes. A constante de acoplamento  $J_{ij}$  define a natureza da transição: ferromagnética para  $J > 0$  e antiferromagnética para  $J < 0$ . O valor constante  $J_{ij} = J$  caracteriza o modelo puro. Apesar de não possuir solução exata em duas e três dimensões (para  $q > 2$  e  $\forall q$  respectivamente), as propriedades críticas do modelo são bem conhecidas. O ponto crítico é rigorosamente conhecido na rede quadrada, triangular e *honeycomb* para todos os estados  $q \geq 2$  ( $d = 2$ ), sendo a temperatura de transição na rede quadrada dada por,

$$T_c(q) = \frac{2}{\ln(1 + \sqrt{q})}. \quad (2.4)$$

A figura 2.1 mostra o comportamento do parâmetro de ordem (magnetização) em função da temperatura para o modelo de Potts com diversos graus de degenerescência. Fica clara a dependência do ponto de transição com o número  $q$  de estados.

De acordo com a dimensionalidade do sistema e o grau de liberdade do parâmetro de ordem, o modelo de Potts apresenta diferentes tipos de transições. Em duas dimensões e degenerescência  $q \leq 4$  o modelo apresenta transição de segunda ordem; para  $q > 4$  transição é de primeira ordem. Em três dimensões e degenerescência  $q > 2$  as transições



**Figura 2.1:** Curvas de magnetização do modelo de Potts com  $q = 2, \dots, 8$  estados. A presença de duas fases distintas pode ser claramente observada. A transição ocorre quando a temperatura está próxima da temperatura crítica exata do modelo para cada estado. Esta figura é resultado de uma simulação numa rede quadrada de tamanho linear  $L = 1000$  usando a dinâmica de Swendsen-Wang.

são todas de primeira ordem. Fora do limite termodinâmico, não é possível distinguir o tipo de transição observando, por exemplo, o comportamento do parâmetro de ordem quando o número de estados está próximo do valor crítico. As transições tornam-se muito fracas e a afirmação sobre a ordem da transição se dá através do conhecimento prévio dos resultados analíticos.

Dada a possibilidade do sistema ser multiplamente degenerado, a estrutura padrão dos domínios no modelo de Potts torna-se mais complexa que no modelo de Ising ( $q = 2$ ). A densidade de defeitos topológicos varia e, em alguns casos, influencia diretamente o comportamento da lei de crescimento. Sob condições específicas o modelo com degenerescência  $q > 2$  apresenta novas características que influenciam a dinâmica, como a variação do número de lados, metaestabilidade termodinâmica e estabilidade de pontos localizados em tríplice fronteira. Também estão presentes efeitos como dissociação e coalescência de domínios.

## 2.3 O método computacional

A simulação de modelos magnéticos trás uma visão quase microscópica a respeito do crescimento das estruturas, onde o interior de cada grão ou domínio é composto por uma rede de “átomos” e seus respectivos perímetros correspondem à interface entre cada domínio. Como em um sistema real, o crescimento do domínio está associado à curvatura

de sua interface, ou seja, da quantidade de energia associada à curvatura.

Dentre as técnicas computacionais usadas no estudo de sistemas físicos reais destaca-se o método de Monte Carlo [13, 14], que consiste na determinação das propriedades termodinâmicas do sistema através de processos estocásticos (como uma cadeia de Markov<sup>1</sup>). Numa simulação computacional a evolução do sistema se dá de acordo com a dinâmica pré-estabelecida. Cada unidade de tempo a que se refere corresponde a um ciclo de Monte Carlo (*Monte Carlo step*, MCs), que implica em uma atualização (em média) de todos os sítios da rede.

Embora muito já se conheça a respeito das propriedades de sistemas em equilíbrio, comparativamente pouco se sabe a respeito das propriedades dos sistemas fora do equilíbrio. O interesse neste tipo de sistema leva, em geral, a duas vertentes: ou se procura entender como o sistema relaxa após ser submetido a um *quench* para uma dada temperatura  $T$  (em geral em uma fase diferente da inicial); ou se estuda o comportamento de um sistema que nunca atinge o estado de equilíbrio devido à presença de forças motrizes que o afasta deste estado. A simulação computacional possibilita a realização explícita da evolução temporal do sistema através de seus muitos microestados. A escolha da dinâmica que rege a evolução é feita, em geral, com base em argumentos de eficiência. Algumas propriedades dinâmicas não variam com a escolha da dinâmica de atualização individual, como por exemplo o expoente dinâmico  $z$ . Neste sentido, os algoritmos de atualização individual (*single flip*) como o algoritmo de Metropolis e o algoritmo de banho térmico encontram-se na mesma classe de universalidade dinâmica.

A precisão dos resultados obtidos por técnicas de simulação computacional está relacionada, entre outros fatores, com o tamanho do sistemas com o qual trabalhamos. O número de partículas que compõe os sistemas reais é muito superior à quantidade de partículas que são usadas em simulações numéricas. Ainda que fosse possível aumentar indefinidamente o tamanho do sistema, as simulações nas proximidades dos pontos críticos tornariam-se inviáveis. Os tempos de relaxação poderiam divergir, uma vez que  $t$  cresce com o tamanho linear  $L$  do sistema<sup>2</sup>,  $t > \tau \sim L^z$ . Algoritmos de atualização individual como o de Metropolis e o de banho térmico produzem grandes expoentes dinâmicos ( $z \approx 2.0$ ).

Uma forma de contornar o problema é utilizar algoritmos de atualização coletiva como o algoritmo de Wolf e o algoritmo de Swendsen-Wang. Estes algoritmos possibilitam

---

<sup>1</sup>A cadeia de Markov é um caso particular de processo estocástico com estados discretos onde a predição do novo estado é obtida através das informações referentes ao estado atual independentemente dos estados anteriores.

<sup>2</sup>Nas proximidades da temperatura crítica o tempo de autocorrelação exibe um comportamento de escala da forma  $\tau \sim \xi^z$ , onde  $z$  é o expoente crítico dinâmico e  $\xi$  é o comprimento de correlação. Para sistemas finitos, como os utilizados nas simulações computacionais,  $\xi$  não diverge, mas escala com o tamanho linear do sistema,  $\xi \sim L$ . Portanto, na região de criticalidade temos que  $\tau \sim L^z$ .

maior eficiência nas simulações computacionais de grandes sistemas na região da criticidade, diminuindo o valor do expoente dinâmico,  $z \approx 0.25$ . Em particular, o algoritmo de Swendsen-Wang se baseia na construção de aglomerados físicos<sup>3</sup> por meio do mapeamento de Fortuin-Kasteleyn. Cada passo de Monte Carlo (que neste caso chamaremos de *Swendsen-Wang step*, SWs) consiste em formar todos aglomerados físicos dentro do sistema e flipar um a um com probabilidade  $1/q$ .

Neste trabalho estudamos as propriedades geométricas dos *hulls* através da simulação do modelo de Potts com  $q$  estados, em duas dimensões na rede quadrada com condições periódicas de contorno. Cada sistema (correspondente a uma amostra) foi criado (salvo as exceções anunciadas no texto) com um número  $N$  de spins correspondente ao tamanho do sistema,  $N = 10^3 \times 10^3$  sítios. A estatística correspondente a cada distribuição foi obtida da média de 1000 amostras.

Antes do *quench* o sistema foi preparado de forma a reproduzir dois estados de equilíbrio: à temperatura infinita,  $T_0 \rightarrow \infty$ ; e à temperatura crítica,  $T_0 = T_c$ . O estado a temperatura infinita foi reproduzido sorteando, aleatoriamente, um dos possíveis  $q$  estados do modelo de Potts em cada um dos  $N$  sítios da rede. A aleatoriedade garante a ausência de correlação, característica deste estado de equilíbrio. A densidade de spins correspondente a um determinado estado é  $1/q$ . Já o estado de equilíbrio em  $T_0 = T_c$  foi obtido após um processo de termalização, correspondente a suficientes ciclos de atualização do sistema na temperatura crítica através da dinâmica de Swendsen-Wang. Quanto maior é o grau de degenerescência do sistema, maior é a entropia a uma dada temperatura. Um dos efeitos desta maior entropia é sentido diretamente no tempo de termalização. Para o modelo com  $q = 2$  estados o tempo de termalização foi de  $t = 200$  SWs. Para  $q = 3 \rightarrow t = 500$  SWs e  $q = 8 \rightarrow 4000$  SWs.

Após criado o estado inicial, o sistema é submetido a um *quench* para uma determinada temperatura  $T_f$ . Nesta temperatura o sistema evolui de acordo com a dinâmica descrita pelo algoritmo de banho térmico. A escolha desta dinâmica foi puramente convencional. Apesar do algoritmo de Metropolis ser mais eficiente que o algoritmo de banho térmico, na escala de tempo em que focamos este trabalho ( $\sim 2^{10}$  MCs) a eficiência de ambos é similar (lembrando que não estamos interessados em alcançar o estado de equilíbrio do sistema após o *quench*). Quando afirmamos que um determinado evento não ocorre, estamos nos referindo a nossa escala de tempo  $t \sim 2^{10}$  MCs.

As medidas geométricas foram realizadas nos instantes de tempo,  $t = 0, 2^1, 2^2, \dots$ , durante a evolução do sistema. A cada medida todos os domínios foram identificados por

---

<sup>3</sup>Os aglomerados físicos correspondem ao conjunto de sítios conectados com probabilidade  $P = 1 - e^{K\delta s_i s_j}$ , sendo  $K = J_{ij}/(k_B T)$ . O aglomerado geométrico corresponde a todo conjunto de spins vizinhos no mesmo estado. Portanto, um aglomerado geométrico é formado por um ( $T = 0$ ) ou vários aglomerados físicos ( $T > 0$ ) desconectados uns dos outros.

rótulos através do algoritmo de Hoshen-Kopelman [24], o que permitiu a determinação de suas áreas. As áreas dos *hulls* foram determinadas através do algoritmo descrito em [25].

# Capítulo 3

## Crescimento de domínios

### 3.1 Introdução

Quando um sistema é rapidamente resfriado (*quenched*), passando por uma transição de segunda ordem, o surgimento de defeitos topológicos se dá devido ao processo de decomposição espinodal. As fases se separam espontaneamente graças aos efeitos dos campos locais que superam os efeitos da agitação térmica, minimizando assim a energia livre do sistema. O sistema torna-se heterogêneo gerando o padrão conhecido como granulado grosso (*coarse graining*). A heterogeneidade associada à formação dos domínios correspondentes aos diferentes estados acessíveis permite definir um parâmetro de ordem local  $\phi(\vec{x}, t)$  efetivamente constante numa escala entre a constante de rede  $a$  e o comprimento de correlação  $\xi$  do sistema. O processo de relaxação se dá por meio da aniquilação dos defeitos, correspondentes as interfaces que separam os domínios, onde o parâmetro de ordem assume um dos possíveis valores de equilíbrio. O processo dinâmico de separação de fases é conhecido como crescimento de domínios ou *coarsening*.

Dentro da fase ordenada, em um estado de não equilíbrio, o sistema adquire uma dinâmica relacionada com o movimento das paredes dos domínios a fim de eliminar estes defeitos topológicos, pois manter estas interfaces demanda um custo energético. Este excesso de energia é caracterizado por uma tensão superficial  $\sigma$ , isto é, pela energia por unidade de área da parede. Após atingir o regime de escala, o padrão dos domínios se mantém estatisticamente similar em qualquer intervalo de tempo, a menos de uma correção global associada ao fator de escala, e o crescimento passa a ser governado exclusivamente pelos efeitos de curvatura das interfaces.

## 3.2 Sistema com o parâmetro de ordem não conservado

A natureza das transições de fase contínuas é posta em bases mais sólidas e gerais pela teoria de Landau. A fase ordenada de um sistema contínuo com dupla degenerescência pode ser descrita, em termos do parâmetro de ordem escalar  $\phi(\vec{x}, t)$ , pelo funcional da energia livre de Landau [9],

$$\mathcal{F} = \int d^d x \left[ \frac{1}{2}(\nabla\phi)^2 + \frac{r}{2}\phi^2 + \frac{g}{4}\phi^4 \right], \quad (3.1)$$

com  $r \sim (T - T_c) < 0$  e  $g > 0$  sendo constante. O termo de energia livre de Landau,  $f[\phi(\vec{x}, t), T] = \frac{r}{2}\phi^2 + \frac{g}{4}\phi^4$ , apresenta dois mínimos correspondentes aos microestados acessíveis da fase ordenada. O termo  $(\nabla\phi)^2$  corresponde ao custo energético associado à interface entre os possíveis estados de equilíbrio.

O processo de crescimento do sistema com parâmetro de ordem não conservado pode ser comparado ao processo de reação-difusão presente nas reações químicas. A dinâmica pode ser descrita em termos do variacional em  $\phi$  do funcional da energia livre de Landau, assumindo que o parâmetro de ordem muda a uma taxa proporcional à força termodinâmica local. O sistema caminha para um dos seus mínimos através de uma dinâmica dissipativa. A equação que descreve a evolução temporal do campo  $\phi$  é dada por

$$\frac{\partial\phi(\vec{x}, t)}{\partial t} = -\frac{\delta\mathcal{F}[\phi]}{\delta\phi(\vec{x}, t)} + \eta(\vec{x}, t). \quad (3.2)$$

O termo  $\eta(\vec{x}, t)$  refere-se ao ruído branco gerado pela agitação térmica devido ao banho térmico a temperatura  $T$ . Este ruído corresponde a uma distribuição Gaussiana de um campo escalar aleatório com média nula e correlação dada por,

$$\langle\eta(\vec{x}, t)\eta(\vec{x}', t')\rangle = 2\Gamma\delta(\vec{x} - \vec{x}')\delta(t - t'). \quad (3.3)$$

onde a constante  $\Gamma$  corresponde ao coeficiente cinético. A equação 3.2, sem o termo de ruído branco, é conhecida como equação de Ginzburg-Landau dependente do tempo. Um sistema descrito por um campo escalar não conservado evolui devido à curvatura das interfaces dos domínios. A lei de crescimento é  $R(t) \sim t^{1/2}$ , independente da dimensionalidade. Este mecanismo de crescimento induzido pela curvatura é conhecido como *curvature driven coarsening*. A presença de uma tensão superficial implica em uma força por unidade de área proporcional à curvatura média, que por sua vez é proporcional ao inverso do comprimento da interface. Materiais como ligas e magnetos anisotrópicos pertencem a esta classe de universalidade dinâmica [26].

### 3.2.1 Fronteira entre domínios e a equação de Allen-Cahn

Do ponto de vista energético os domínios podem ser separados em duas regiões distintas. A primeira consiste no interior do domínio, região onde o parâmetro de ordem encontra-se completamente alinhado. O custo energético referente a esta configuração é mínimo, tornando-a mais favorável. A outra região refere-se a fronteira que separa diferentes domínios, onde o custo energético é, na maioria das vezes, alto, tornando-a menos favorável. No entanto, existe uma configuração de fronteira que é estável, embora desfavorável, resultado da ausência de curvatura da interface (plana). Quando o sistema atinge esta configuração, o movimento das fronteiras, e conseqüentemente a evolução dos domínios, deixa de existir.

A temperatura nula, a evolução de um sistema onde o parâmetro de ordem, descrito por um campo escalar  $\phi(\vec{x}, t)$ , não é conservado, é determinada pela equação de Guinzburg-Landau,

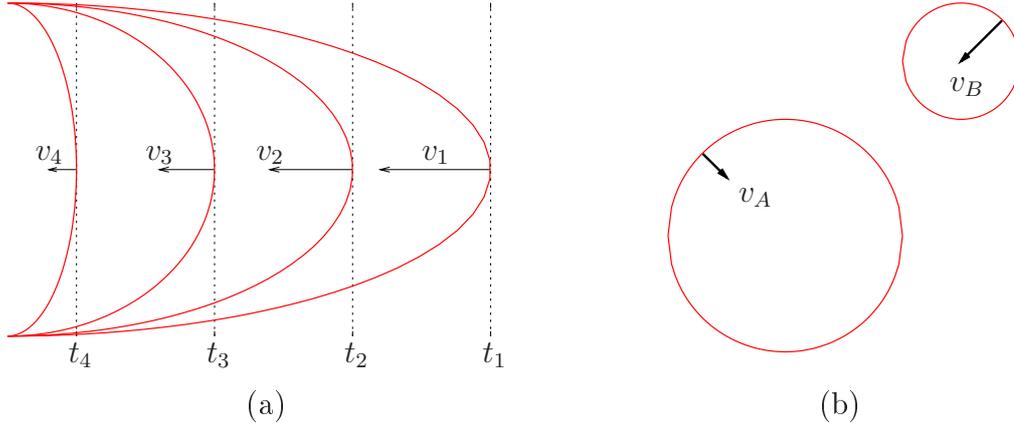
$$\frac{\partial \phi(\vec{x}, t)}{\partial t} = \nabla^2 \phi(\vec{x}, t) - \frac{\delta V[\phi]}{\delta \phi(\vec{x}, t)}. \quad (3.4)$$

A simetria do termo de potencial  $V[\phi]$  envolve dois mínimos referentes a cada um dos estados correspondente à fase ordenada,  $\phi(\vec{x}, t) = \pm\phi_0$ , e no limite em que  $\phi(\vec{x}, t) \rightarrow \pm\infty$  o potencial vai a infinito. A ausência do termo de ruído térmico na equação 3.4 indica que o sistema encontra-se efetivamente na temperatura  $T = 0$ . Quando o *quenching* é feito para qualquer temperatura abaixo de  $T_c$  o sistema se comporta, no limite de escala ( $R(t) \gg 1$ ), como se estivesse em  $T = 0$ . Isto significa que as flutuações térmicas tornam-se relevantes apenas para domínios muito pequenos. De maneira similar, as correlações de curto alcance existentes acima de  $T_c$  tornam-se irrelevantes no regime de escala, ou seja, qualquer temperatura acima de  $T_c$  é equivalente a  $T \rightarrow \infty$ .

No equilíbrio estático, a tensão superficial é nula e as interfaces entre os domínios deixam de se mover. Os primeiros a comprovarem a hipótese que relaciona a tensão superficial com o movimento das fronteiras dos domínios foram S. Allen e J. Cahn [27] em 1979. Eles mostraram que em qualquer dimensão a velocidade  $v$  de cada elemento da interface é proporcional a curvatura local,  $\kappa$ :

$$v = -\frac{\lambda}{2\pi}\kappa, \quad (3.5)$$

onde  $\lambda$  é uma constante com dimensão da constante de difusão. A velocidade é normal a cada ponto da interface e aponta na direção correspondente à redução da curvatura. A dinâmica a temperatura nula é governada puramente pela curvatura das fronteiras entre os domínios, ou seja, domínios ou regiões de domínios com maior curvatura evoluem a uma taxa maior devido a maior velocidade associada às suas interfaces. Isto implica, por



**Figura 3.1:** Esquema da relação entre a curvatura e a velocidade da interface do domínio. A figura (a) mostra a sequência evolutiva de uma fronteira. Quanto maior é a curvatura do domínio no tempo  $t$ , maior é sua velocidade local  $v$ , ou seja,  $v_1 > v_2 > v_3 > v_4$ . A figura (b) elucida melhor a razão pela qual quanto menor for domínio, mais rápido ele colapsa. Domínios pequenos possuem grande curvatura média local e consequentemente maior velocidade de interface ( $v_A < v_B$ ).

exemplo, que domínios pequenos tendem a desaparecer mais rapidamente devido a sua maior curvatura (figura 3.1).

### 3.3 Solução analítica para a distribuição das áreas dos hulls

Os resultados analíticos apresentados até aqui correspondem à solução do problema onde a parâmetro de ordem  $\phi$  é um campo escalar não conservado, com dois mínimos simétricos de energia livre a temperatura nula. Em um sistema discreto esta descrição é compatível com o modelo de Potts com  $q = 2$  estados acessíveis (modelo de Ising), não sendo exatamente estendíveis para o modelo com múltiplos graus de degenerescência ( $q > 2$ ). Os resultados analíticos que serão apresentados no restante deste capítulo referem-se apenas ao modelo com dupla degenerescência.

#### 3.3.1 A equação da área do hull para $q = 2$

Uma vez que a velocidade em cada ponto da fronteira é conhecida (equação 3.5), a taxa de variação da área relativa a qualquer hull de tamanho finito é obtida através da integração da velocidade em torno de cada elemento  $dl$  da interface,

$$\frac{dA_h}{dt} = \oint v dl = -\frac{\lambda_h}{2\pi} \oint \kappa dl = -\lambda_h. \quad (3.6)$$

O resultado da integral é dado pelo teorema de Gauss-Bonnet:  $\oint \kappa dl = 2\pi$ . Integrando no tempo a equação 3.6, partindo do tempo inicial  $t_i$ , obtém-se a área de um *hull* a qualquer tempo  $t$ ,

$$A_h(t, A_i) = A_i - \lambda_h(t - t_i). \quad (3.7)$$

Este resultado mostra que em qualquer tempo  $t$ , *hulls* com área menor que  $\lambda_h t$  desaparecerão, e as áreas dos restantes diminuirão de um fator igual a  $\lambda_h t$ . Desta forma, sendo  $n_h(A_i, t_i)$  o número de *hulls* com área  $A_i$  no instante  $t_i$ , então a distribuição das áreas dos *hulls* em qualquer tempo será dada por

$$\begin{aligned} n_h(A, t) &= \int_0^\infty dA_i \delta(A - A_i + \lambda_h(t - t_i)) n_h(A_i, t_i) \\ &= n_h(A + \lambda_h(t - t_i), t_i). \end{aligned} \quad (3.8)$$

Assim, conhecendo a forma da distribuição em qualquer tempo  $t_i$  a distribuição num instante posterior qualquer fica completamente determinada.

A derivação deste resultado supõe que um domínio não pode se dividir em dois (ou mais), como também dois (ou mais) domínios não podem coalescer. Realmente, um sistema que apresenta apenas dois estados na fase ordenada a temperatura nula não terá, após ter alcançado o regime de escala, a possibilidade de sofrer com os efeitos da dissociação ou coalescência dos domínios. Isto porque as velocidades atuam sempre em sentidos opostos nas regiões onde podem ocorrer estes efeitos. No entanto, sob o efeito de flutuações térmicas ou devido ao maior grau de degenerescência tais mecanismos podem estar presentes e influenciar o processo de crescimento.

### 3.3.2 A distribuição de áreas dos *hulls* para $q = 2$

Na seção anterior foi mostrado que, uma vez conhecida a distribuição das áreas dos *hulls* num instante qualquer, a distribuição num instante posterior é exatamente determinada, desde que a dinâmica do sistema seja governada unicamente pela curvatura das interfaces do domínio. A forma da distribuição inicial para o modelo de dois estados na temperatura de transição e o modelo de percolação aleatória foi obtida exatamente por J. Cardy e R. Ziff [28] em 2003. O modelo de percolação aleatória é composto por partículas e vacâncias, onde as partículas são dispostas aleatoriamente de maneira a preencher os sítios do sistema. Quando a densidade de partículas atinge o valor crítico do modelo de percolação de sítio aleatória,  $\rho_c = 0.5927$  (na rede quadrada), um domínio percolante surge no sistema.

Em duas dimensões, a distribuição inicial das áreas dos *hulls* para a percolação

aleatória e o modelo de Ising na temperatura crítica é dada respectivamente por

$$n_h(A, 0) \sim \frac{2c_h}{A^2}, \quad (3.9)$$

$$n_h(A, 0) \sim \frac{c_h}{A^2}. \quad (3.10)$$

Estes resultados são válidos para  $A_0 \ll A \ll L^2$ , sendo  $A_0$  o valor correspondente a área de uma única partícula e  $L^2$  o tamanho do sistema. A constante adimensional  $c_h = 1/(8\pi\sqrt{3})$  é uma quantidade universal.

A forma analítica da distribuição inicial para o modelo de dois estados na temperatura infinita não é conhecida. Entretanto, Aizenman et al. [29] mostraram que o estado de percolação crítica aleatória se aproxima do estado do modelo com dupla degenerescência em poucos passos (MCs), tornando a distribuição neste caso idêntica à dada por 3.9. Isto se deve ao fato da configuração inicial  $T_0 \rightarrow \infty$  ser obtida através de um sorteio aleatório de modo que todos os possíveis estados correspondentes aos microestados acessíveis estejam igualmente presentes, e assim a densidade de estados no sistema seja de  $\rho = 1/q$ . Em um modelo de dois estados a densidade é  $\rho = 1/2$ . Mesmo inicialmente fora da criticalidade, em pouco tempo grandes estruturas se formam e a distribuição aproxima-se da forma esperada no modelo de percolação crítica [25]. Isto ocorre porque após o sistema ser submetido ao *quench* para uma temperatura dentro da fase ordenada ( $T < T_c$ ), a correlação entre os spins aumenta e os domínios, antes descorrelacionados, coalescem e crescem. A presença de correlação entre os spins faz com que a densidade crítica do modelo de percolação aleatória diminua e se compare à densidade do modelo de percolação contínua,  $\rho_c = 0.5$ .

Finalmente, conhecendo-se a forma da distribuição inicial, é possível, de acordo com a equação 3.8, determinar a forma da distribuição a qualquer tempo  $t$ . Substituindo as equações 3.9 e 3.10 em 3.8 para  $t \gg t_i$ , obtem-se

$$n_h(A, t) = \frac{2c_h}{(A + \lambda_h t)^2}, \quad T_0 \rightarrow \infty, \quad (3.11)$$

$$n_h(A, t) = \frac{c_h}{(A + \lambda_h t)^2}, \quad T_0 = T_c. \quad (3.12)$$

As distribuições apresentam uma forma de escala do tipo  $n_h(A, t) = t^{-2}f(A/t)$  correspondendo a um sistema com uma área característica proporcional a  $t$ , ou a um comprimento característico  $R(t) \sim t^{1/2}$ , como previsto pela hipótese de escala. No entanto, em momento algum tal hipótese foi assumida (ela surge naturalmente dos cálculos). Além disso, a teoria fenomenológica de escala convencional é restrita ao limite de *scaling*:  $A \rightarrow \infty$  e  $t \rightarrow \infty$  com  $A/t$  fixo. Entretanto as equações 3.11 e 3.12 são válidas sempre que  $t$

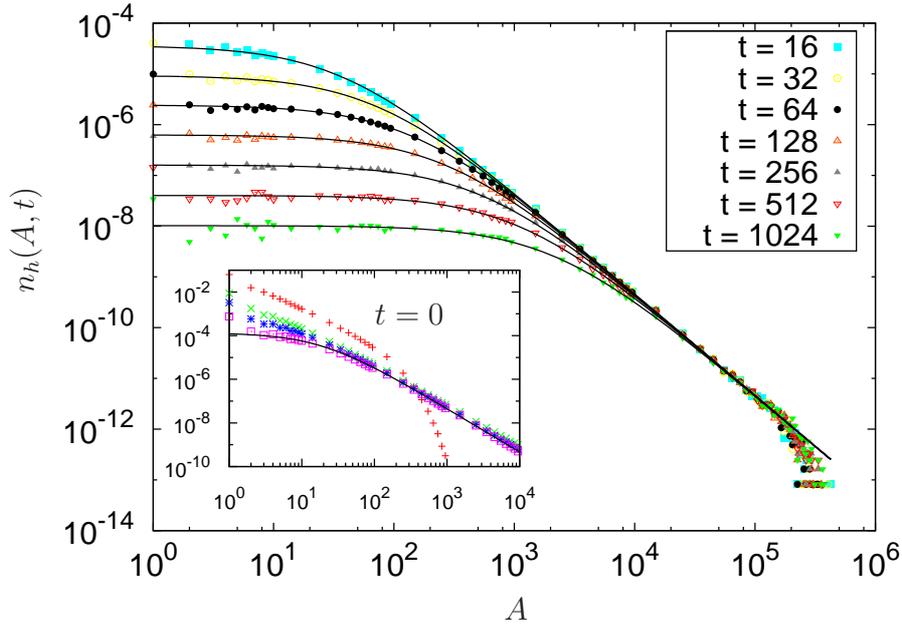
for suficientemente grande e  $A \gg A_0$ , limites impostos pelos resultados de Allen-Cahn e Cardy-Ziff. Além disso, o uso dos resultados de Allen-Cahn deveria ser restrito a um sistema a temperatura nula pois foi derivado de um sistema contínuo sem flutuações térmicas. No entanto, mesmo para temperaturas diferentes de zero este resultado é válido, pois os efeitos das flutuações são absorvidos pela constante  $\lambda_h = \lambda_h(T)$  [25].

### 3.4 Concordância com os resultados numéricos

As distribuições das áreas dos domínios e *hulls* do modelo com dois estados, o modelo de Ising, foram significativamente estudadas em [25, 29–32].

Os resultados analíticos referentes às distribuições das áreas dos *hulls* (equações 3.11 e 3.12) foram obtidos a partir da consideração inicial de que o único processo responsável pela dinâmica das fronteiras está relacionado com a velocidade da interface a temperatura nula, dada pela equação de Allen-Cahn (equação 3.5). Entretanto, flutuações térmicas são responsáveis pela formação de domínios que não estão relacionados com o processo de crescimento. Estas flutuações aumentam a rugosidade das paredes dos domínios alterando a curvatura e, conseqüentemente, a velocidade da fronteira. Contudo, como foi mostrado em [25], o mesmo mecanismo que controla o crescimento a temperatura nula, controla o crescimento em  $0 < T < T_c$ . Os efeitos das flutuações térmicas são irrelevantes para a dinâmica assintótica de ordenamento do sistema, e toda a relação com a temperatura é absorvida pela constante  $\lambda_h = \lambda_h(T)$ .

A figura 3.2 mostra a distribuição temporal das áreas dos *hulls* (em escala logarítmica) para o modelo de Potts com  $q = 2$  estados, após o *quench* do estado de equilíbrio à temperatura infinita,  $T_0 \rightarrow \infty$ , para a temperatura  $T_f = 0$ . A forte dependência temporal da distribuição é resultado do desaparecimento dos domínios com áreas pequenas. As linhas cheias representam a forma analítica da distribuição dada pela equação 3.11. Uma excelente concordância é observada considerando como único parâmetro de ajuste a constante  $\lambda_h = 2.1$ . O detalhe da figura mostra a distribuição inicial ( $t = 0$ ) desviando completamente da lei de potência. Como foi discutido nas seções anteriores, o estado inicial a temperatura infinita não corresponde ao estado crítico de percolação aleatória. No entanto, devido ao rápido aumento da correlação local entre os spins, a distribuição logo adquire a forma da lei de potência ( $\sim 2$  MCs). Na presença de flutuações térmicas os novos domínios que surgem causam um desvio (para pequenas áreas) na distribuição em relação ao resultado obtido para a temperatura nula. Apesar de não estar sendo mostrado aqui, este desvio é relativo apenas ao efeito da temperatura, sendo independente do número  $q$  de estados. No próximo capítulo, onde serão estudados os casos com múltipla degenerescência ( $q > 2$ ), tais desvios serão observados nas distribuições das área

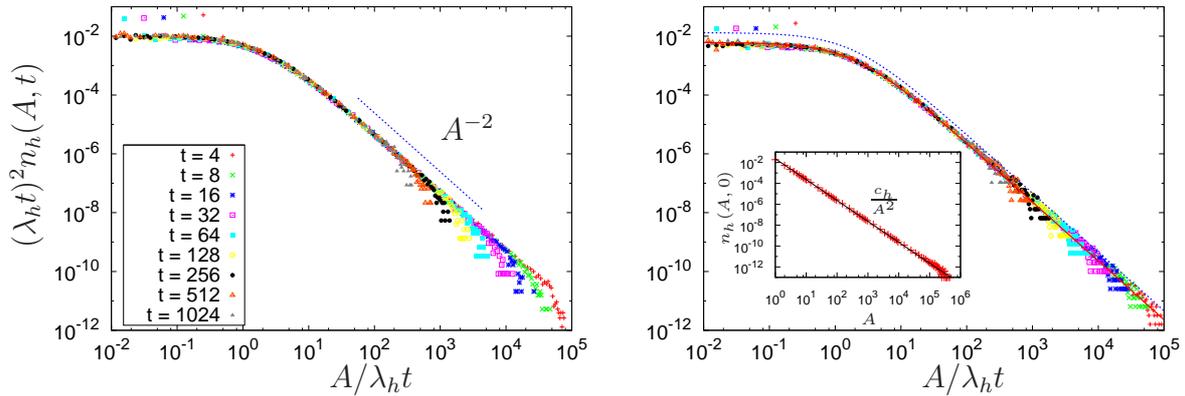


**Figura 3.2:** Distribuição temporal das áreas dos *hulls* para o modelo de Potts com  $q = 2$  estados, após o *quench* do estado de equilíbrio à temperatura infinita,  $T_0 \rightarrow \infty$ , para a temperatura  $T_f = 0$ . Neste caso, a temperatura final do *quench* ( $T_f < T_c$ ) não influencia a dinâmica de crescimento. As linhas cheias representam a forma da distribuição dada pela equação 3.11 nos diversos tempos sendo  $\lambda_h = 2.1$ . O detalhe mostra a distribuição nos tempos iniciais ( $t = 0, 2, 4$  e  $8$ ). O estado a  $t = 0$  não corresponde ao estado crítico de percolação aleatória e, naturalmente, a distribuição não obedece a forma dada pela equação 3.9. Entretanto, após o sistema evoluir por pouco tempo ( $\sim 2$  MCs) a distribuição já assume a forma da distribuição do estado crítico percolativo.

dos *hulls*.

A figura 3.3 apresenta o colapso da distribuição temporal das áreas dos *hulls* para o modelo de Potts com dois estados partindo de diferentes configurações iniciais. A figura da esquerda corresponde ao colapso da distribuição da figura 3.2, onde o sistema foi resfriado do estado de equilíbrio a temperatura infinita para o estado de equilíbrio a temperatura nula. A figura da direita exibe o colapso da distribuição de um sistema que sofreu um *quench* do estado de equilíbrio a temperatura crítica,  $T_0 = T_c$ , para a temperatura nula,  $T_f = 0$ . A linha cheia (em vermelho) corresponde a forma da distribuição dada pela equação 3.12. A linha pontilhada (em azul) representa a equação 3.11. Os desvios observados no final das distribuições, em ambos os casos, são devido aos efeitos de tamanho finito do sistema. O detalhe mostra a concordância entre o resultado analítico, dado pela equação 3.10, e o resultado numérico. Tal concordância garante que o sistema foi devidamente termalizado na temperatura crítica.

A distribuição dos domínios geométricos também foi analisada, embora os resultados não tenham sido apresentados neste manuscrito por razões que ficarão claras no próximo capítulo. Apenas vale a pena ressaltar que os resultados analíticos obtidos nas seções anteriores são válidos somente para a distribuição das áreas dos *hulls*. Diferentemente



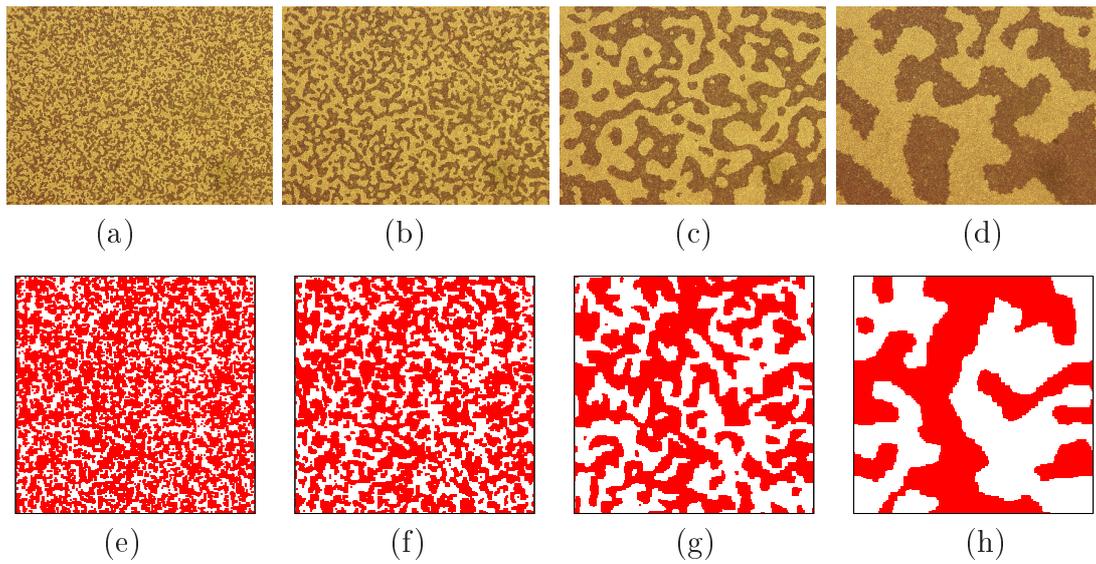
**Figura 3.3:** A figura mostra a distribuição temporal colapsada das áreas dos *hulls* para o modelo de Potts com  $q = 2$  estados. A esquerda: sistema configurado à temperatura infinita,  $T_0 \rightarrow \infty$ , e instantaneamente resfriado para  $T = 0$  (colapso referente a figura 3.2). A direita: sistema configurado à temperatura crítica,  $T_0 = T_c$ , e instantaneamente resfriado para  $T = 0$ . A linha cheia (em vermelho) representa a equação 3.12. A linha pontilhada (em azul) representa a equação 3.11. O detalhe mostra a coerência entre distribuição inicial à temperatura crítica e o resultado analítico dado pela equação 3.10.

do que ocorre para as áreas dos *hulls*, a área de um domínio depende não somente do movimento de sua interface externa mas também de uma possível interface interna correspondente a presença de domínios internos. De fato, um sistema com dois estados apresenta muitas gerações de domínios, presença que diminui significativamente à medida que a degenerescência aumenta. Entretanto, o resultado da distribuição das áreas dos domínios geométricos (percolantes ou não) é efetivamente o mesmo da distribuição dos *hulls* [25]. A correção na forma da distribuição envolve basicamente uma mudança na constante  $c_h \rightarrow c_d$  (sendo  $c_d \simeq c_h$ ) e no expoente,

$$n_h(A, 0) \sim \frac{(2)c_h}{A^2} \quad \longrightarrow \quad n_d(A, 0) \sim \frac{(2)c_d}{A^\tau} \quad (3.13)$$

onde  $\tau = 187/91 \approx 2.055$  para o modelo de percolação crítica aleatória [21] e  $\tau = 379/187 \approx 2.027$  para o estado crítico do modelo com dupla degenerescência [33].

Além da excelente concordância entre os resultados numéricos e analíticos que validaram a hipótese de escala para o modelo de dois estados, a teoria foi aplicada aos padrões experimentais de crescimento de domínios em cristais líquidos [31]. A figura 3.4 mostra a evolução dos domínios quirais formados em alguns tipos de cristais líquidos (*banana shaped*) quando submetidos a um campo elétrico externo. A semelhança entre os padrões dos cristais líquidos com os padrões do modelo com  $q = 2$  estados nos diversos tempos fica clara na sequência de imagens. Foi mostrado que o processo de crescimento dos domínios quirais é regido basicamente pela curvatura das fronteiras, como ocorre no modelo teórico. A análise das imagens foi feita e os resultados mostraram-se de acordo com a teoria. A lei de crescimento encontra-se na mesma classe de universalidade de Allen-Cahn. A forma



**Figura 3.4:** Sequência de imagens (a, ..., d) que mostram a evolução dos domínios quirais em alguns tipos de cristais líquidos (*banana shaped*) quando submetidos a um campo elétrico externo. Os tempos correspondem a  $t = 60, 300, 2700, 7200$  segundos. Abaixo temos imagens (e, ..., h) do sistema com  $q = 2$  estados. Os respectivos tempos são  $t = 2, 5, 25, 200$  MCs.

analítica obtida para a distribuição das áreas dos *hulls* de um modelo com parâmetro de ordem não conservado descreve a distribuição das áreas dos domínios dos cristais, corroborando a hipótese dinâmica de escala.

## Capítulo 4

# Sistema com múltiplos graus de degenerescência

Representamos um sistema de polimisturas através do modelo de Potts com  $q$  estados. Cada estado, referente a um mínimo de energia livre na fase de baixa temperatura, representa um dos elementos da mistura. Generalizações do modelo de Potts também são usadas para simular o processo de crescimento em metais e espumas. Uma das mais importantes generalizações, desenvolvida por J. Glazier e F. Graner [34–36], é conhecida como modelo de Potts celular. Esta generalização se tornou uma das principais ferramentas no estudo de morfogênese biológica, pois permite descrever com facilidade processos celulares como a diferenciação, crescimento, morte, mudança de forma, migração, secreção e absorção de materiais extra celulares.

De maneira geral, o modelo de Potts é bastante usado na simulação do crescimento de grãos. Estudos recentes do modelo puro com  $q$  estados e parâmetro de ordem não conservado, mostraram que a lei de crescimento é análoga ao caso Ising (não conservado), onde no regime de escala o comprimento característico mantém a forma predita pela lei de Allen-Cahn [37,38],  $R(t) \sim t^{1/2}$ , independente do grau de degenerescência. No entanto, para  $q > 2$  e  $T = 0$  o crescimento como lei de potência não se mantém por muito tempo, e a escala do comprimento característico converge para um valor limite. Este fato está de acordo com o critério de Lifshitz-Safran [20,39] que afirma que quando a degenerescência do estado fundamental  $q \geq d+1$ , onde  $d$  é a dimensionalidade do sistema, poderá haver um travamento das paredes dos domínios dependendo da geometria da rede e da densidade de defeitos topológicos.

## 4.1 A lei de von Neumann

O modelo de espumas secas tem a característica de formar padrões (ou estruturas) onde cada interface de domínio (ou célula) se move de acordo com uma certa tensão superficial. Tal movimento permite que o domínio cresça, diminua ou até mesmo desapareça. O padrão geométrico típico das estruturas possui número de coordenação igual a 3, ou seja, cada vértice do domínio é triplamente conectado. A dinâmica durante a evolução destas estruturas é bem descrita pelos processos que envolvem somente os efeitos de curvatura, sendo os efeitos térmicos menos relevantes. O crescimento dos domínios segue a forma de escala prevista pela equação de Allen-Cahn. A velocidade em cada ponto da interface, fora os pontos de intersecção entre três domínios, é proporcional à curvatura local  $\kappa$ ,  $v = -(\lambda/2\pi)\kappa$ ;  $\lambda$  é uma constante que depende da temperatura, da dimensão e do número de estados. O sinal negativo indica que a velocidade tem sentido contrário ao vetor normal, de maneira que a interface caminha no sentido de diminuir sua curvatura.

Em duas dimensões a taxa de variação da área de um *hull* é obtida integrando a velocidade em cada ponto da interface e usando o teorema geral de Gauss-Bonnet,

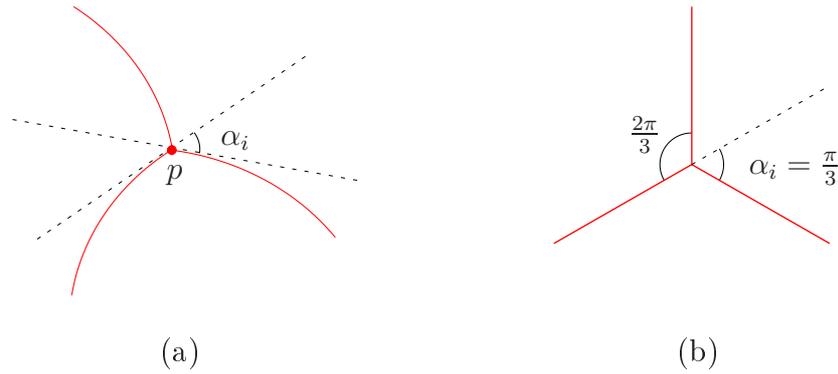
$$\frac{dA}{dt} = \oint v dl = -\frac{\lambda}{2\pi} \oint \kappa dl = -\lambda \left( 1 - \frac{1}{2\pi} \sum_i \alpha_i \right), \quad (4.1)$$

onde  $\alpha_i$  corresponde ao ângulo formado entre duas retas tangentes à superfície em qualquer um dos  $n$  vértices ou junções triplas, como mostra a figura 4.1a. Em alguns sistemas, como o modelo de Potts com  $q = 2$  estados, a soma dos ângulos é nula ( $\sum_i \alpha_i = 0$ ) uma vez que não existem vértices ou junções triplas [29, 40]. Sendo assim, o resultado do teorema de Gauss-Bonnet é exatamente o apresentado na seção 3.3 (equação 3.6). Em sistemas altamente anisotrópicos, que é o caso do modelo de Potts com  $q > 2$  estados na rede quadrada, os ângulos  $\alpha_i$  são todos diferentes. Alguns sistemas, como o modelo de espumas, produzem estruturas típicas com ângulos entre as interfaces igual a  $2\pi/3$ , sendo  $\alpha_i = \pi/3$  para todo  $i$  (figura 4.1b).

Considerando um sistema onde a correspondência entre o número de lados e a quantidade de vértices é de um para um, a taxa de crescimento das áreas dos *hulls* reduz-se a lei de von Neumann [40, 41],

$$\frac{dA_n}{dt} = \frac{\lambda}{6} (n - 6), \quad (4.2)$$

onde  $A_n$  corresponde a área de um *hull* com  $n > 1$  lados. Note que, no caso do modelo com dupla degenerescência não existem vértices pois cada domínio encontra-se imerso em outro, sendo o número de lados sempre constante e igual a  $n = 1$ . A lei de von Neumann deixa de ser válida neste caso sendo a taxa de crescimento dada pela equação 3.6. A lei de von Neumann também pode ser estendida para sistemas onde o ângulo interno depende



**Figura 4.1:** Esquema representando o vértice de uma configuração de diferentes domínios. Na figura (a) vemos o ângulo  $\alpha_i$  formado entre as duas retas tangentes à fronteira entre dois domínios. Na figura (b) temos a mesma configuração no limite em que os ângulos entre os domínios no ponto de tripla junção é  $2\pi/3$  ( $\alpha_i = \pi/3$ ).

do número de lados [42] e para sistemas em três dimensões [43].

Um domínio cresce, diminui ou mantém sua área constante dependendo do número de lados, respectivamente maior, menor ou igual a 6. Considerando que toda a dependência da dinâmica do sistema está relacionada com o número de lados de cada *hull*, o problema poderia ser visto como trivial, levando em conta apenas uma simples correção na taxa de crescimento com relação ao caso com  $q = 2$  estados ( $n = 1$ ). Entretanto, durante a evolução o número de lados de um *hull* muda, o que significa que o *hull* pode crescer durante um certo intervalo de tempo e diminuir no intervalo seguinte, uma vez que outros domínios podem surgir ou mesmo desaparecer. Isto implica em não ser possível escrever uma relação simples como a equação 3.8 para o modelo de Potts com degenerescência múltipla ( $q > 2$ ). A distribuição das áreas dos *hulls* num tempo  $t$  qualquer pode não ter nenhuma relação direta com a distribuição num tempo  $t_i$  anterior.

## 4.2 Condições iniciais

Os resultados das distribuições das áreas dos domínios e *hulls* para o modelo de dois estados mostram que o efeito da escolha da configuração inicial de equilíbrio não altera a forma final da distribuição, a qual nos dois casos é uma lei de potência. Entretanto, como foi visto no capítulo 3, esta particularidade está relacionada com o fato da densidade de spins de cada estado estar próxima da densidade crítica  $\rho_c$  do modelo de percolação aleatória. Quando se trata de um modelo de spins com maior grau de degenerescência, como o modelo de Potts com  $q > 2$  estados, a densidade de spins correspondente a cada estado diminui a medida que a degenerescência aumenta. O primeiro passo então é compreender a relação entre a condição inicial e a forma da distribuição. Veremos um pouco mais adiante que, em alguns casos, diferentes condições iniciais resultam em

diferentes distribuições iniciais.

Não se conhece uma solução analítica que descreva a forma da distribuição inicial para o modelo de Potts puro com  $q > 2$  estados. Ainda sim, as únicas condições iniciais relevantes a serem estudadas são à temperatura crítica,  $T_0 = T_c$ , ou à temperatura infinita,  $T_0 \rightarrow \infty$ . No caso  $q = 2$  existe solução analítica apenas para a distribuição inicial das áreas dos *hulls* para  $T_0 = T_c$  [28]. A solução para  $T_0 \rightarrow \infty$  não é conhecida, mas no caso com dupla degenerescência, em pouco tempo a distribuição se aproxima da distribuição analítica conhecida para o modelo de percolação aleatória (capítulo 3).

Antes do *quench*, o sistema é então preparado em um dos dois diferentes estados iniciais de equilíbrio. Efeitos da ordem da transição serão observados já na distribuição inicial quando o sistema é preparado em  $T_c$ . Quando o sistema é preparado a temperatura infinita, a densidade média de spins referente a cada estado vale  $\rho = 1/q$ . Isto implica que quanto maior for o número de estados, mais distantes estamos do valor da densidade crítica do modelo de percolação aleatória  $\rho_c \sim 0.59$ . Este distanciamento proporcional a  $q$  afeta diretamente a forma da distribuição inicial neste caso.

## 4.3 A forma da distribuição inicial

### 4.3.1 Equilíbrio a temperatura infinita

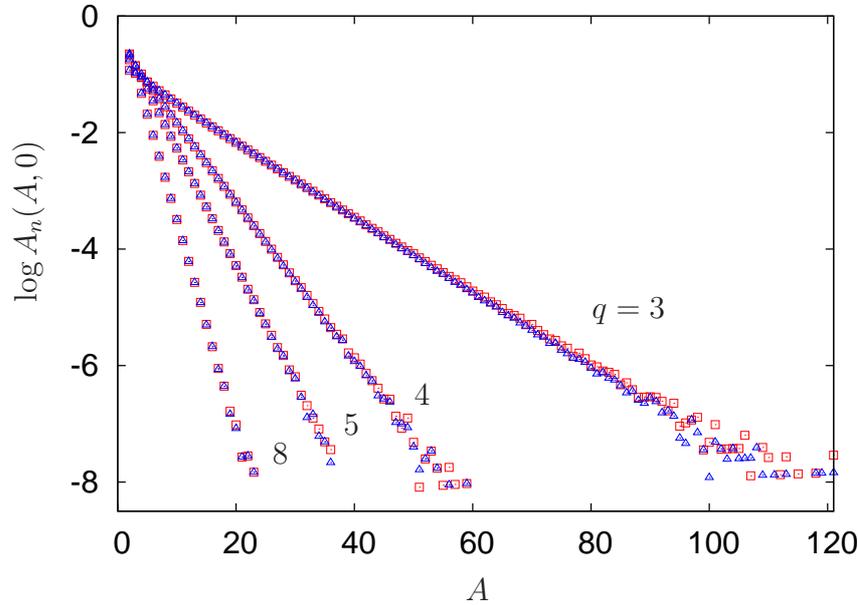
Quando o sistema parte da condição inicial a temperatura infinita,  $T_0 \rightarrow \infty$ , os spins encontram-se descorrelacionados. A figura 4.2 mostra a distribuição inicial das áreas dos domínios geométricos e dos *hulls*,  $n(A, 0) = n_{rp}(A, 1/q)$ , onde  $n_{rp}(A, p)$  é a distribuição correspondente à percolação aleatória com probabilidade de ocupação  $p = 1/q$ . O fator  $q$  corresponde ao número de espécies que contribuem igualmente na distribuição, enquanto no problema de percolação, a fração  $(1 - 1/q)$  corresponde aos sítios vazios. Infelizmente,  $n_{rp}$  não é conhecida analiticamente para valores de  $p$  longe de  $p_c$ . Para  $q = 2$ , o sistema encontra-se próximo ao ponto de percolação crítica e a distribuição é tipo lei de potência<sup>1</sup>,  $n(A, 0) \simeq A^{-\tau}$ , com  $\tau = 2$  para as áreas dos *hulls* e  $\tau = 187/91$  para as áreas dos domínios<sup>2</sup>. Este comportamento se mantém até grandes áreas,  $A \simeq L^2$ , onde ocorre uma mudança de comportamento devido ao tamanho finito do sistema e a distribuição decai exponencialmente.

Para  $q > 2$ , o desvio da lei de potência é observado desde pequenas áreas, tanto para as áreas dos domínios quanto dos *hulls*. Para densidades  $p$  suficientemente baixas

<sup>1</sup>Como foi visto no capítulo 3 a distribuição não é lei de potência em  $t = 0$  mas adquire esta forma em poucos passos ( $\sim 2$  MCs).

<sup>2</sup>O expoente de crescimento para a distribuição dos *hulls* é  $\tau = 2$  independente da condição inicial. Entretanto, o expoente para a distribuição inicial dos domínios varia, sendo  $\tau = 187/91$  para  $T_0 \rightarrow \infty$  [21] e  $\tau = 379/187$  para  $T_0 = T_c$  [33].

(provavelmente válido para todo  $p < p_c$ ) a cauda da distribuição é exponencial [44–49] e os resultados das simulações são compatíveis com [21, 50],  $n_{rp} \sim A^{-\theta} \exp[-f(p)A]$ , onde o expoente  $\theta$  depende apenas da dimensão ( $\theta = 1$  para  $d = 2$ ).

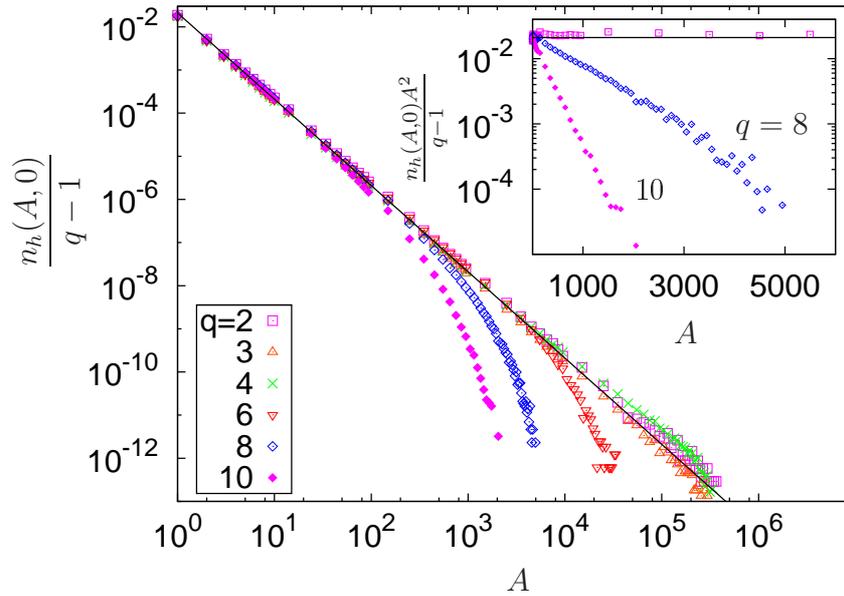


**Figura 4.2:** Distribuição inicial das áreas dos domínios geométricos e *hulls* na temperatura infinita para diversos valores de  $q$ , correspondendo ao problema de percolação aleatória com densidade de ocupação igual a  $1/q$ . O tamanho do sistema é  $N = L^2$  ( $L = 5000$ ) e as médias foram feitas sobre mais de 1000 amostras. Para grandes valores de  $q$ , a curva se aproxima de uma exponencial. Na verdade, para  $q = 3$ , desvios da linearidade já são perceptíveis e, além disso, ambas as distribuições (domínios e *hulls*) podem ser resolvidas, o que não é possível para grandes valores de  $q$ . Para  $q = 2$  (não mostrado), como o sistema está mais próximo do ponto crítico de percolação, um forte desvio do comportamento exponencial é observado.

Uma vez que todos os estados estão igualmente presentes no estado inicial, os domínios são, em geral, cada vez menores quanto maior for o valor de  $q$ , e o coeficiente de ocupação  $f(p)$  também aumenta à medida que  $q$  aumenta (ou  $p$  diminui). O resultado da distribuição inicial para diferentes valores de  $q$  é mostrado na figura 4.2. As áreas dos domínios e *hulls* só se distinguem para grandes valores de  $A$  e pequenos valores de  $q$ . Esta distinção é devida aos domínios que encontram-se imersos dentro de outros domínios (gerações de domínios) desde o estado inicial e que permanecem assim por algum tempo durante a evolução. Para grandes valores de  $q$  a distribuição se aproxima de uma exponencial e se torna cada vez mais difícil distinguir as áreas dos domínios e *hulls*.

### 4.3.2 Temperatura crítica e transição de segunda ordem

Quando a transição é de segunda ordem e o sistema é equilibrado na temperatura crítica  $T_c$ , a distribuição das áreas tanto dos domínios quanto dos *hulls* têm a forma de



**Figura 4.3:** Distribuição de equilíbrio das áreas dos *hulls* na temperatura crítica para  $q = 2$  a 8. A linha cheia corresponde a  $c_h^{(2)}/A^2$  da equação 4.3. Considerando que as diferenças entre as constantes  $c_h^{(q)}$  são pequenas, as curvas têm um bom colapso. De fato, quando consideramos  $c_h^{(q)}$  como um parâmetro de ajuste, os valores são muito similares, sendo que  $c_h^{(4)} < c_h^{(3)} < c_h^{(2)}$ . Para  $q > 4$  a transição é descontínua, mas apesar disso a distribuição segue como lei de potência até um ponto de *crossover* que marca um forte desvio deste comportamento. O detalhe mostra que a cauda da distribuição para  $q > 4$  tem a forma de uma exponencial, ausente para  $q \leq 4$  (que pode ser visto no comportamento horizontal dos dados para  $q = 2$ ).

uma lei de potência, como pode ser visto na figura 4.3 para  $q = 2, 3$  e 4. Para  $q = 2$  em duas dimensões, a forma analítica da distribuição de equilíbrio para os *hulls* é dada pela equação 3.10. Entretanto, a forma generalizada para  $q > 2$  não é conhecida. Com base na coerência entre os resultados numéricos e analíticos no caso  $q = 2$  e semelhança das distribuições iniciais para  $q > 2$ , sugerimos a forma

$$n_h(A, 0) = \frac{(q-1)c_h^{(q)}}{A^2}, \quad (4.3)$$

válida para todo  $q \leq 4$ , como pode ser visto na figura 4.3. A escolha do prefator  $q-1$  foi baseada na redução da forma geral ao resultado analítico quando  $q = 2$ . Entretanto, pode ser feita uma pequena modificação na constante  $(q-1)c_h \rightarrow qc'_h$  de modo que cada espécie contribua com a mesma proporção na distribuição total. Observe que, a menos do caso  $q = 2$ , o valor de  $c_h^{(q)}$  não é conhecido exatamente. Uma estimativa aproximada das constantes, considerando-as como parâmetro de ajuste, é  $c^{(3)} \simeq 0.0203$  e  $c^{(4)} \simeq 0.0192$ . O ajuste para  $q = 2$  produz  $c^{(2)} \simeq 0.0227$ , que é muito próximo do valor exato. As constantes obedecem a inequação  $c_h^{(4)} < c_h^{(3)} < c_h^{(2)}$ .

Para os domínios geométricos, uma relação similar à equação 4.3 é obtida para a

distribuição das áreas em  $T_c$  e  $2 \leq q \leq 4$ . O expoente é ligeiramente maior que 2,  $\tau = 379/187$  para  $q = 2$  [21, 25, 33] e parece ser independente de  $q$  para  $q = 3, 4$ . Os coeficientes, no entanto, não são exatamente conhecidos (numericamente, para  $q = 2$ , é próximo de  $c_h^{(2)}$  [25]).

### 4.3.3 Temperatura crítica e transição de primeira ordem

Quando a transição é descontínua e o sistema é termalizado em  $T_c$ , a distribuição inicial apresenta dois comportamentos: um para valores de áreas tipicamente menores que o comprimento de correlação  $\xi$  e outro para grandes áreas. Para  $A < \xi$  a distribuição inicial das áreas dos domínios e *hulls* tem a forma de uma lei de potência. Para áreas maiores que  $\xi$ , o comportamento da distribuição muda e segue a forma de uma exponencial. Dependendo do valor de  $\xi$  e do tamanho do sistema  $L$  a mudança no comportamento da distribuição inicial pode não ser observada, como no caso  $q = 5$ . Neste caso o sistema apresenta uma transição de fase “fraca” e o comprimento de correlação é grande, maior que o tamanho do sistema utilizado. Por exemplo, para  $q = 5, 6$  e  $8$ , uma estimativa para o valor de  $\xi$  é, respectivamente, 2512, 159 e 24 [51, 52].

A figura 4.3, também apresenta a forma da distribuição inicial das áreas dos *hulls* para o modelo com  $q = 6, 8$  e  $10$  estados. Os desvios da lei de potência são claramente observados. O detalhe mostra o claro comportamento exponencial da cauda da distribuição.

A forma geral para a distribuição inicial das áreas dos *hulls*, aparentemente válida para todos os valores de  $q$  quando o sistema encontra-se em equilíbrio na temperatura crítica é

$$n_h(A, 0) = \frac{(q-1)c_h^{(q)}}{A^2} e^{-\alpha_q A/A_q^*} \quad (4.4)$$

onde  $\alpha_q = 0$  para  $q \leq 4$ .

A distribuição inicial das áreas dos domínios geométricos é muito similar a dos *hulls*. Neste caso, nenhum dos coeficientes  $c_d^{(q)}$  são exatamente conhecidos. Os resultados numéricos obtidos em [25] sugere que o valor de  $c_d^{(q)}$  é muito próximo a  $c_h^{(q)}$  e os estudos para  $q = 3$  e  $4$  sugerem que esta similaridade entre os coeficientes permanecem válidas para todos os  $q$  estados.

## 4.4 Correlação ao longo da evolução

Uma importante quantidade usada para caracterizar as propriedades de um sistema estatístico é o comprimento de correlação  $\xi$ , que pode ser obtido do decaimento exponencial da função de correlação  $C(\mathbf{r})$  no limite em que a distância linear entre dois pontos da rede,  $\mathbf{r} = (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)$ , é grande. Existem poucos modelos onde o comprimento de correlação

de equilíbrio é exatamente conhecido, entre eles o modelo de Ising bidimensional, onde o comprimento de correlação é exatamente conhecido para todas as temperaturas tanto da fase ordenada quanto da desordenada, e o modelo de Potts na rede quadrada [51].

A evolução do sistema está diretamente relacionada com as correlações presentes no estado inicial, podendo ser:

- nula, se  $T_0 \rightarrow \infty$ ;
- de curto alcance, se  $T_c < T_0 < \infty$  independente de  $q$ , ou se  $T_0 = T_c$  para  $q > 4$ ;
- ou de longo alcance, se  $T_0 = T_c$  para  $q \leq 4$ .

Quando as correlações são de longo alcance, o sistema exibe um domínio percolante em  $t = 0$  desde que a transição crítica também corresponda a transição de percolação em duas dimensões. Por outro lado, quando as correlações iniciais são nulas ou de curto alcance, tais domínios podem ser formados muito rapidamente, como é o caso de  $q = 2$ , ou simplesmente não se formarem durante a evolução (pelo menos não nos tempos que considerados neste trabalho).

O grau de correlação entre os spins é medido por meio da função de correlação espacial

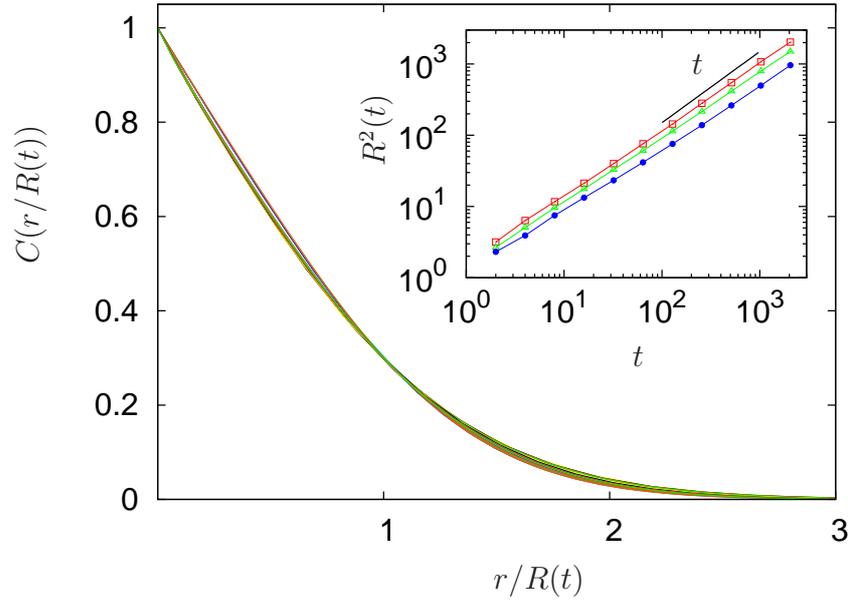
$$C(r, t) = \frac{q}{q-1} \left( \langle \delta_{s_i(t)s_j(t)} \rangle_{|i-j|=r} - \frac{1}{q} \right), \quad (4.5)$$

onde a média é feita sobre todos os pares de spins vizinhos separados por uma distância  $r$ . Longe da temperatura crítica, onde as correlações iniciais são de curto alcance, após o *quench* de  $T_0 > T_c$  para  $T_f < T_c$  estas correlações tornam-se irrelevantes em um tempo finito e o sistema perde a memória do estado inicial. Assim, todos os estados de equilíbrio acima da temperatura crítica tornam-se equivalentes.

#### 4.4.1 Correlação nula no estado inicial

Os estados descorrelacionados gerados na condição inicial a temperatura infinita apresentam um comportamento universal para a correlação, quando esta é reescalada pelo comprimento característico  $R(t)$ . É o que pode ser visto na figura 4.4, que mostra  $C(r, t)$  em função da distância reescalada,  $r/R(t)$ , após um *quench* de  $T_0 \rightarrow \infty$  (onde a correlação é nula independentemente de  $q$ ) para a temperatura  $T_f = T_c/2$  e  $q = 2, 3$  e  $8$ . O excelente colapso observado é mais um indício da validade da hipótese de *scaling* dinâmico para este sistema.

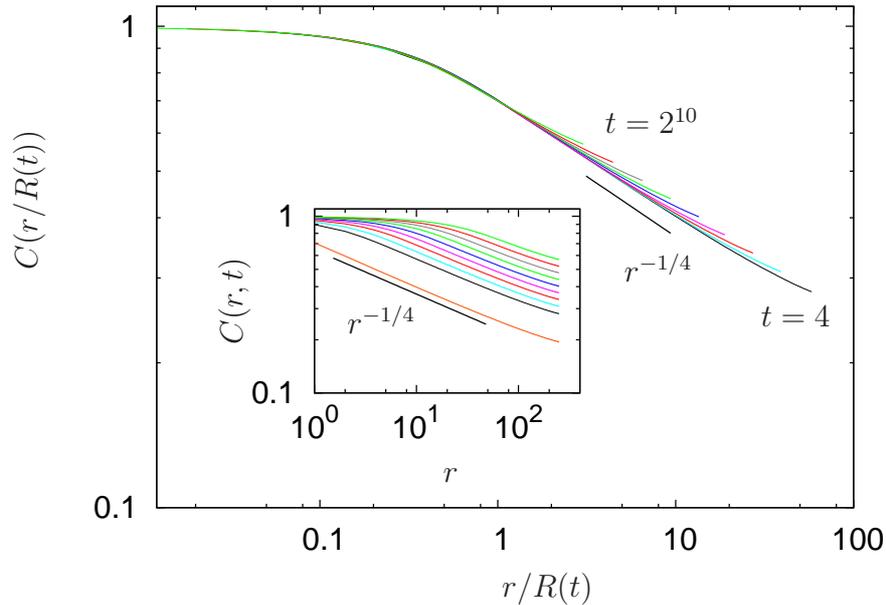
É importante ressaltar que as temperaturas finais após o *quench* são diferentes, dependendo do número de estados:  $T_f = T_c(q)/2$  (ver seção 2.2). Mesmo assim a correlação  $C(r, t; q)$  colapsa quando reescalada pelos respectivos comprimentos característicos  $R(t; q)$ ,



**Figura 4.4:** Função de correlação dos estados  $q = 2, 3$  e  $8$ , reescalada para vários tempos (de  $t = 2^4$  a  $2^{11}$ ) após um *quench* de  $T_0 \rightarrow \infty$  para  $T_f = T_c/2$ . Um bom colapso é obtido em todos os casos quando reescalamos a função pelo comprimento característico  $R(t)$ . No detalhe temos  $R^2(t)$  para  $q = 2, 3$  e  $8$  obtido da condição  $C(R, t) = 0.3$ . O comprimento característico, associado com o raio médio dos domínios, depende fracamente do número de estados  $q$  e da temperatura  $T$ .

indicando um comportamento universal para os valores de  $q$  estudados. Este resultado está de acordo com evidências anteriores [38, 53, 54], que sugerem que a forma reescalada da função de correlação espaço-tempo (e sua transformada de Fourier, o fator de estrutura), são insensíveis aos detalhes microscópicos do Hamiltoniano. Se esta aparente independência de  $q$  é apenas aproximada ou exata, e no último caso, se ela continua válida para valores muito grandes de  $q$ , ainda são questões em aberto [55, 56]. Assim como ocorre no modelo de Ising [57], o comportamento para pequenos  $r$  é linear para todos os  $q$ , de acordo com a lei de Porod [9, 55].

O detalhe da figura 4.4 mostra o comprimento de escala  $R(t)$  para diversas configurações de estado  $q$ , em função da distância  $r$ , obtido do valor da correlação quando a mesma vale 0.3, ou seja, para o valor fixo  $C(r, t) = 0.3$ . O comportamento linear  $R^2 \sim t$  é claramente visto para  $q = 2$ . Para  $q > 2$  existe um pequeno desvio do comportamento de  $t^{1/2}$  a tempos curtos, que desaparece para tempos longos como foi observado em [37, 38]. Os desvios nos tempos iniciais são de fato esperados, devido a presença de defeitos topológicos que ocorrem a baixas temperaturas. Na seção 4.5 será feita uma discussão mais detalhada a respeito de tais defeitos.

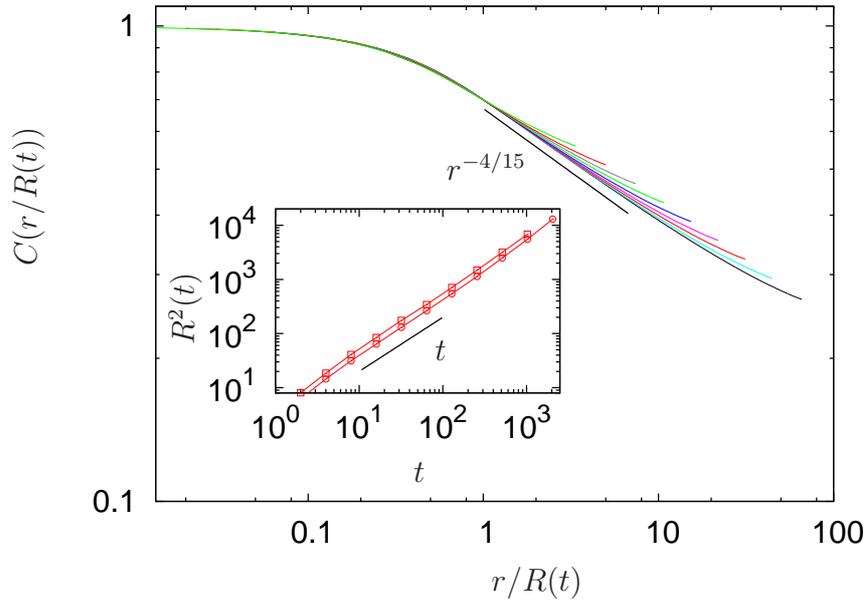


**Figura 4.5:** Correlação  $C(r, t)$  medida em diversos tempos ( $t = 2^2, \dots, 2^{10}$ ), reescalada em função do comprimento característico  $R(t)$ , para um sistema de  $q = 2$  estados submetido a um *quench* do estado de equilíbrio à temperatura crítica para a temperatura final  $T_f = T_c/2$ . O comprimento característico  $R(t)$  foi obtido a partir da  $C(R, t) = 0.7$ . Em  $t = 0$  a correlação decai como  $r^{-\eta}$  sendo  $\eta = 1/4$  para  $q = 2$  em duas dimensões. Para  $t > 0$  a memória do estado inicial altamente correlacionado é preservada, mantendo assim o comportamento de lei de potência. O detalhe mostra a mesma correlação  $C(r, t)$  sem estar reescalada. A correlação em  $t = 0$  é mostrada (primeira curva de baixo para cima) e os desvios da lei de potência já aparecem devido às fortes flutuações na magnetização em  $T_c$ .

#### 4.4.2 Correlação infinita no estado inicial

A divergência no comprimento de correlação é uma das características principais das transições de segunda ordem. Partindo do estado inicial de equilíbrio à temperatura crítica o sistema mantém a memória da correlação de longo alcance durante a evolução. Em  $T_c$  a função de correlação obedece a lei de potência,  $C(r, 0) \sim r^{2-d-\eta}$ , onde o expoente crítico  $\eta$  (dimensão anômala) depende do grau de degenerescência  $q$  do sistema. Em duas dimensões,  $\eta = 1/4$  para  $q = 2$  e  $\eta = 4/15$  para  $q = 3$  [23].

A figura 4.5 mostra o excelente colapso da função de correlação  $C(r, t)$  quando reescalada pelo comprimento característico  $R(t)$ , para um sistema de  $q = 2$  estados submetido a um *quench* do estado de equilíbrio à temperatura crítica para a temperatura final  $T_f = T_c/2$ . O comprimento característico foi obtido a partir do valor fixo da função de correlação,  $C(r, t) = 0.7$ . O desvio inicial da lei de potência ocorre para distâncias  $r \lesssim R(t)$ , resultado do crescimento dos domínios que implica numa diminuição mais lenta da correlação para pequenos  $r$ . Para grandes distâncias os desvios ocorrem devido a possibilidade dos estados iniciais serem magnetizados (em  $T_c$  a magnetização vai com  $L^{\beta/\nu}$ ). A medida que a distância aumenta e os spins se descorrelacionam, a correlação atinge um platô em  $m^2(t)$ , onde  $m$  é a magnetização de equilíbrio. Partindo então de um estado



**Figura 4.6:** Correlação  $C(r, t)$  medida em diversos tempos ( $t = 2^2, \dots, 2^{10}$ ), reescalada em função do comprimento característico  $R(t)$ , para um sistema de  $q = 3$  estados submetido a um *quench* do estado de equilíbrio à temperatura crítica para a temperatura final  $T_f = T_c/2$ . A correlação decai como  $r^{-\eta}$  sendo  $\eta = 4/15$  para  $q = 3$  em duas dimensões. O detalhe mostra a relação entre o comprimento característico  $R(t)$  e o tempo  $t$  compatível com a lei de Allen-Cahn,  $R^2(t) \simeq t$ , para  $q = 2$  (abaixo) e  $q = 3$  (acima) estados. O comprimento característico foi obtido para o valor da correlação  $C(R, t) = 0.7$ .

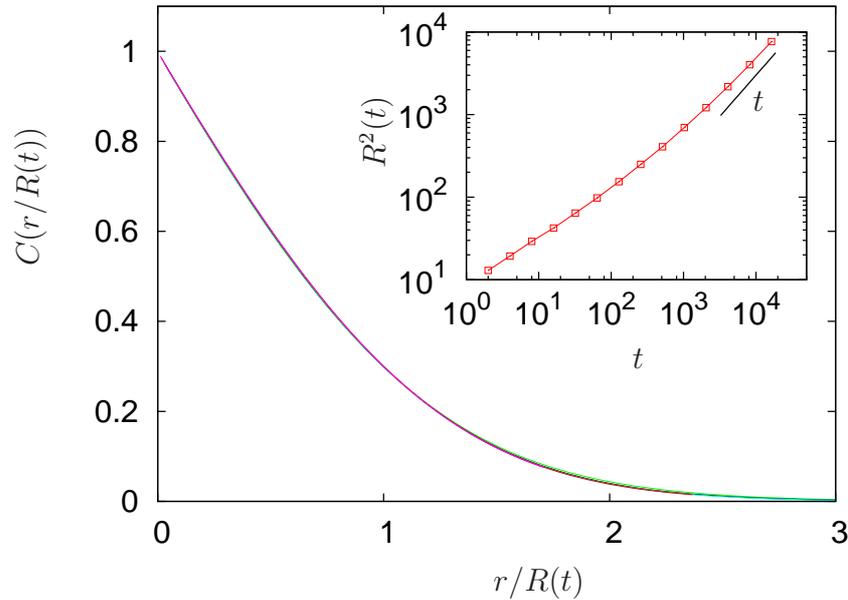
inicial de equilíbrio com magnetização não nula, durante a evolução a magnetização tende a aumentar, aumentando consequentemente o platô. Apesar de não ter sido considerada neste trabalho, a mesma abordagem pode ser feita considerando apenas estados iniciais de equilíbrio com magnetizações próximas de zero, como foi feito por Humayun e Bray [58] que introduziram um fator de correção para eliminar os efeitos das fronteiras, devido ao tamanho do sistema ser muito menor que o comprimento de correlação  $L \ll \xi$  em  $T_c$ .

Basicamente o mesmo comportamento da correlação  $C(r, t)$  é observado para um sistema com  $q = 3$  (figura 4.6) e  $q = 4$  estados, sendo  $\eta = 4/15$  e  $\eta = 1/2$  respectivamente. A mesma função de escala foi obtida para diferentes temperaturas finais (não mostrado), indicando que o *super-scaling* independe da temperatura.

### 4.4.3 Correlação finita no estado inicial

Diferentemente do que ocorre nas transições de segunda ordem, a correlação no ponto crítico de um sistema com transição de primeira ordem é finita (curto alcance). Em particular, neste ponto o comprimento de correlação  $\xi$  é exatamente conhecido para o modelo de Potts [51].

Se um sistema em equilíbrio é resfriado para uma temperatura abaixo do limite de estabilidade do estado paramagnético, o comprimento de correlação finito presente no



**Figura 4.7:** Função de correlação do modelo com  $q = 8$  estados, reescalada para vários tempos, após um *quench* de  $T_0 = T_c$  para  $T_f = T_c/2$ . Um bom colapso é observado para tempos longos (de  $t = 2^{10}$  a  $2^{14}$ ), quando o sistema se aproxima do regime de escala. A correlação finita presente no estado inicial desaparece após um transiente de tempo, e o sistema se comporta como se partisse de um estado de correlação nula. O detalhe mostra o comprimento característico  $R(t)$  se aproximando (para tempos longos) do comportamento previsto pela lei de Allen-Cahn,  $R^2(t) \sim t$ .

estado inicial ( $t = 0$ ) desaparece após um transiente de tempo e o regime de escala é atingido. Este comportamento pode ser observado na figura 4.7 para um sistema com  $q = 8$  estados, termalizado na temperatura crítica  $T_c$ . Neste caso, após um transiente de tempo, a função de escala torna-se indistinguível quando comparada à obtida do modelo com  $q = 8$  estados termalizado em  $T_0 \rightarrow \infty$  (figura 4.4). O colapso de  $C(r, t)$  não é tão bom para tempos curtos (não mostrado), uma vez que o sistema leva mais tempo para se aproximar do regime de escala no caso  $q = 8$  (devido aos efeitos do *pinning*), como pode ser visto no detalhe da figura 4.7.

## 4.5 Efeitos da temperatura na dinâmica de crescimento

Como foi visto na seção 1.2.1, após o sistema ser submetido a um *quench* da fase de alta temperatura (paramagnética) para a região abaixo da temperatura crítica (ferromagnética), defeitos topológicos surgem devido a competição entre os microestados acessíveis, resultando na formação de domínios. Diferentemente do que ocorre no caso com dupla degenerescência, quando o número de estados acessíveis é  $q \geq 3$  fatores como a temperatura final do *quench* e o tipo de transição afetam diretamente o regime de crescimento.

Uma característica fundamental em sistemas com mais de dois estados acessíveis,

sendo cada um deles termodinamicamente equivalentes, é o aparecimento de regiões (ou pontos) estáveis do ponto de vista cinético sempre que a temperatura final do *quench* for suficientemente baixa. Estas regiões, conhecidas como regiões de *pinning*, estão presentes em sistemas onde a relação entre a dimensionalidade  $d$  e o número de estados  $q$  é dada por  $q \geq d + 1$  [20,39]. Por outro lado, em uma transição de primeira ordem, o processo de crescimento é dominado por difusão seguido de nucleação quando a temperatura do *quench* for suficientemente próxima da temperatura crítica. Flutuações de temperatura em torno do ponto crítico geram configurações termodinamicamente metaestáveis, caracterizadas dentro de uma região conhecida como região espinodal.

A fim de evitar tais problemas, a temperatura final do *quench* foi definida como sendo  $T_f = T_c/2$  para todos os casos estudados. É importante notar que, como foi visto na seção 2.2, a temperatura crítica diminui a medida que o grau de degenerescência do sistema aumenta. No entanto, esperamos que a escolha da temperatura final do *quench* evite os problemas que ocorrem na dinâmica de baixas e altas temperaturas.

### 4.5.1 Regime de crescimento a baixas temperaturas

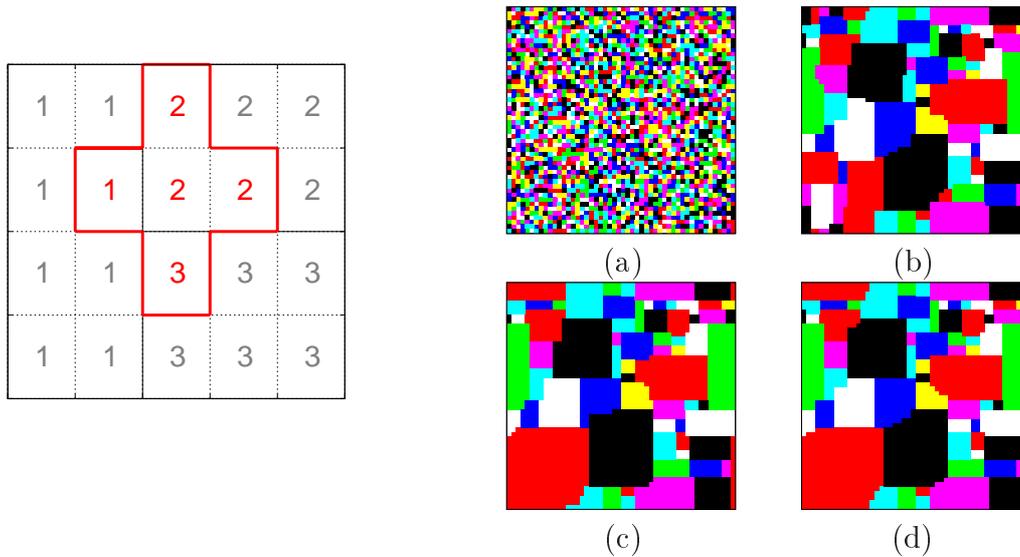
Uma consequência de se trabalhar no modelo de Potts na rede quadrada com interações entre primeiros vizinhos está associada à forte anisotropia ligada a energia da interface. O efeito da anisotropia é absorver a curvatura das paredes nos vértices, reduzindo a força responsável pelo movimento da fronteira, e conseqüentemente, o expoente de crescimento.

O trancamento dos vértices, também conhecido como *pinning*, se configura por regiões de fronteira entre três diferentes domínios. A figura 4.8 mostra como tal configuração se apresenta na rede quadrada. Quando a temperatura do sistema é suficientemente baixa, as interações entre os spins tornam-se mais relevantes que as flutuações térmicas. A forte interação local entre os spins de mesmo estado “congela” o ponto de tripla junção de domínios. A dinâmica do sistema torna-se muito lenta e o sistema passa a apresentar uma configuração metaestável<sup>3</sup>, relacionada com o estado vítreo [59,60].

Sendo a temperatura do sistema nula e a densidade de defeitos topológicos grande, a lei de crescimento deixa de apresentar um comportamento tipo lei de potência e o comprimento característico  $R(t)$  tende para um valor assintótico. Durante a evolução, a densidade de defeitos topológicos torna-se desprezível quando a degenerescência é  $q \leq 4$  e o sistema relaxa para a forma policristalina. No entanto, para  $q > 4$  a densidade de defeitos deixa de ser desprezível e o sistema relaxa para uma forma não-cristalina dando origem ao chamado estado vítreo [61]. Na presença de flutuações térmicas, o

---

<sup>3</sup>Esta configuração metaestável corresponde a uma metaestabilidade cinética, ou seja, um estado quase estático que não apresenta uma estrutura energeticamente favorável, e não a região de metaestabilidade termodinâmica que existe próximo à temperatura crítica  $T_c$  em sistemas cuja transição é de primeira ordem.



**Figura 4.8:** A figura a esquerda mostra um esquema de uma típica configuração de domínios (representados pelos números 1,2 e 3) que pode apresentar *pinning* na rede quadrada. A temperaturas suficientemente baixas, a região onde três fronteiras distintas coincidem tende a ficar dinamicamente trancada devido a forte interação local causada pelos vizinhos de mesmo estado. A direita temos a imagem de um sistema de tamanho  $L = 50 \times 50$ , com  $q = 8$  estados (cada um representado por uma cor), que evoluiu a partir da temperatura  $T_0 \rightarrow \infty$  após ser submetido a um *quench* para  $T_f = 0$ . Os tempos relacionados às configurações (a), (b), (c) e (d) são, respectivamente,  $t = 0, 10^2, 10^3, 10^4$  MCs. Note que em pouco tempo o sistema já atinge uma configuração estável que se mantém durante a evolução.

excesso de energia devido às fronteiras entre os muitos domínios desaparece após um transiente de tempo [62,63]. O expoente efetivo da lei de crescimento tende a 0.5 graças às flutuações térmicas serem capazes de “descongelar” o sistema permitindo a evolução dos domínios. Os efeitos do *pinning* também se minimizam quando as interações na rede vão além dos primeiros vizinhos, ou quando diferentes tipos de redes (como a triangular) são utilizadas [37,64].

## 4.6 A distribuição das áreas

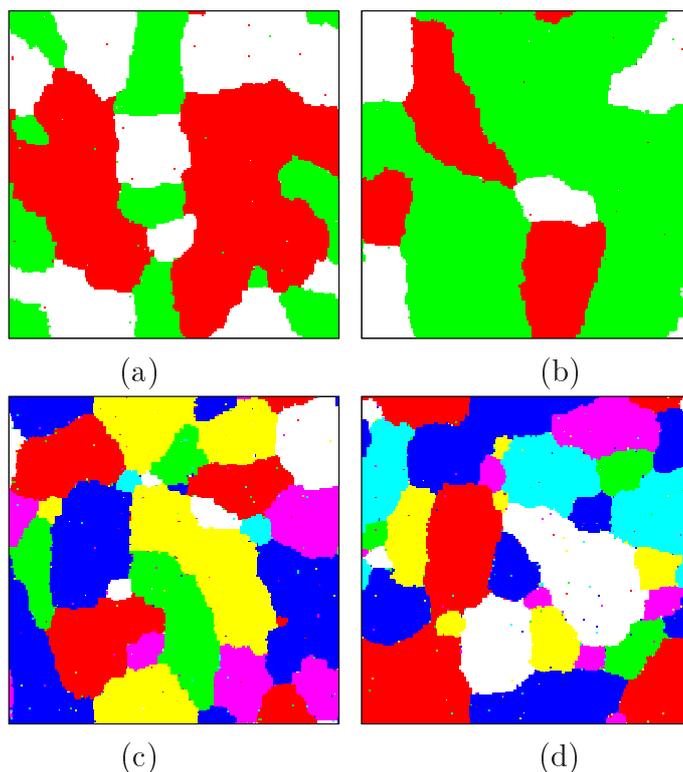
No capítulo anterior, onde analisamos a dinâmica de um sistemas de dois estados, vimos que a evolução das áreas dos domínios e *hulls* dependem exclusivamente da curvatura de suas interfaces. Isto faz com que o problema seja substancialmente mais simples, sendo possível determinar a forma analítica exata da distribuição das áreas dos *hulls* a partir da conhecida distribuição inicial. No entanto, quando o sistema apresenta múltiplos graus de degenerescência, como é o caso do modelo de Potts, o problema torna-se muito mais difícil. A forma analítica da distribuição de equilíbrio para  $q > 2$ , em qualquer temperatura, não é conhecida. Como o número de lados de um determinado *hull* de área  $A$  pode variar durante a evolução, não é possível determinar qual será a área de um *hull* num tempo  $t$  qualquer, como foi possível no caso  $q = 2$  (equação 3.7). Isto implica que no caso com

$q > 2$  estados, não temos informação sobre o comportamento da distribuição durante a evolução.

A figura 4.9 mostra como o sistema com diferentes graus de degenerescência,  $q = 3$  e  $q = 7$  estados, se apresenta após evoluir por  $2^{10}$  MCs, partindo das diferentes condições iniciais de equilíbrio,  $T_0 \rightarrow \infty$  e  $T_0 = T_c$ . Como ocorre no caso com  $q = 2$  estados, para  $q = 3$  partindo da configuração de equilíbrio em  $T_c$ , o sistema apresenta um domínio percolante desde  $t = 0$  que se mantém durante toda a evolução (figura (b)). De fato, para transições de segunda ordem partindo do estado inicial de correlação infinita, o sistema sempre apresenta um domínio percolante desde  $t = 0$ . Para transições de primeira ordem onde o estado de equilíbrio em  $T_c$  possui correlação finita, a presença do domínio percolante não é observada em nenhuma escala de tempo. O padrão de domínios se assemelha com o caso partindo de correlação nula,  $T_0 \rightarrow \infty$ , e pode ser observado nas figuras (c) e (d) para o modelo com  $q = 7$  estados. Outra diferença com relação ao modelo com dupla degenerescência ocorre quando  $q > 2$  e o estado de equilíbrio é a temperatura infinita. Como foi visto no capítulo 3, partindo de  $T_0 \rightarrow \infty$  o sistema com  $q = 2$  estados logo apresenta um domínio percolante pelo fato de estar muito próximo ao estado crítico de percolação aleatória. Entretanto, a medida que a degenerescência aumenta, mais o sistema se afasta deste limite e conseqüentemente tal domínio percolante deixa de existir (figuras (a) e (c)). A presença de um domínio percolante parece estar relacionada com o fato da distribuição se comportar como lei de potência. Nos casos onde nenhum domínio percola, a distribuição das áreas dos domínios e *hulls* tem um comportamento exponencial.

Outra característica observada em sistemas com múltiplos graus de degenerescência é, a menos dos domínios correspondentes a flutuações térmicas, a quase inexistência de gerações de domínios, como ocorre frequentemente no caso  $q = 2$ . As poucas vezes que são encontrados, são geralmente resultado do processo de coalescência entre domínios de mesmo estado, como pode ser visto na figura 4.10. Este fato explica o por que da distribuição das áreas dos domínios geométricos e *hulls* não apresentarem diferenças significativas.

A coalescência não interfere no crescimento dos domínios no caso  $q = 2$  porque está presente somente no início da evolução, onde os domínios são em geral pequenos. Pouco após do início da evolução o sistema já apresenta uma morfologia que é mantida por grandes intervalos de tempo, e o crescimento passa a ser governado somente pela curvatura das interfaces. Entretanto, para  $q > 2$  tanto a coalescência quanto a dissociação de domínios torna-se mais frequente, ocorrendo mesmo em tempos longos. Isto pode acarretar, devido ao maior tamanho dos domínios, grandes variações de área de um instante para o outro. Por outro lado, quanto maior for a degenerescência, menor será a chance de dois domínios coalescerem, uma vez que menor será a probabilidade de dois domínios



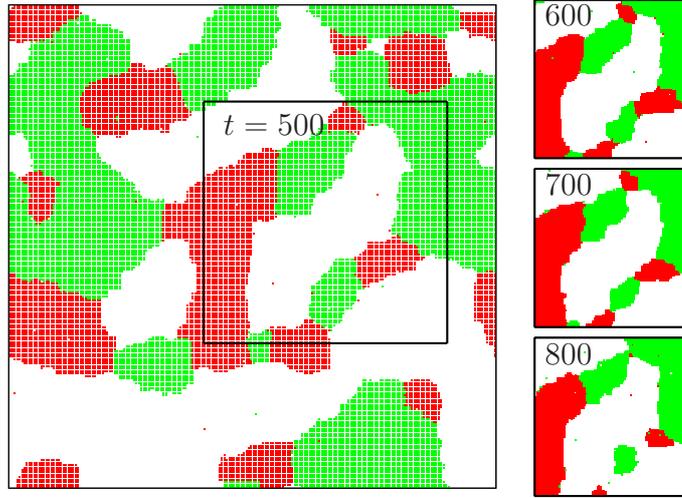
**Figura 4.9:** Configurações de um sistema com diferentes graus de degenerescência ( $q = 3$  para (a) e (b);  $q = 7$  para (c) e (d)), que evoluíram durante  $t = 2^{10}$  MCs, após um *quench* dos estados de equilíbrio em  $T_0 \rightarrow \infty$  ((a) e (c)) e  $T_0 = T_c$  ((b) e (d)) para  $T = T_c/2$ . As diferentes cores representam cada um dos estados acessíveis. As flutuações térmicas aparecem na forma de pontos por toda a estrutura. Diferentemente do que ocorre para  $q = 3$ , o padrão dos domínios no caso com  $q = 7$  estados, mesmo partindo das diferentes condições iniciais, mantém o mesmo tipo de morfologia.

de mesmo estado se encontrarem.

Por fim, fora raras exceções, os domínios de um sistema com múltiplos graus de degenerescência estão sempre cercados por dois ou mais domínios, o que, de acordo com a lei de von Neumann (equação 4.2), influencia diretamente sua evolução. Todos estes fatores tornam difícil a extrapolação do que se conhece a respeito da evolução das áreas dos domínios e *hulls* no caso  $q = 2$ , para o caso com múltipla degenerescência.

#### 4.6.1 Transição de segunda ordem e correlação nula

Sistemas com grau de degenerescência  $q \leq 4$  apresentam semelhanças que vão além da ordem da transição. A função de correlação reescalada do modelo parece ter a mesma forma universal e o comprimento característico cresce com o tempo na mesma potência,  $t^{1/2}$ . Entretanto, tais semelhanças não dão suporte a conclusões a respeito da distribuição das áreas dos domínios e *hulls* com base no que se conhece para o caso com dupla degenerescência. Diferentemente do que ocorre quando  $q = 2$ , onde um domínio percolante se forma rapidamente após o *quench* da temperatura infinita (capítulo 3), a presença de



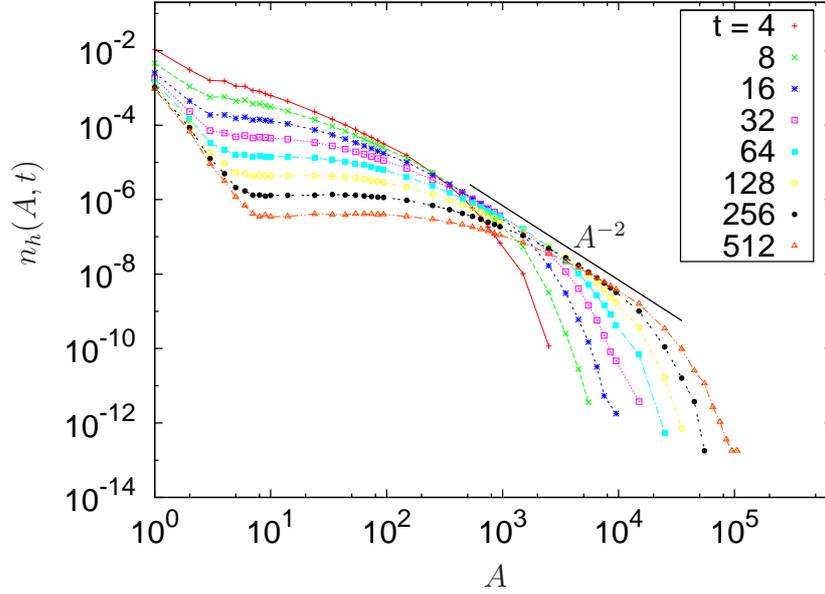
**Figura 4.10:** Evolução de um sistema com  $q = 3$  estados após um *quench* de  $T_0 \rightarrow \infty$  para  $T_f = T_c/2$ . As diferentes cores correspondem aos diferentes estados acessíveis. O detalhe acompanha a evolução de uma parte do sistema. É possível ver a coalescência entre diferentes domínios de mesmo estado (branco) e consequentemente o aparecimento de uma geração de domínio (verde) completamente cercado em  $t = 800$ .

tal domínio não é observada quando  $q > 2$  uma vez que, com o aumento do número de estados, o sistema se afasta cada vez mais do limite crítico de percolação aleatória.

Após o *quench* o sistema mantém a memória da condição inicial, configuração correspondente à percolação aleatória com probabilidade  $p = 1/q$ . Por não se aproximar do ponto de percolação crítica, a distribuição não se torna crítica e, consequentemente, não desenvolve a forma da lei de potência, como pode ser visto na figura 4.11 para o caso  $q = 3$  e  $T_0 \rightarrow \infty$ . Existe, no entanto, um envelope  $A^{-2}$  que é uma consequência direta do *scaling* dinâmico, presente também para outros valores de  $q$ . De acordo com a hipótese de *scaling*, a distribuição das áreas dos *hulls* satisfaz a relação  $n_h(A, t) = t^{-2}n_h(A/t)$ . Como consequência, a linha formada pelo envelope tem uma declividade de -2. Para compreender melhor este fato, consideramos duas curvas quaisquer (correspondentes aos tempos  $t_1^*$  e  $t_2^*$ ) e definimos  $A^*$  como a localização do ponto que é tangente ao envelope. Usando este valor para reescalar a distribuição, obtemos  $R^4(t_1^*)n_1^* = R^4(t_2^*)n_2^*$ , onde  $n_i^*$  é  $n(A_i^*/R^2(t_i^*))$ . Temos então,  $n_2^*/n_1^* = (A_1^*/A_2^*)^2$ . Tomando o logaritmo em ambos os lados obtemos a inclinação -2. O ponto tangente nos fornece então uma forma alternativa de obter o comprimento característico destes sistemas.

#### 4.6.2 Transição de segunda ordem e correlação infinita

Quando submetido ao *quench* partindo do estado inicial altamente correlacionado,  $T_0 = T_c$ , um sistema que apresenta uma configuração de estados correspondente a uma transição de segunda ordem no modelo de Potts ( $2 \leq q \leq 4$ ), gera uma distribuição de



**Figura 4.11:** Distribuição das áreas dos *hulls* em diversos tempos, para o modelo com  $q = 3$  estados, após o *quench* do estado de equilíbrio a temperatura infinita,  $T_0 \rightarrow \infty$ , para a temperatura  $T_f = T_c/2$ . As curvas formam um envelope com inclinação -2 devido ao fato da distribuição obedecer a lei de escala.

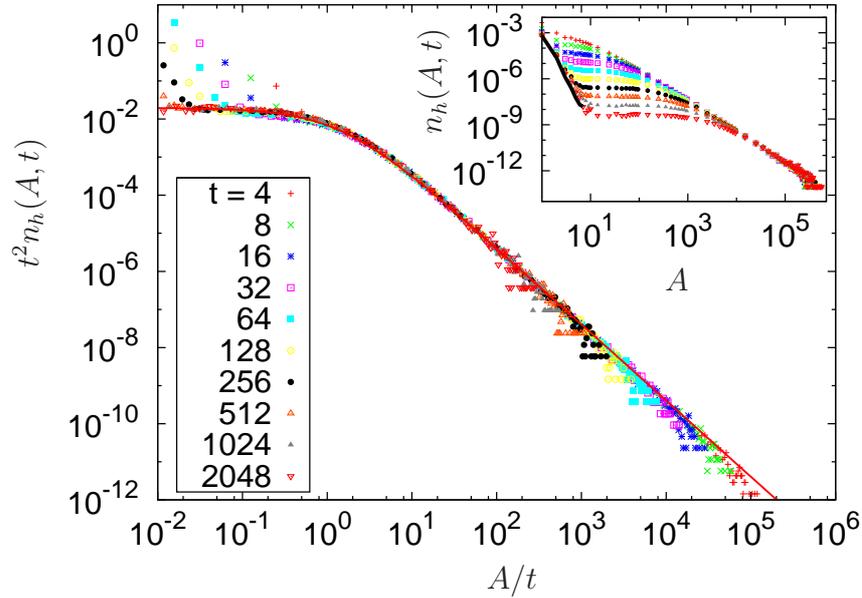
áreas de domínios e *hulls* que acompanha a forma da distribuição inicial, ou seja, uma lei de potência. A figura 4.12 mostra a distribuição das áreas dos *hulls* para um sistema com  $q = 3$  estados. O comportamento geral é semelhante ao caso  $q = 2$ , onde o colapso das curvas em diferentes tempos demonstra a existência de uma escala de comprimento única que segue a lei de Allen-Cahn,  $R(t) \sim t^{1/2}$ . A distribuição das áreas dos domínios geométricos (percolados ou não) é basicamente idêntica a dos *hulls* (figura 4.13) uma vez que a presença de gerações de domínios é quase nula, indicação forte de que os parâmetros que aparecem em ambas as distribuições pouco se diferem. O mesmo ocorre para o caso com  $q = 4$  estados.

A única forma analítica conhecida para a distribuição das áreas dos *hulls* é para o caso  $q = 2$  (capítulo 3). Considerando a semelhança entre as distribuições, assumimos que o número de lados de cada domínio na lei de von Neumann pode ser substituído por um valor médio constante,  $n \rightarrow \langle n \rangle$ . Usando uma forma análoga da equação 4.3, definimos a forma geral da distribuição das áreas dos *hulls* para  $q \leq 4$ , dentro desta aproximação de campo médio, como sendo

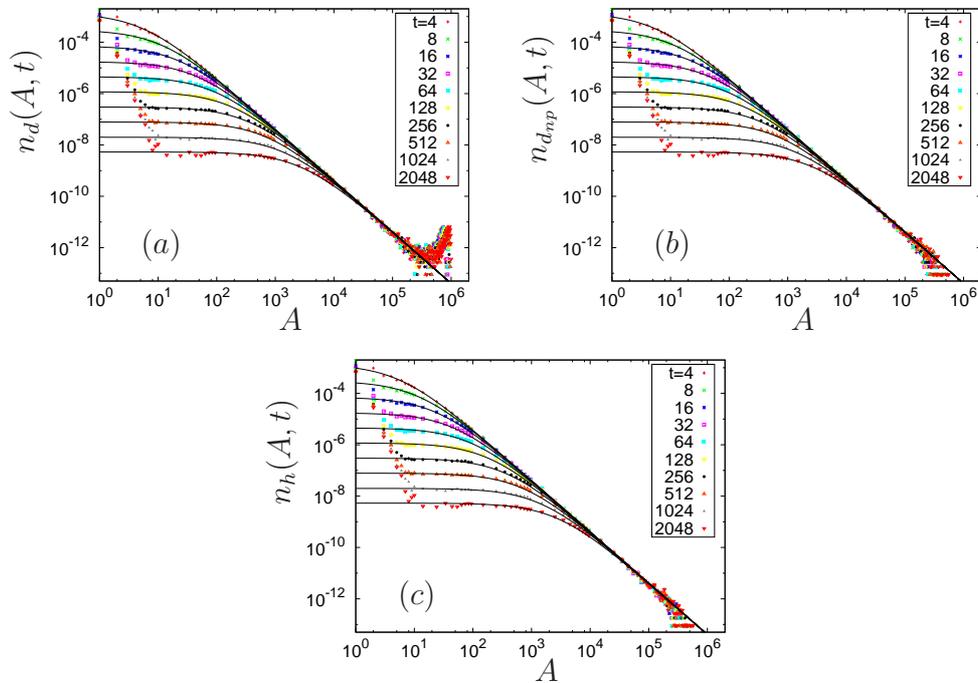
$$n_h(A, t) = \frac{(q-1)c_h^{(q)}}{(A + \lambda_h^{(q)}t)^2}. \quad (4.6)$$

Para o caso  $q = 3$  mostrado a figura 4.12 o parâmetro de ajuste  $\lambda_h^{(3)} \approx 1.4$ . Os desvios observados para pequenos valores de  $A/t$  correspondem aos efeitos das flutuações térmicas.

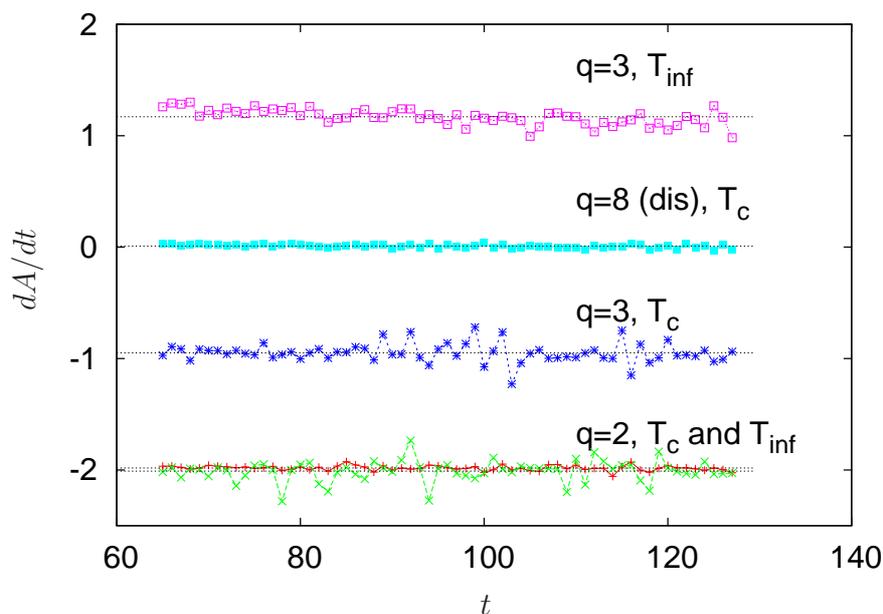
A validade da aproximação de campo médio para o número  $n$  de lados na equação



**Figura 4.12:** Distribuição das áreas dos *hulls*, colapsada em diversos tempos, para o modelo de Potts com  $q = 3$  estados, após ser submetido a um *quench* do estado de equilíbrio a temperatura crítica,  $T_0 = T_c$ , para a temperatura  $T_f = T_c/2$ . A linha cheia (vermelho) corresponde a forma da equação (4.6) onde o parâmetro de ajuste foi  $\lambda_h^{(3)} \approx 1.4$ . Os pontos em  $A/t \ll 1$  que se desviam da função de escala correspondem aos domínios formados pelas flutuações térmicas, representados pela linha cheia no detalhe da figura.



**Figura 4.13:** Distribuição não colapsada das áreas dos domínios geométricos e *hulls* referente a condição apresentada na figura (4.12). Mais precisamente temos a distribuição para os domínios geométricos (incluindo aqueles que percolaram) (a), os domínios geométricos não-percolados (b), e os *hulls* (c). As linhas cheias correspondem a equação (4.6) com  $\lambda_h^{(3)} \simeq \lambda_d^{(3)} \approx 1.4$  e  $c_h^{(2)} = 1/(8\pi\sqrt{3})$ .

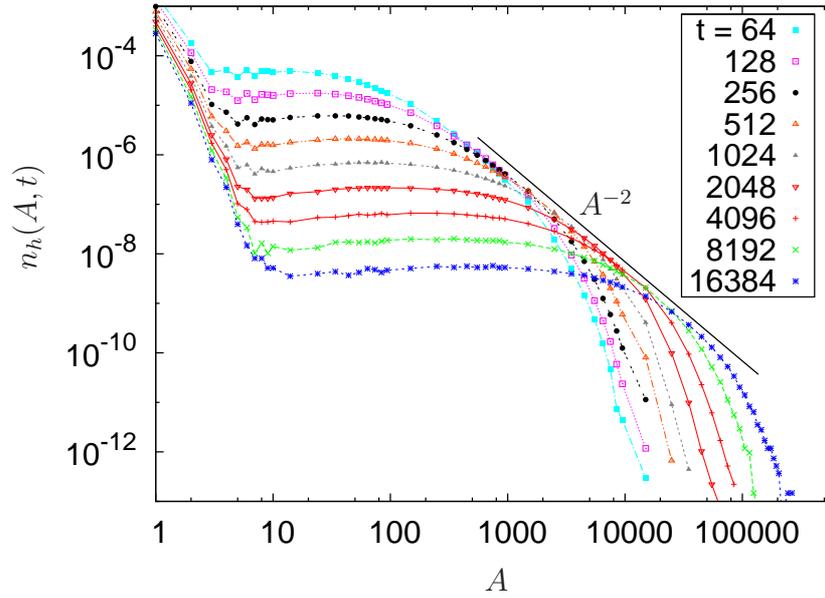


**Figura 4.14:** Taxa de variação média das áreas dos *hulls* durante a evolução do sistema. Nos casos onde a distribuição tem a forma de lei de potência ( $q = 2$  e  $q = 3; T_0 = T_c$ ) o  $\lambda_{eff}$  é negativo. Nos casos onde a distribuição tem a forma exponencial ( $q = 3; T_0 \rightarrow \infty$ ) a variação média das áreas é positiva. Um caso interessante ocorre com o modelo com  $q = 8$  estados na presença de desordem ferromagnética fraca, onde a distribuição das áreas dos *hulls* tem a forma de uma lei de potência (capítulo 5), que parece ser um caso limite com  $\lambda_{eff} \simeq 0$ .

de von Neumann (equação 4.2) pode ser testada diretamente medindo a variação da área de cada domínio durante a evolução do sistema. A figura 4.14 mostra o resultados para diversos casos. Embora a lei de von Neumann preveja que cada domínio possua uma taxa de variação da área diferente, podendo ser tanto positiva ( $n > 6$ ) quanto negativa ( $n < 6$ ) dependendo do seu número de lados, o valor médio de  $\lambda$  ainda é constante, como ocorre com o caso  $q = 2$ . Da mesma forma, apenas as configurações que apresentam  $\lambda_{eff} \leq 0$  apresentam uma distribuição tipo lei de potência. Curiosamente, o caso  $q = 8$  com presença de desordem ferromagnética, que será discutido no capítulo 5, parece estar em uma condição limite com  $\lambda_{eff} \simeq 0$ . Portanto, parece haver uma diferença entre os casos que apresentam uma função distribuição de probabilidade como lei de potência e aqueles que não. As implicações mais detalhadas do por que de tal relação, envolvem provavelmente o conhecimento da distribuição dos perímetros e do número de lados dos domínios.

### 4.6.3 Transição de primeira ordem e correlação nula ou finita

Quando o sistema apresenta um grau de degenerescência  $q > 4$  o estado inicial apresenta uma correlação sempre finita (ou nula) independentemente da temperatura. O estado inicial a temperatura infinita mantém-se cada vez mais distante do estado crítico

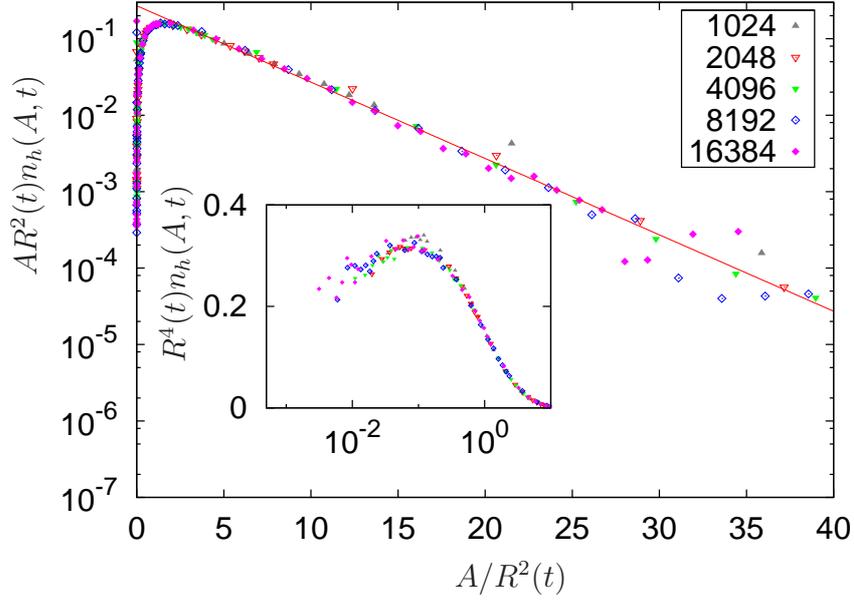


**Figura 4.15:** Distribuição das áreas dos *hulls* para o modelo de Potts com  $q = 8$  estados, após ser subitamente retirado do estado de equilíbrio a temperatura crítica e levado para a temperatura  $T_0 = T_c/2$ . Como todo sistema que apresenta uma transição de primeira ordem tem correlação finita a qualquer temperatura, a mesma forma da distribuição é observada se considerarmos o estado de equilíbrio a qualquer temperatura  $T_0 > T_c$ . A mesma forma da distribuição foi observada no caso  $q = 3$  com  $T_0 \rightarrow \infty$ . O envelope com inclinação  $-2$  é resultado da lei de escala.

de percolação aleatória quanto maior for o número de estados  $q$ . Na temperatura crítica as correlações de um sistema que apresenta uma transição de primeira ordem é finita (de curto alcance), o sistema não apresenta um domínio percolante no estado inicial e a própria distribuição inicial não tem a forma de uma lei de potência.

Após o *quench* da temperatura o sistema perde a memória do estado inicial e a distribuição apresenta uma forma universal mais complexa. A figura 4.15 mostra o comportamento da distribuição das áreas dos *hulls* para o modelo com  $q = 8$  estados partindo de  $T_0 = T_c$ . Novamente os efeitos das flutuações térmicas à temperatura  $T_f = T_c/2$  tornam-se significativos para pequenas áreas. Além dos efeitos das flutuações térmicas para pequenas áreas, a distribuição sofre um sutil acréscimo com o aumento da área  $A$ , formando um platô proporcional ao tempo. Em seguida, a distribuição cai abruptamente na forma de uma exponencial. Como ocorre no caso  $q = 3$  (figura 4.11), a distribuição das áreas no tempo gera um envelope na forma de lei de potência, mais uma vez como consequência direta do *scaling* dinâmico. A forma analítica precisa da distribuição não é conhecida e vem sendo um assunto de discussão há diversas décadas, não apenas para o modelo de Potts, mas também para outros modelos usados no estudo do crescimento de domínios [65–68].

A cauda da distribuição guarda memória da condição inicial, sendo exponencial para



**Figura 4.16:** Colapso da distribuição apresentada na figura 4.15. Reescalando a distribuição pelo comprimento característico, um bom colapso é obtido para valores de área  $A > R^2(t)$ , sendo  $n_h(A, t) = R^4(t)f(A/R^2)$ . Os dados para os *hulls* com área  $A < 10$ , correspondentes as flutuações térmicas, foram retirados do detalhe. A figura principal mostra a cauda exponencial  $f(x) \sim x^{-1} \exp(-ax)$ , onde o parâmetro de ajuste é  $a \approx 0.23$ . Apesar de não estarem sendo mostrados, a distribuição colapsada de um sistema com  $q > 4$  estados partindo de  $T_0 \rightarrow \infty$  mantém a forma da função universal  $f(x)$ . O detalhe mostra a região de pequenas áreas, onde o colapso não é tão bom, provavelmente devido a rugosidade das interfaces.

$q > 4$ . Este fato pode ser melhor observado na figura 4.16 onde a distribuição foi reescalada por  $R^2(t)$  e apresentada na forma semi-logarítmica. A função de *scaling* universal é mostrada no detalhe. Para  $A > R^2(t)$  ela é a mesma tanto para  $T_0 = T_c$  quanto para  $T_0 \rightarrow \infty$  (não mostrado), tendo a forma

$$f(x) \sim \frac{1}{x} e^{-ax} \quad (4.7)$$

em que o parâmetro de ajuste é  $a \simeq 0.23$  para ambos os casos. O decaimento exponencial é uma consequência direta do comprimento de correlação ser finito independente da condição inicial. O fato do colapso não ser tão bom para pequenas áreas pode ser consequência das flutuações térmicas presentes nas paredes dos domínios.

## Capítulo 5

# Efeitos da desordem na distribuição das áreas

No capítulo anterior analisamos o processo de crescimento das áreas dos *hulls* através do estudo das propriedades geométricas de não-equilíbrio do modelo de Potts puro com parâmetro de ordem não conservado. Neste capítulo apresentaremos os resultados para o caso em que o acoplamento ferromagnético entre os spins varia de acordo com uma distribuição de probabilidades específica.

A presença de desordem é quase sempre inevitável nos sistemas e sua influência na natureza do comportamento crítico pode ser dramática. Em particular, alguns tipos de transição são geradas pela desordem. Um exemplo importante são os sistemas chamados de vidros de spin. Trata-se de um modelo magnético que apresenta uma transição com as características de segunda ordem, mas onde os spins da fase de baixa temperatura não assumem a configuração espacialmente ordenada, apenas se “congelam” numa estrutura aleatória. A presença de desordem gera frustração e o sistema encontra maior dificuldade de alcançar o estado ideal de equilíbrio devido aos muitos mínimos locais de energia livre. Estes sistemas exibem propriedades dinâmicas e termodinâmicas não-triviais, e correspondem a um campo de pesquisa bastante vasto em matéria condensada.

Um sistema onde o acoplamento ferromagnético varia está sob o efeito de desordem, mais especificamente de uma desordem fraca, já que mesmo diferente o acoplamento ainda mantém a ordem ferromagnética ( $J > 0$ ) na fase de baixa temperatura. A desordem pode ser interpretada como a presença de impurezas (ou defeitos) em uma solução (ou substrato), ou mesmo como flutuações locais de temperatura (ou campo) dentro do sistema. Em física estatística, consideramos dois tipos de desordem:

- *Quenched disorder* (ou desordem congelada), que é aquela onde as constantes de acoplamento são aleatórias dentro de uma distribuição de probabilidades, mas que não evoluem com o tempo. Em um filme de hélio-4 os átomos interagem com

o substrato, e esta interação altera o ponto de transição do estado superfluido, baixando a temperatura de transição de Kosterlitz-Thouless, devido ao potencial aleatório fixo do substrato que não muda no tempo. O potencial do substrato causa o efeito deste tipo de desordem.

- *Annealed disorder* (ou desordem recozida), se difere pelo fato dos acoplamentos mudarem durante a evolução do sistema. Em um filme de hélio-3, a interação com o substrato diminui a energia para criar vórtex que flutuam no espaço devido a mobilidade do isótopo. Estas flutuações correspondem às mudanças do acoplamento, dando origem a este tipo de desordem.

Neste trabalho consideramos a desordem do tipo *quenched* e as referências no texto serão feitas utilizando apenas o termo “desordem”.

Uma importante propriedade relacionada com o crescimento de domínios em sistemas com desordem fraca é a chamada hipótese de super-universalidade. A hipótese surgiu a partir das observações de D. Fisher e D. Huse [69] que afirmaram que todas as funções de escala são independentes da desordem uma vez levada em conta a correta escala do comprimento característico. Assim, uma vez que a hipótese de escala seja usada para descrever a dinâmica de um sistema, onde o tempo e o tamanho característico dos domínios são dados em relação a  $R(t)$ , a presença de desordem não afeta as funções de escala, sendo estas idênticas ao caso do modelo puro. A ideia é que a escala de comprimento onde os efeitos da desordem são importantes é muito menor que a escala de tamanho do domínio e, sendo assim, a dinâmica das grandes estruturas continua sendo governada pelas curvaturas das interfaces. A hipótese de super-universalidade foi testada e mostrou-se válida para uma série de sistemas [30, 70–76].

## 5.1 Relação entre a desordem e a transição de fase no modelo de Potts

A presença de desordem afeta as transições de fase de diversas formas, como por exemplo, alterando o valor de expoentes críticos em sistemas puros cujo expoente  $\alpha$  do calor específico é positivo [77], ou mesmo eliminando completamente a transição de fase em sistemas de baixa dimensionalidade [78, 79]. Diversos estudos [80–87] comprovaram que sob o efeito de desordem fraca, o modelo de Potts bidimensional apresenta transição de fase contínua (segunda ordem) independentemente do grau de degenerescência.

A desordem em um sistema se caracteriza por diferentes tipos de acoplamento entre os spins. Dado o Hamiltoniano de Potts (equação 2.3), a desordem é instituída escolhendo aleatoriamente a intensidade de cada acoplamento  $J_{ij}$  por meio da distribuição de

probabilidades

$$P(J_{ij}) = p\delta(J_{ij} - J_1) + (1 - p)\delta(J_{ij} - J_2). \quad (5.1)$$

No caso da distribuição bimodal, os valores assumidos por  $J_{ij}$  podem ser  $J_1$  ou  $J_2$ , correspondentes às ligações forte e fraca respectivamente ( $J_1 > J_2 > 0$ ). Para um sistema com distribuição homogênea,  $p = 0.5$ , a temperatura da transição é exatamente conhecida [88], dada pela solução da relação

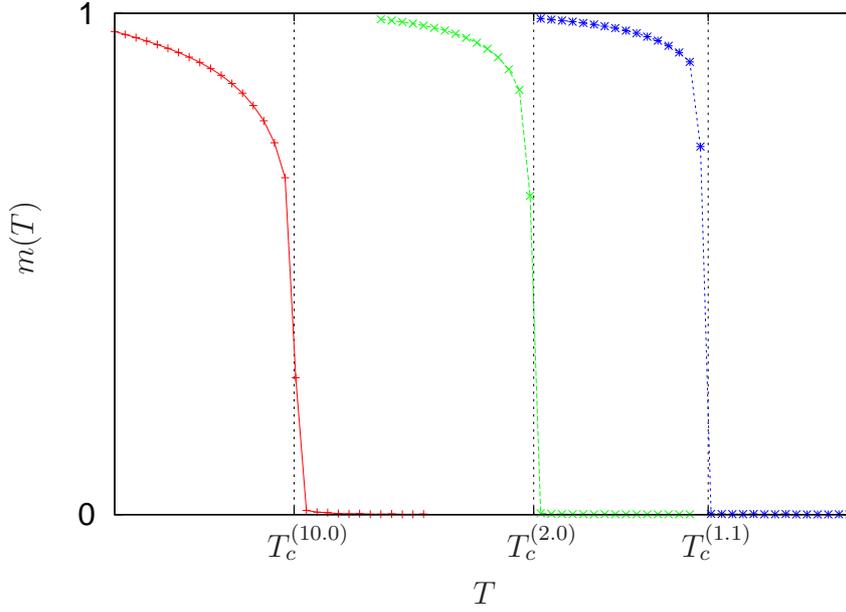
$$(e^{\beta_c J_1} - 1)(e^{\beta_c J_2} - 1) = q. \quad (5.2)$$

A figura 5.1 mostra a dependência entre o grau de desordem  $\epsilon = J_1/J_2$  e o ponto de transição do modelo de Potts com  $q = 8$  estados, considerando o acoplamento forte  $J_1 = 1$  e o fraco  $J_2 = 0.1, 0.5$  e  $0.9$ . A medida que o grau de desordem aumenta a temperatura de transição diminui, e o comportamento do parâmetro de ordem se aproxima mais do esperado em uma transição contínua. O efeito da diminuição da temperatura crítica associada à presença de desordem implica na diminuição da mobilidade das interfaces, inibindo eventualmente o crescimento dos domínios após o *quench* [64, 89, 90], diminuindo assim o expoente associado ao comprimento característico. Apesar da competição entre o processo de crescimento regido pela curvatura e o *pinning* resultante da desordem, o crescimento de domínios em sistemas magnéticos submetidos a uma desordem aleatória ainda satisfaz a hipótese de escala.

A lei de crescimento para o caso particular onde o sistema submetido a desordem ferromagnética tem dupla degenerescência ainda é motivo de discussão [91–94]. O efeito do “envelhecimento” (*aging*) dinâmico do sistema, associado ao crescimento do comprimento de correlação, se retrata em dois regimes: o primeiro, logo no início da evolução, apresenta um crescimento que escala como lei de potência (regime pré-assintótico); em seguida, o crescimento passa a escalar de forma logarítmica, consistente com o crescimento algébrico das barreiras de energia livre [95]. Se o crescimento logarítmico assintótico também se aplica no caso  $q > 2$  ainda é uma incógnita. O fato é que, independentemente de qual seja a lei de crescimento, o *scaling* dinâmico é observado tanto na correlação espaço-temporal quanto na distribuição das áreas para qualquer grau de degenerescência ( $q \geq 2$ ) do modelo.

## 5.2 Correlação no sistema desordenado

Da mesma forma que foi discutido no capítulo 4, a lei de escala do modelo com desordem ferromagnética pode ser determinada pela medida direta da função de correlação



**Figura 5.1:** Relação de dependência do ponto de transição com o grau de desordem,  $\epsilon = J_1/J_2$ , no modelo de Potts com  $q = 8$  estados. Nos três casos consideramos  $J_1 = 1$  e variamos o acoplamento fraco fazendo  $J_2 = 0.1, 0.5$  e  $0.9$ . As temperaturas de transição  $T_c^{(\epsilon)}$  correspondem respectivamente a  $T_c^{(10.0)} \simeq 0.63968$ ,  $T_c^{(2.0)} \simeq 1.08674$  e  $T_c^{(1.1)} \simeq 1.41439$ . Para o modelo puro ( $J_1 = J_2 = 1$ ) a temperatura crítica (equação 2.4) é  $T_c^{(1.0)} \simeq 1.48981$ .

espacial  $C(r, t, \epsilon)$ , dada pela equação 4.5. A correlação pode ser escrita na forma reescalada

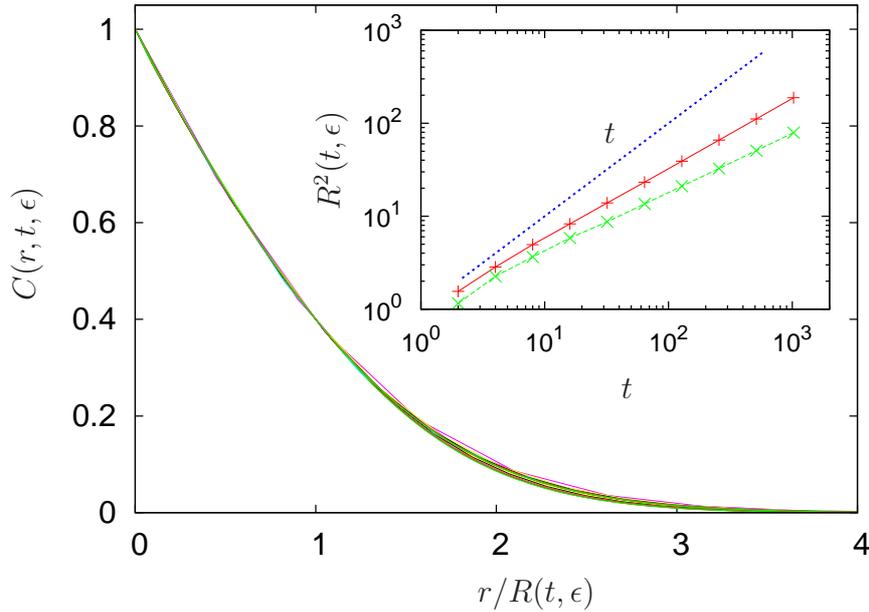
$$C(r, t, \epsilon) \sim m^2(T, \epsilon) f\left(\frac{r}{R(t, \epsilon)}\right) \quad (5.3)$$

sendo  $m^2(T, \epsilon)$  o valor de equilíbrio da magnetização.

A figura 5.2 mostra o comportamento da correlação reescalada, para um sistema com desordem fraca submetido a um *quench* do estado inicial a temperatura infinita para a temperatura  $T_f = T_c^{(2.0)}/2$ . Observa-se que a função mantém a mesma forma universal para os casos com  $q = 3$  e  $q = 8$  estados, coerente com o que foi visto no modelo puro (figura 4.4). A dinâmica de *scaling* é visivelmente mais lenta no caso com desordem (no intervalo de tempo que estudamos). A presença da desordem no sistema não afeta a função de escala para o caso  $T_0 \rightarrow \infty$ , garantindo neste caso a validade da hipótese de super-universalidade.

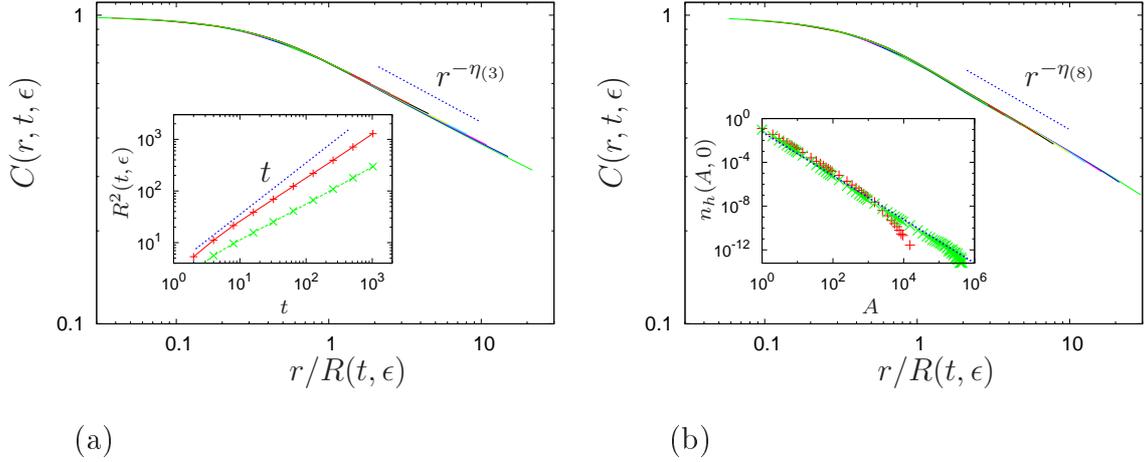
Um sistema puro partindo do estado inicial de equilíbrio a temperatura crítica apresenta diferentes comportamentos para a correlação (seção 4.4) de acordo com o tipo de transição. A divergência do comprimento de correlação  $\xi$  na temperatura crítica de um sistema que sofre uma transição contínua faz com que a forma da correlação neste ponto seja do tipo lei de potência,

$$C(r, t) \sim \frac{1}{r^{d-2-\eta}}. \quad (5.4)$$



**Figura 5.2:** Função de correlação reescalada sobre vários tempos ( $t = 2^8, \dots, 2^{10}$ ) para o modelo de Potts com  $q = 3$  e  $q = 8$  estados sujeito a desordem ferromagnética fraca. Os sistemas foram submetidos a um *quench* do estado inicial de equilíbrio a temperatura infinita,  $T_0 \rightarrow \infty$ , para o estado final a temperatura  $T_f = T_c^{2.0}/2$ . Para o grau de desordem escolhido ( $\epsilon = 2.0$ ) as temperaturas críticas dos estados  $q = 3$  e  $q = 8$  correspondem respectivamente a  $T_c^{2.0} \simeq 1.443$  e  $T_c^{2.0} \simeq 1.087$ . O detalhe mostra  $R^2(t, \epsilon)$  para  $q = 3$  (vermelho) e  $q = 8$  (verde) obtido da condição  $C(r, t, \epsilon) = 0.4$ . Como no caso do modelo puro (figura 4.4) o comprimento característico apresenta uma dependência com o número de estados  $q$ . Entretanto, apesar de garantir a hipótese de super-universalidade, o expoente de crescimento é menor que no caso puro com parâmetro de ordem não conservado ( $\alpha = 1/2$ ), não obedecendo a lei de Allen-Cahn.

É fato que a presença de desordem no modelo de Potts muda o tipo de transição de fase, passando de primeira para segunda ordem, para todo  $q > 4$ . Como consequência, para qualquer grau de degenerescência o comprimento de correlação diverge na temperatura crítica  $T_c^{(\epsilon)}$ . A figura 5.3 mostra o comportamento da correlação reescalada em função do comprimento característico  $R(t, \epsilon)$  para o modelo com diferentes degenerescências e grau de desordem  $\epsilon = 2.0$ . Nos dois casos apresentados, o sistema foi submetido a um *quench* do estado inicial de equilíbrio em  $T_0 = T_c^{(\epsilon)}$  para a temperatura final  $T_f = T_c^{(\epsilon)}/2$ . A figura (a) mostra o comportamento da função para o modelo com  $q = 3$  estados. Da mesma forma que acontece no caso do sistema puro, a correlação do modelo com desordem decai como lei de potência, e o expoente crítico  $\eta_{(3)} \simeq 0.27$  obtido por meio do ajuste, é muito próximo do valor exato conhecido para o caso puro,  $\eta = 4/15$ . O comprimento característico não obedece a lei de Allen-Cahn, resultado do *pinning* produzido pela desordem, como pode ser observado no detalhe da figura (vermelho). A figura (b) apresenta o comportamento da correlação para o modelo com  $q = 8$  estados. Devido a mudança na ordem de transição a correlação passa a ter a forma da lei de potência dada pela equação 5.4, forma que difere completamente do caso puro onde a correlação na temperatura crítica é finita (figura 4.7).



**Figura 5.3:** Correlação reescalada (em escala logarítmica) em função do comprimento característico  $R(t, \epsilon)$ , para vários tempos ( $t = 2, \dots, 2^{10}$ ), para o modelo de Potts sujeito a desordem ferromagnética fraca. A figura (a) corresponde ao modelo com  $q = 3$  estados submetido a um *quench* do estado de equilíbrio a temperatura crítica para a temperatura final  $T_f = T_c^{(\epsilon)}/2$ . Da mesma forma que no caso puro (figura 4.6), a correlação decai como lei de potência com o expoente  $\eta_{(3)}$  compatível com valor exato do modelo sem desordem ( $\eta = 4/15$ ). Entretanto o comprimento característico não obedece a lei de Allen-Cahn, como pode ser visto no detalhe (vermelho). A figura (b) corresponde ao modelo com  $q = 8$  estados submetido ao mesmo *quench*. Diferentemente do que ocorre no caso puro, a correlação decai como lei de potência (equação 5.4). O detalhe da figura mostra a diferença da distribuição inicial dos *hulls* para o caso puro e com desordem. Observa-se claramente o desvio da lei de potência no caso puro (vermelho). No caso com desordem a distribuição inicial mantém a forma de lei de potência observada no caso do modelo puro para  $q \leq 4$ . O detalhe da figura (a) mostra também o comprimento característico para o caso  $q = 8$  (verde). Em todos os casos observa-se a dependência de  $R$  em relação ao número de estados. A lei de crescimento não corresponde, em nenhum dos casos, a lei de Allen-Cahn.

Esta mudança na forma da função de correlação implica numa falha da hipótese de superuniversalidade. O expoente crítico obtido por meio do ajuste foi  $\eta_{(8)} \simeq 0.28$ . Os resultados obtidos para os expoentes, tanto no caso  $q = 3$  quanto no  $q = 8$ , são compatíveis com as referências [96,97]. Nota-se que os expoentes críticos  $\eta_{(q)}$  dependem do número de estados, embora de maneira muito fraca ( $\eta_{(3)} \approx \eta_{(8)}$ ), da mesma forma que o *scaling* da função de correlação depende de  $q$  após sofrer o *quench* da temperatura crítica  $T_c^{(\epsilon)}$  [98,99]. Também no caso  $q = 8$  o comprimento característico não obedece a lei de Allen-Cahn, como pode ser visto no detalhe da figura (a) (verde). Entretanto, como foi discutido em [96, 100], para uma distribuição bimodal com grau de desordem fraco ( $\epsilon = 2.0$ ), a lei de crescimento pode não ter atingido seu valor assintótico dentro da escala de tempo em que foi medida neste trabalho. O detalhe da figura (b) mostra a diferença da distribuição inicial dos *hulls* para o caso puro e com desordem. Observa-se claramente o desvio da lei de potência no caso puro (vermelho). Dada a forma da distribuição inicial do modelo com  $q = 8$  estados e desordem ferromagnética fraca, espera-se que a distribuição das áreas dos *hulls* também sofra os efeitos da distribuição inicial como ocorre para o caso  $2 \leq q \leq 4$  do modelo puro (seção 4.6.2).

### 5.3 Distribuição das áreas dos hulls

Os resultados analíticos para a distribuição das áreas dos *hulls* (equações 3.11 e 3.12) podem ser reescritos na forma reescalada

$$n_h(A, t) = \frac{1}{(\lambda_h t)^2} f\left(\frac{A}{\lambda_h t}\right), \quad (5.5)$$

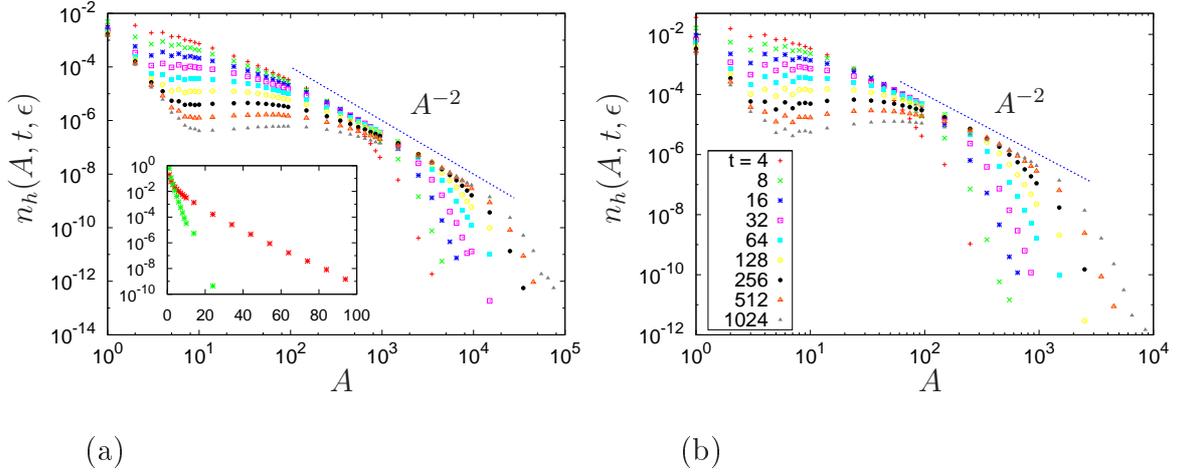
onde  $f(x) = (2)c_h/(x+1)^2$ . O fator 2 difere a distribuição partindo do estado inicial a temperatura crítica ou infinita, como foi visto no capítulo 3. O comprimento característico para o modelo puro com parâmetro de ordem não conservado escala com  $R(t) = \sqrt{\lambda_h t}$ . Os efeitos de se trabalhar a temperaturas finais  $T_f$  não nulas são todos absorvidos no parâmetro  $\lambda_h$  [25]. As hipóteses de escala e super-universalidade sugerem que, para o modelo com desordem ferromagnética, ainda seja válida a mesma função de escala  $f(x)$  e o fator de correção fica por conta da substituição da constante  $(\lambda_h t)^{1/2}$  por  $R(t, T, \epsilon)$ . Mais precisamente, espera-se que

$$n_h(A, t, T, \epsilon) = R^{-4}(t, T, \epsilon) f\left[\frac{A}{R^2(t, T, \epsilon)}\right] \quad (5.6)$$

seja a forma da distribuição das áreas dos *hulls* para todos os casos.

A distribuição das áreas dos *hulls* para o modelo de Potts com desordem ferromagnética fraca, após ter sofrido o *quench* do estado de equilíbrio a temperatura infinita  $T_0 \rightarrow \infty$ , para a temperatura  $T_f = T_c^{(\epsilon)}/2$  é a mesma obtida no modelo puro, como mostra a figura 5.4. A presença de desordem não afeta a densidade  $\rho = 1/q$ , que se afasta cada vez mais da densidade crítica do modelo de percolação aleatória ( $\rho_c \approx 0.59$ ) a medida que  $q$  aumenta. Sendo assim, o estado crítico (onde existe um domínio percolante) não é alcançado e a distribuição inicial apresenta uma forma exponencial, como mostrado no detalhe da figura (5.4a) para  $q = 3$  (vermelho) e  $q = 8$  (verde). Contudo, o mesmo envelope  $A^{-2}$  presente no modelo puro pode ser observado em ambos os casos (figuras (a) e (b)), resultado direto do *scaling* dinâmico (seção 4.6.1).

Quando equilibrado na temperatura crítica  $T_c^{(\epsilon)}$ , o modelo de Potts com desordem apresenta uma distribuição de áreas de *hulls* compatível com o modelo puro em  $T_c$  com  $2 \leq q \leq 4$  estados independente da degenerescência. Como na presença de desordem as transições de fase do modelo são sempre contínuas, as correlações no ponto crítico tornam-se infinitas (de longo alcance) e a distribuição inicial tem a forma descrita pela equação 4.3. A figura 5.5 mostra a distribuição colapsada, em diversos tempos, das áreas dos *hulls* do modelo com  $q = 3$  estados e desordem ferromagnética fraca. A distribuição inicial do caso puro e com desordem é mostrada no detalhe da figura. Diferentemente do que ocorre no caso  $q = 8$ , onde a distribuição inicial do modelo puro não mantém a

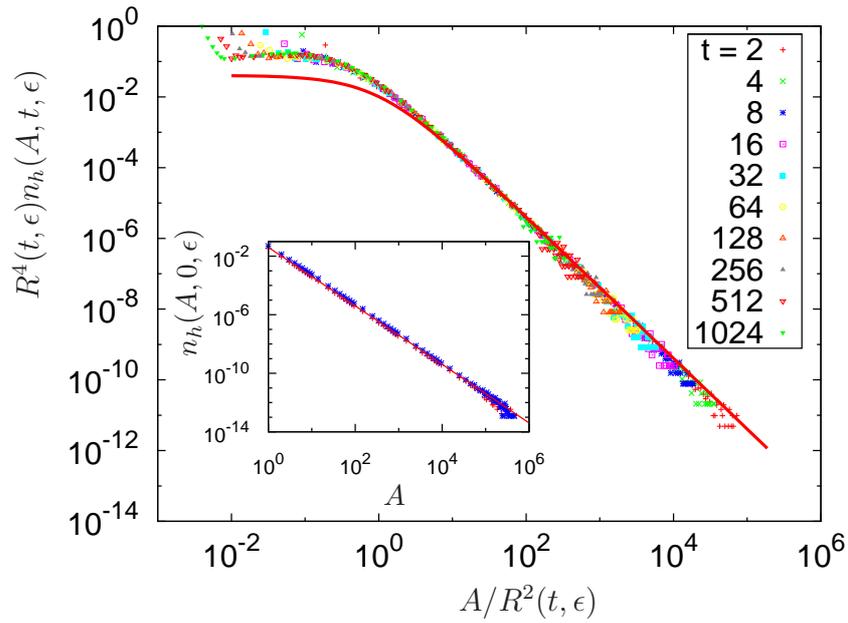


**Figura 5.4:** Distribuição das áreas dos *hulls* para o modelo de Potts com desordem fraca ( $\epsilon = 2.0$ ), submetido a um *quench* do estado de equilíbrio a temperatura infinita para  $T_f = T_c^{(\epsilon)}/2$ . Partindo de  $T_0 \rightarrow \infty$ , a mesma distribuição é observada para qualquer configuração com  $q > 2$  estados, independente da presença ou não de desordem. As figuras (a) e (b) mostram as distribuições para os casos  $q = 3$  e  $q = 8$ , respectivamente. O mesmo envelope  $A^{-2}$  presente no modelo puro pode ser observado em ambos os casos. O detalhe da figura (a) mostra a distribuição inicial (em escala semi-logarítmica) para  $q = 3$  (vermelho) e  $q = 8$  (verde). Observa-se, da mesma forma que no modelo puro, que a distribuição inicial tem a forma exponencial (a menos de desvios presentes para pequenas áreas no caso  $q = 3$ ).

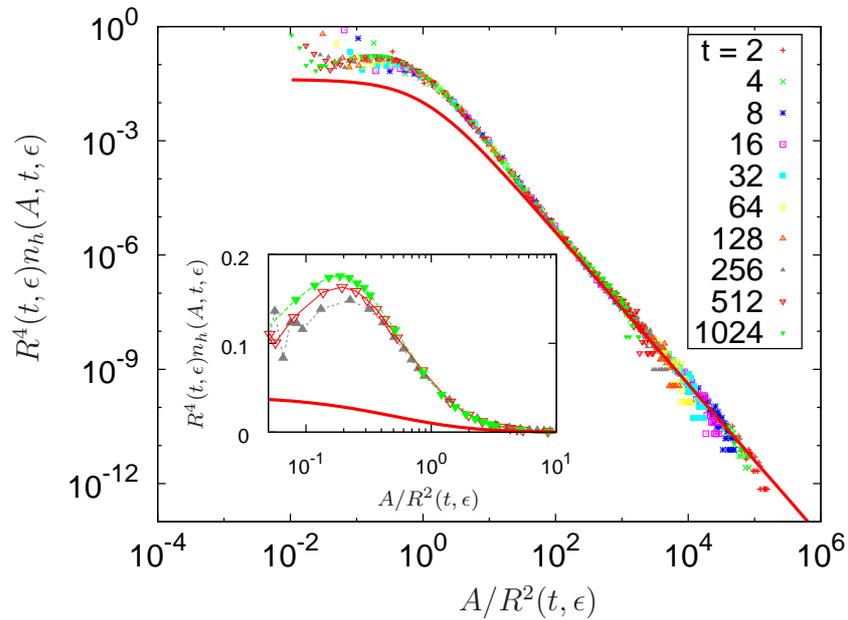
forma da lei de potência (detalhe da figura 5.3 (b)), no caso com tripla degenerescência as distribuições iniciais para o modelo puro e com desordem são indistinguíveis. Tal concordância é esperada uma vez que a desordem não afeta o tipo de transição no caso  $q = 3$ . Entretanto, os efeitos da desordem são percebidos durante a evolução do sistema. O excesso de domínios pequenos faz com que a distribuição para pequenas áreas se desvie da forma prevista no caso puro (equação 4.6). Este excesso pode ser atribuído aos efeitos do *pinning* causado pela desordem, que age retardando a evolução destes domínios afetando a dinâmica de escala nesta faixa de tamanhos.

A figura 5.6 mostra a distribuição das áreas dos *hulls* reescalada pelo comprimento característico  $R(t, \epsilon)$  em diversos tempos, para o modelo de Potts com  $q = 8$  estados com grau de desordem  $\epsilon = 2.0$ . O sistema partiu do estado de equilíbrio a temperatura crítica  $T_0 = T_c^{(\epsilon)}$ , onde a distribuição inicial tem a forma da lei de potência devido à mudança na ordem da transição. Após sofrer o *quench* para a temperatura  $T_f = T_c^{(\epsilon)}/2$ , a distribuição mantém a forma da lei de potência, sendo descrita (surpreendentemente), no limite das grandes áreas, pela mesma função que descreve a distribuição do modelo puro com  $q = 3$  estados. A região de pequenas áreas não escala com o comprimento característico, como pode ser observado no detalhe da figura. Este mesmo fato ocorreu no modelo sem desordem (detalhe da figura 4.16).

Concluimos então que as correlações de longo alcance presentes no estado inicial a temperatura crítica, para qualquer grau de degenerescência do modelo com desordem,



**Figura 5.5:** Distribuição das áreas dos *hulls* em diversos tempos, colapsada em função do comprimento característico  $R(t, \epsilon)$ , para o modelo de Potts com  $q = 3$  estados e desordem  $\epsilon = 2.0$ , após ser submetido a um *quench* de  $T_0 = T_c^{(\epsilon)}$  para  $T_f = T_c^{(\epsilon)}/2$ . Para áreas  $A \lesssim R^2(t, \epsilon)$  a função de escala não corresponde a do modelo puro,  $2c_h^{(3)}/(1+x)^2$ , diferentemente do que ocorre para grandes áreas (linha cheia). O detalhe mostra que a distribuição inicial é indistinguível na presença ou não de desordem.



**Figura 5.6:** Distribuição das áreas dos *hulls* em diversos tempos, colapsada em função do comprimento característico  $R(t, \epsilon)$ . O sistema partiu do estado de equilíbrio a temperatura crítica  $T_0 = T_c^{(\epsilon)}$  para o estado de não-equilíbrio a temperatura  $T_f = T_c^{(\epsilon)}/2$ . A mesma função que descreve a distribuição do modelo puro com  $q = 3$  estados descreve a distribuição, para grandes áreas, do modelo com  $q = 8$ . Aparentemente a cauda mantém a memória da distribuição inicial, sendo descrita pela lei de potência com expoente -2. O detalhe mostra (em escala semi-logarítmica) que a região de pequenas áreas não escala com o comprimento característico e seu comportamento se assemelha ao do modelo puro (detalhe da figura 4.16).

determinam o comportamento dinâmico das grandes áreas, resultando no decaimento da lei de potência. Assim, para  $q > 4$  sistemas puros e desordenados se comportam, qualitativamente, de maneira diferente quando a condição inicial de equilíbrio é na temperatura crítica. Para  $q \leq 4$  o estado inicial em  $T_c$  mantém correlações de longo alcance independentemente da presença de desordem. Para qualquer circunstância onde a distribuição tem a forma de uma lei de potência, para grandes áreas o expoente da distribuição é -2. Considerando que para  $q > 4$  a desordem afetou pouco a distribuição das pequenas áreas (observando os detalhes das figuras 4.16 e 5.6) concluímos que a desordem tem um forte efeito sobre a forma da distribuição para grandes áreas.

# Capítulo 6

## Conclusão

Neste trabalho analisamos algumas propriedades geométricas características do ordenamento de fases dinâmico do modelo de Potts em duas dimensões através de simulações computacionais. Nossa motivação partiu dos recentes resultados obtidos para o modelo com  $q = 2$  estados (modelo de Ising) [25, 29, 30], e nossa ideia foi generalizar para o caso com múltiplos graus de degenerescência, característico do modelo com  $q > 2$  estados. Os resultados analíticos obtidos por J. Cardy e R. Ziff [28], que descrevem a distribuição inicial das áreas dos *hulls* para o modelo de percolação aleatória no ponto crítico ( $\rho_c \simeq 0.59$ ) (equação 3.9), e para o modelo de Ising na temperatura crítica  $T_c$  (equação 3.10). Sabendo que no regime de escala a dinâmica do sistema é regida exclusivamente pela curvatura das interfaces (lei de Allen-Cahn) foi determinado exatamente [25, 29] a forma da distribuição das áreas dos *hulls* em qualquer intervalo de tempo, dada pelas equações 3.11 e 3.12. A concordância entre os resultados analíticos e computacionais são impressionantes (capítulo 3).

Embora muito seja conhecido a respeito das propriedades geométricas para o modelo com dupla degenerescência, comparativamente pouco se sabe a respeito do modelo com  $q > 2$  estados. Não existem soluções analíticas para a distribuição inicial nestes casos, e a própria dinâmica de crescimento sofre com novos efeitos que para o modelo com  $q = 2$  estados não existiam ou eram irrelevantes. É o caso da coalescência e dissociação de domínios, que no modelo de dois estados ocorre apenas no início da evolução, até o sistema atingir o regime de escala, mas que no modelo com múltiplos graus de degenerescência ocorre mesmo após o sistema atingir tal regime, embora tais efeitos pareçam não influenciar a dinâmica de crescimento ao ponto de interferir na taxa média de crescimento dos domínios e *hulls*. O processo de crescimento continua sendo regido pelas curvaturas das interfaces. Entretanto, novas regiões com tríplice fronteira surgem no sistema e causam o efeito de “trancamento” da dinâmica a baixas temperaturas na rede quadrada, obrigando o uso de ativação térmica para que o sistema possa evoluir.

Cada domínio, correspondente a um dos muitos ( $q > 2$ ) estados acessíveis do sistema, passa a ter sua evolução dinâmica baseada na dependência de seu número  $n$  de lados. A taxa com que a área de um domínio varia no tempo deixa de ser constante (como ocorre no caso  $q = 2$  independentemente do tamanho do domínio (equação 3.6)), passando a depender do número de lados ( $q > 2$ ). Isto implica que em um determinado instante um domínio pode crescer ( $n > 6$ ) e no instante seguinte diminuir ( $n < 6$ ) uma vez que domínios podem surgir e desaparecer devido as flutuações térmicas, variando assim o número  $n$  de lados de um domínio durante a evolução.

Apesar de existirem algumas semelhanças entre o modelo com  $q = 2$  e o modelo com  $q > 2$  estados, não era possível fazer qualquer previsão a respeito da forma da distribuição para o caso do modelo com múltiplos graus de degenerescência. O primeiro resultado surpreendente surgiu ao analisarmos a distribuição para o modelo com o número de estados compatível com a transição de segunda ordem ( $2 < q \leq 4$ ) quando o mesmo parte do estado de equilíbrio a temperatura crítica e, após ser submetido a um *quench*, é levado a um estado de não-equilíbrio a temperatura  $T_f = T_c/2$ . Neste caso, a distribuição mantém a forma de lei de potência, compatível com o resultado analítico obtido para  $q = 2$  (equação 3.12). O resultado é inesperado pois, no caso  $q = 2$  a taxa com que a área de um *hull* varia independe do tamanho do *hull*, sendo contante durante toda a evolução 3.6. No entanto, de acordo com a lei de von Neumann, a taxa de crescimento do *hull* no modelo com  $q > 2$  estados depende do número  $n$  de lados (equação 4.2), deixando de ser constante e consequentemente não sendo possível determinar a forma da distribuição num tempo  $t$  qualquer mesmo conhecendo a distribuição num tempo  $t_i$  anterior.

Observamos um novo comportamento para a distribuição das áreas dos domínios e *hulls*, presente sob duas circunstâncias: quando o sistema com  $q > 2$  estados parte da configuração de equilíbrio a temperatura infinita, ou quando o estado inicial de equilíbrio corresponde a uma transição de primeira ordem ( $q > 4$ ). Em qualquer um destes casos, a distribuição inicial não é mais uma lei de potência, mas possui uma cauda exponencial. Para o caso do sistema com múltipla degenerescência e equilibrado na temperatura infinita, a densidade da configuração inicial,  $\rho = 1/q$ , se afasta cada vez mais do limite crítico de percolação aleatória (onde a distribuição inicial tipo lei de potência é conhecida exatamente) a medida que a degenerescência aumenta. No caso de um sistema com  $q > 4$  estados, termalizado em  $T_c$ , a correlação do estado inicial é finita. Durante a evolução o sistema perde toda a memória da correlação inicial e mantém a forma exponencial da distribuição inicial. Neste caso também não existem resultados analíticos que descrevam a distribuição das áreas em qualquer tempo. Resumindo, nossa análise demonstrou o papel fundamental desempenhado pelas condições iniciais, mais precisamente se elas têm comprimento de correlação infinito ou não.

Mesmo sem conhecer a forma analítica das distribuições para o modelo de Potts com  $q > 2$  estados, confirmamos a validade da hipótese de universalidade para todos os casos, onde o comprimento característico é  $R(t) \sim t^{1/2}$ , de acordo com a lei de Allen-Cahn.

Estudamos também as propriedades geométricas relacionadas com as áreas dos *hulls* para o modelo de Potts com desordem ferromagnética fraca (do tipo *quenched*). A principal característica da desordem em sistemas que possuem transição de primeira ordem é mudar a ordem da transição. No nosso caso o sistema com desordem apresenta transição de segunda ordem (contínua) para qualquer número  $q \geq 2$  de estados. Quando o sistema parte do estado de equilíbrio a temperatura  $T_0 \rightarrow \infty$ , as distribuições mantêm as mesmas características do caso puro. Isto porque a desordem não afeta o limite crítico de percolação aleatória. Entretanto, nos casos onde o sistema parte do estado de equilíbrio na temperatura crítica,  $T_0 = T_c^{(\epsilon)}$ , a distribuição é, desde o instante inicial, uma lei de potência, pois as correlações iniciais passam a ser todas de longo alcance. A forma da distribuição é basicamente a mesma que a obtida analiticamente, no entanto a função de escala não obedece mais a lei de Allen-Cahn. Esta mudança de comportamento devido à presença de desordem mostra que a hipótese de super-universalidade não é válida neste sistema.

Baseados no argumento da similaridade propusemos uma forma geral, válida tanto para o modelo puro quanto para o modelo com desordem ferromagnética fraca, que descreve a distribuição das áreas dos *hulls* quando a mesma é tipo lei de potência,

$$n_h(A, t) \simeq \frac{(q-1)c_h^{(q,\epsilon)}}{[A + R^2(t)]^2}, \quad (6.1)$$

onde o prefator  $c_h$  passa a depender não somente do número de estados  $q$  mas também do grau de desordem  $\epsilon$ . Nos casos onde a degenerescência é  $q > 4$  a equação 6.1 não descreve bem a distribuição para pequenas áreas possivelmente devido aos efeitos do *pinning* gerado pela desordem. Embora a teoria para o modelo de dois estados não seja facilmente estendida para o caso  $q > 2$ , nossos resultados servem como um primeiro passo nessa direção.

## 6.1 Perspectivas

Existem outras propriedades geométricas relacionadas com os domínios e *hulls* que não foram estudadas aqui mas que merecem atenção. Por exemplo, a distribuição dos comprimentos dos perímetros, do número  $n$  de lados, e a relação entre a área e o perímetro com o

número de lados possuem um grande interesse em sistemas celulares<sup>1</sup>. Em particular, seria interessante verificar se as leis de Lewis e Aboav-Weaire [101] são válidas no modelo de Potts bidimensional, com e sem a presença de desordem. A primeira afirma que a relação entre a área média de uma célula,  $\langle A_n \rangle$ , e seu respectivo número  $n$  de lados é basicamente linear,  $\langle A_n \rangle \simeq A + Bn$ . A segunda relaciona o número de lados de uma célula com o número médio de lados das células vizinhas. Acreditamos que exista uma relação entre a forma da distribuição e o valor da taxa efetiva de crescimento dos domínios e *hulls*,  $dA/dt$ , que sendo negativa induz uma distribuição lei de potência e sendo positiva induz a distribuição exponencial. É possível que, caracterizando melhor as propriedades geométricas do sistema, obtenhamos novas informações que nos ajudem a entender a origem destas diferenças.

Esperamos também que nossos resultados sirvam de guia no estudo de sistemas reais, como ocorreu com o caso  $q = 2$  cuja distribuição analítica serviu como base na descrição dos domínios formados em cristais líquidos [31].

Por fim, desejamos estender toda análise do modelo de Potts bidimensional para o modelo em três dimensões. A distribuição das áreas pode ser analisada de duas formas: considerando as seções transversais (planos bidimensionais) do volume, e/ou considerando a distribuição dos volumes dos domínios na rede cúbica. A complexidade do problema torna-se bem maior no caso tridimensional e não é óbvio qual tipo de distribuição encontraremos neste caso.

---

<sup>1</sup>Em biologia, a maioria das atividades de investigação sobre as estruturas celulares têm como foco os estudos dos arranjos geométricos das células de tecido epidérmico.

# Referências Bibliográficas

- [1] LOSADA, J. et al. Liposarcoma initiated by FUS/TLS-CHOP: the FUS/TLS domain plays a critical role in the pathogenesis of liposarcoma. *Nature: Oncogene*, v. 19, p. 6015–6022, 2000.
- [2] SCHMIDOVA, E. et al. Mechanism of degradation of stabilized corrosion-resistant steel during the welding cycle. *Anti-Corrosion Methods and Materials*, v. 56, p. 206–217, 2009.
- [3] PROZOROV, R. et al. Suprafroth in type-I superconductors. *Nature Physics*, v. 4, p. 327–332, 2008.
- [4] MAUSETH, J. D. *Plant Anatomy*. [S.l.]: Benjamin-Cummings Publishing Company, 1988.
- [5] GLAZIER, J.; ANDERSON, M.; GREY, G. Coarsening in two dimensional soap froth and the large  $q$  Potts model: a detailed comparison. *Philosophical Magazine B*, v. 62, p. 615–645, 1990.
- [6] MOMBACH, J.; ALMEIDA, R.; IGLESIAS, J. Mitosis and growth in biological tissues. *Physical Review E*, v. 48, p. 598, 1993.
- [7] BABCOCK, K.; SESHADRI, R.; WESTERVELT, R. M. Coarsening of cellular domain patterns in magnetic garnet films. *Physical Review A*, v. 41, p. 1952, 1990.
- [8] JAGLA, E. Numerical simulations of two-dimensional magnetic domain patterns. *Physical Review E*, v. 70, p. 046204, 2004.
- [9] BRAY, A. J. Theory of phase ordering kinetics. *Advances in Physics*, v. 43, p. 357–459, 1994.
- [10] LOUREIRO, M. et al. Curvature-driven coarsening in the two-dimensional Potts model. *Physical Review E*, v. 81, p. 021129, 2010.

- [11] LOUREIRO, M. et al. Coarsening in the Potts model: out-of-equilibrium geometric properties. *XI Latin American Workshop on Nonlinear Phenomena*, 2009.
- [12] LOSCAR, E. et al. Nonequilibrium characterization of spinodal points using short time dynamics. *Journal of Chemical Physics*, v. 131, p. 024120, 2009.
- [13] NEWMAN, M.; BARKEMA, G. *Monte Carlo methods in Statistical Physics*. [S.l.]: Oxford University Press, New York, USA, 1999.
- [14] LANDAU, D. P.; BINDER, K. *A guide to Monte Carlo simulations in Statistical Physics*. [S.l.]: Cambridge University Press.
- [15] AMAR J, G.; FAMILY, F. Diffusion annihilation in one dimension and kinetics of the Ising model at zero temperature. *Physical Review A*, v. 41, p. 3258–3262, 1990.
- [16] DERRIDA, B.; GODRECHE, C.; YEKUTIELI, I. Scale-invariant regimes in one-dimensional models of growing and coalescing droplets. *Physical Review A*, v. 44, p. 6241–6251, 1991.
- [17] CONIGLIO, A.; ZANNETTI, M. Multiscaling in growth kinetics. *Europhysics Letters*, v. 10, p. 575–580, 1989.
- [18] NEWMAN, T.; BRAY, A.; MOORE, M. Growth of order in vector spin systems and self-organized criticality. *Physical Review B*, v. 42, p. 4514–4523, 1990.
- [19] LIFSHITZ, I. M.; SLYOZOV, V. V. The kinetics of precipitation from supersaturated solid solutions. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, v. 19, p. 35–50, 1961.
- [20] LIFSHITZ, I. M. Kinetics of ordering during second-order phase transitions. *Soviet Physics - JETP*, v. 15, p. 939, 1962.
- [21] STAUFFER, D.; AHARONY, A. *Introduction to Percolation Theory*. [S.l.]: Taylor & Francis Ltda, 2003.
- [22] YEOMANS, J. *Statistical Mechanics of Phase Transitions*. [S.l.]: Clarendon Press, 1992.
- [23] WU, F. W. The Potts model. *Reviews of Modern Physics*, v. 54, p. 235–268, 1982.
- [24] HOSHEN, J.; KOPELMAN, R. Percolation and cluster distribution. I- Cluster multiple labeling technique and critical concentration algorithm. *Physical Review B*, v. 14, p. 3438, 1976.

- [25] SICILIA, A. et al. Domain growth morphology in curvature-driven two-dimensional coarsening. *Physical Review E*, v. 76, p. 061116, 2007.
- [26] HOHENBERG, P.; HALPERIN, B. Theory of dynamic critical phenomena. *Reviews of Modern Physics*, v. 49, p. 435, 1977.
- [27] ALLEN, S. M.; CAHN, J. W. A microscopic theory for antiphase boundary motion and its application to antiphase domain coarsening. *Acta Metallurgica*, v. 27, p. 1085–1095, 1979.
- [28] CARDY, J.; ZIFF, R. M. Exact results for the universal area distribution of cluster in percolation, Ising, and Potts model. *Journal of Statistical Physics*, v. 110, p. 1–33, 2003.
- [29] ARENZON, J. J. et al. Exact results for curvature-driven coarsening in two dimensions. *Physical Review Letters*, v. 98, p. 145701, 2007.
- [30] SICILIA, A. et al. Geometric properties of two-dimensional coarsening with weak disorder. *Europhysics Letters*, v. 82, p. 10001, 2008.
- [31] SICILIA, A. et al. Experimental test of curvature-driven dynamics in the phase ordering of a two dimensional liquid crystal. *Physical Review Letters*, v. 101, p. 197801, 2008.
- [32] SICILIA, A. et al. Geometry of phase separation. *Physical Review E*, v. 80, p. 031121, 2009.
- [33] STELLA, A.; VANDERZANDE, C. Scaling and fractal dimension of Ising clusters at the  $d = 2$  critical. *Physical Review Letters*, v. 62, p. 1067, 1989.
- [34] GRANER, F.; GLAZIER, J. Simulation of biological cell sorting using a two-dimensional extended Potts model. *Physical Review Letters*, v. 69, p. 2013–2016, 1992.
- [35] GLAZIER, J.; GRANER, F. Simulation of the differential adhesion driven rearrangement of biological cells. *Physical Review E*, v. 47, p. 2128–2154, 1993.
- [36] WEAIRE, D.; GLAZIER, J. Relation between volume, number of faces and three dimensional growth laws in coarsening cellular patterns. *Philosophical Magazine Letters*, v. 68, p. 363–365, 1993.
- [37] GREY, G.; ANDERSON, M.; SROLOVITZ, D. Domain-growth kinetics for the  $q$ -state Potts model in two and three dimensions. *Physical Review B*, v. 38, p. 4752, 1988.

- [38] LAU, M.; DASGUPTA, C.; VALLS, O. Domain growth in the field-theoretic version of the Potts model. *Physical Review B*, v. 38, p. 9042, 1988.
- [39] SAFRAN, S. Domain growth of degenerate phases. *Physical Review Letters*, v. 46, p. 1581, 1981.
- [40] MULLINS, W. Two-dimensional motion of idealized grain boundaries. *Journal of Applied Physics*, v. 27, p. 900, 1956.
- [41] NEUMANN, J. v. Shape of Metals Grains. In: HERRING, C. (Ed.). *Metal Interfaces*. [S.l.], 1952. p. 108–110.
- [42] GLAZIER, J.; STAVANS, J. Nonideal effects in the two-dimensional soap froth. *Physical Review A*, v. 40, p. 7398, 1989.
- [43] MACPHERSON, R.; SROLOVITZ, D. The von Neumann relation generalized to coarsening of three-dimensional microstructures. *Nature*, v. 446, p. 1053, 2007.
- [44] MULLER-KRUMBHAAR, H.; STOLL, E. Cluster statistics of the lattice gas model in three and two dimensions. *Journal of Chemical Physics*, v. 65, p. 4294, 1976.
- [45] KUNZ, H.; SOUILLARD, B. Essential singularity in the Percolation model. *Physical Review Letters*, v. 40, p. 133, 1978.
- [46] SCHWARTZ, M. Upper bounds on cluster distribution functions and the nature of the Griffiths singularity. *Physical Review B*, v. 18, p. 2364, 1978.
- [47] STOLL, E.; DOMB, C. Shape and size of two-dimensional percolation clusters with and without correlations. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, v. 12, p. 1843, 1979.
- [48] HOSHEN, H. et al. Monte Carlo experiments on cluster size distribution in percolation. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, v. 12, p. 1285, 1979.
- [49] SCHMITTMANN, B.; BRUCE, A. Droplet theory in low dimensions: Potts models and percolation. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, v. 18, p. 1715, 1985.
- [50] PARISI, G.; SOURLAS, N. Critical behavior of branched polymers and the Lee-Yang edge singularity. *Physical Review Letters*, v. 46, p. 871, 1981.
- [51] BUFFENOIR, E.; WALLON, S. The correlation length of the Potts model at the first-order transition point. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, v. 26, p. 3045, 1993.

- [52] DEROULERS, C.; YOUNG, A. Critical behavior and lack of self-averaging in the dynamics of the random Potts model in two dimensions. *Physical Review B*, v. 66, p. 014438, 2002.
- [53] KASKI, K.; NIEMINEM, J.; GUNTON, J. Domain growth and scaling in the  $q$ -state Potts model. *Physical Review B*, v. 31, p. 2998, 1985.
- [54] KUMAR, S.; GUNTON, J.; KASKI, K. Dynamical scaling in the  $q$ -state Potts model. *Physical Review B*, v. 35, p. 8517, 1987.
- [55] LIU, F.; MAZENKO, G. Phase ordering dynamics in the continuum  $q$ -state Clock model. *Physical Review B*, v. 47, p. 2866, 1993.
- [56] RAPAPA, N.; MALIEHE, N. Corrections to scaling in the  $q$ -state Potts model within Gaussian closure approximation. *The European Physical Journal B*, v. 48, p. 219–223, 2005.
- [57] HUMAYUN, K.; BRAY, A. Scaling functions in phase-ordering dynamics: A comparison of theory and simulations. *Physical Review B*, v. 46, p. 10594, 1992.
- [58] HUMAYUN, K.; BRAY, A. Non-equilibrium dynamics of the Ising model for  $t < t_c$ . *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, v. 24, p. 1915, 1991.
- [59] OLIVEIRA, M.; PETRI, A.; TOMÉ, T. Glassy states in lattice models with many coexisting crystalline phases. *Europhysics Letters*, v. 65, p. 20, 2004.
- [60] FERRERO, E.; CANNAS, S. Long-term ordering kinetics of the two-dimensional  $q$ -state Potts model. *Physical Review E*, v. 76, p. 031108, 2007.
- [61] OLIVEIRA, M.; PETRI, A.; TOMÉ, T. Crystal vs. glass formation in lattice models with many coexisting ordered phases. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, v. 342, p. 97–103, 2004.
- [62] BERGANZA, M. et al. Phase separation of the Potts model in square lattice. *The European Physical Journal*, v. 143, p. 273–275, 2007.
- [63] OLIVEIRA, M. Glassy states in the stochastic Potts model. *Computer Physics Communications*, v. 180, p. 480–484, 2009.
- [64] SROLOVITZ, D.; GRETT, G. Impurity effects on domain-growth kinetics. II. Potts model. *Physical Review B*, v. 32, p. 3021, 1985.
- [65] FRADKOV, V. E.; UDLER, D. Two-dimensional normal grain growth: topological aspects. *Advances in Physics*, v. 43, p. 739, 1994.

- [66] MULLINS, W. Grain growth of uniform boundaries with scaling. *Acta Materialia*, v. 46, p. 6219, 1998.
- [67] RIOS, P.; LUCKE, K. Comparison of statistical analytical theories of grain growth. *Scripta Materialia*, v. 44, p. 2471, 2001.
- [68] FLYVBJERG, H. Model for coarsening froths and foams. *Physical Review E*, v. 47, p. 4037, 1993.
- [69] FISHER, D.; HUSE, D. Nonequilibrium dynamics of spin glasses. *Physical Review B*, v. 38, p. 373–385, 1988.
- [70] BRAY, A.; HUMAYUN, K. Universality class for domain growth in random magnets. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, v. 24, p. L1185, 1991.
- [71] PURI, S.; CHOWDHURY, D.; PAREKH, N. Non-algebraic domain growth in random magnets: a cell dynamical approach. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, v. 24, p. L1087, 1991.
- [72] HAYAKAWA, H. A cell-dynamics approach to the ordering in a system with quenched random impurities. *Journal of the Physical Society of Japan*, v. 60, p. 2492, 1991.
- [73] IWAI, T.; HAYAKAWA, H. Simulation of domain growth in a system with random impurities. *Journal of the Physical Society of Japan*, v. 62, p. 1583, 1993.
- [74] BISWAL, B.; PURI, S.; CHOWDHURY, D. Domain growth in weakly disordered magnets. *Physica A*, v. 229, p. 72, 1996.
- [75] ARON, C. et al. Scaling and super-universality in the coarsening dynamics of the 3D random field Ising model. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, v. 05, p. P05016, 2008.
- [76] HENKEL, M.; PLEIMLING, M. Superuniversality in phase-ordering disordered ferromagnets. *Physical Review B*, v. 78, p. 224419, 2008.
- [77] HARRIS, A. Effect of random defects on the critical behaviour of Ising models. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, v. 7, p. 1671, 1974.
- [78] HUI, K.; BERKER, A. Random-field mechanism in random-bond multicritical systems. *Physical Review Letters*, v. 62, p. 2507, 1989.
- [79] AIZENMAN, M.; WEHR, J. Rounding of first-order phase transitions in systems with quenched disorder. *Physical Review Letters*, v. 62, p. 2503, 1989.

- [80] IMRY, Y.; WORTIS, M. Influence of quenched impurities on first-order phase transitions. *Physical Review B*, v. 19, p. 3580, 1979.
- [81] CHEN, S.; FERRENBERG, A.; LANDAU, D. Randomness-induced second-order transition in the two-dimensional eight-state Potts model: A Monte Carlo study. *Physical Review Letters*, v. 69, p. 1213, 1992.
- [82] LUDWIG, A. W. W. Infinite hierarchies of exponents in a diluted ferromagnet and their interpretation. *Nuclear Physics B*, v. 330, p. 639, 1990.
- [83] CHEN, S.; FERRENBERG, A.; LANDAU, D. Monte Carlo simulation of phase transitions in a two-dimensional random-bond Potts model. *Physical Review E*, v. 52, p. 1377, 1995.
- [84] CHATELAIN, C.; BERCHE, B. Finite-size scaling study of the surface and bulk critical behavior in the random-bond eight-state Potts model. *Physical Review Letters*, v. 80, p. 1670, 1998.
- [85] YASAR, F.; GUNDUC, Y.; CELIK, T. The effects of the distribution of bimodal bonds on phase transition in 2D Potts model. *Physica A*, v. 274, p. 537–544, 1999.
- [86] JANKE, W.; WEIGEL, M. Effects of connectivity disorder on the Potts model. *ACTA Physica Polonica B*, v. 34, p. 4891, 2003.
- [87] BERCHE, B.; CHATELAIN, C. *Order, disorder, and criticality*. [S.l.]: World Scientific, Singapore, 2004.
- [88] KINZEL, W.; DOMANY, E. Critical properties of random Potts models. *Physical Review B*, v. 23, p. 3421, 1981.
- [89] HAZZLEDINE, P.; OLDERSHAW, R. Computer simulation of Zener pinning. *Philosophical Magazine A*, v. 61, p. 579, 1990.
- [90] KRICHEVSKY, O.; STAVANS, J. Coarsening of two-dimensional soap froths in the presence of pinning centers. *Physical Review B*, v. 46, p. 10579, 1992.
- [91] PAUL, R.; PURI, S.; RIEGER, H. Domain growth in random magnets. *Europhysics Letters*, v. 68, p. 881, 2004.
- [92] PAUL, R.; PURI, S.; RIEGER, H. Domain growth in Ising systems with quenched disorder. *Physical Review E*, v. 71, p. 061109, 2005.
- [93] HENKEL, M.; PLEIMLING, M. Ageing in disordered magnets and local scale invariance. *Europhysics Letters*, v. 76, p. 561, 2006.

- 
- [94] PAUL, R.; SCHEHR, G.; RIEGER, H. Superaging in two-dimensional random ferromagnets. *Physical Review E*, v. 75, p. 030104, 2007.
- [95] IGUAIN, J. et al. Growing correlations and aging of an elastic line in a random potential. *Physical Review B*, v. 80, p. 094201, 2009.
- [96] PICCO, M. A study of cross-over effects for the 2d random bond Potts model. *Cond-Mat*, v. 9802092, 1998.
- [97] JACOBSEN, J.; CARDY, J. Critical behaviour of random-bond Potts models: a transfer matrix study. *Nuclear Physics B*, v. 515, p. 701, 1998.
- [98] JACOBSEN, J.; PICCO, M. Large- $q$  asymptotics of the random-bond Potts model. *Physical Review E*, v. 61, p. R13, 2000.
- [99] D'AURIAC, J.; IGLÓI, F. Phase transition in the 2d random Potts model in the large- $q$  limit. *Physical Review Letters*, v. 90, p. 190601, 2003.
- [100] OLSON, T.; YOUNG, A. Monte Carlo study of the critical behavior of random bond Potts models. *Physical Review B*, v. 60, p. 3428, 1999.
- [101] SCHLIECKER, G. Structure and dynamics of cellular systems. *Advances in Physics*, v. 51, p. 1319, 2002.