

Vidrios de spin: Paradigma de los sistemas complejos.

Juan J. Ruiz-Lorenzo

Dipartimento di Fisica ed Istituto Nazionale di Fisica Nucleare,
Università degli Studi di Roma *La Sapienza*
Piazzale Aldo Moro 2, 00185 Roma (Italia)

`ruiz@chimera.roma1.infn.it`

24 de octubre de 1996

Resumen

La solución en la aproximación de campo medio de los vidrios de spin proporciona unas características muy interesantes como la existencia de un número infinito de estados puros y que estos estados puros están organizados de forma ultramétrica (como en Taxonomía). Estas propiedades hacen que los vidrios de spin sean el paradigma de los sistemas complejos.

Abstract

The solution of the spin glasses in the Mean Field approximation gives some interesting characteristics such that the existence of an infinite number of pure states organized in an ultrametric way (like in Taxonomy). These properties raise the spin glasses to a paradigm of the complex systems.

1 Introducción

En este artículo estudiaremos propiedades que comparten un gran número de sistemas, que denominaremos sistemas complejos, y para describir estas propiedades elegiremos un tipo de materiales denominados vidrios de spin.

Para introducir qué son los sistemas complejos, podemos usar como ejemplo el plegamiento de las proteínas, dejando la descripción de los vidrios de spin para el final de esta sección.

Una proteína está compuesta por una larga cadena de diferentes aminoácidos (la secuencia se denomina estructura primaria de la proteína) unidos por enlaces peptídicos. Esta secuencia se plegará en el espacio tridimensional y la forma que adquirirá la proteína le dará su función biológica (estructuras secundaria y terciaria). El problema es determinar a partir de la secuencia de aminoácidos la forma tridimensional de la estructura final plegada.

Cada conformación tridimensional de la cadena peptídica tendrá una energía libre. Además cada aminoácido puede adoptar unas 10 configuraciones distintas (que *grosso modo* es el número de orientaciones, en el espacio, en que podemos unir un aminoácido con el siguiente). Si estamos estudiando una cadena pequeña de 100 aminoácidos, podrán existir 10^{100} conformaciones distintas de la proteína, teniendo cada una de estas conformaciones una energía libre. En la figura 1 representamos cualitativamente la forma de esta energía libre frente a las diferentes conformaciones. Se puede observar que este paisaje de la energía libre es muy complicado y que presenta muchos mínimos relativos. Diremos que un sistema es complejo cuando el paisaje de su energía libre es similar al de la figura 1. En el caso de las proteínas este paisaje “rugoso” está muy ligado con que la proteína tenga una secuencia de aminoácidos que no sea regular, esto daría un paisaje “plano” [2]. En la figura 2 presentamos la energía de un sistema que no puede ser considerado complejo.

Usualmente los materiales sólidos se encuentran en diferentes fases, por ejemplo, ferromagnética, antiferromagnética o paramagnética. En los sólidos paramagnéticos la magnetización es nula, mientras que en los ferromagnéticos aparece magnetización espontánea. Los antiferromagnéticos se caracterizan porque tienen una magnetización “staggered” no nula.

Normalmente todos los sólidos a una temperatura suficientemente alta se encuentran en la fase paramagnética (las fluctuaciones térmicas destruyen los posibles estados ordenados de los momentos magnéticos de cada átomo y la

magnetización resultante, suma de todos los momentos magnéticos, es nula) mientras que si la temperatura es suficientemente baja se ordenan pasando a una fase ferromagnética (si la interacción entre los momentos magnéticos de los átomos es atractiva) o antiferromagnética (si la interacción es repulsiva).

Sin embargo existen materiales en los que la citada interacción unas veces es positiva, pero otras veces es negativa por lo que se esperará que a temperatura suficientemente baja no estarán ni en una fase ferromagnética ni antiferromagnética. Estos sólidos se denominan vidrios de spin. A baja temperatura se encuentran en una fase desordenada “congelada”, mientras que los materiales ferromagnéticos se encuentran en una fase muy ordenada.

Un ejemplo son metales no magnéticos con una baja concentración de impurezas magnéticas (*e.g.* $\text{Fe}_x\text{Au}_{100-x}$ con $x = 5$). En este modelo la interacción entre los momentos magnéticos de los átomos de hierro es inducida por las deformaciones de la superficie de Fermi del oro, y podríamos escribir el siguiente Hamiltoniano, energía, aproximado para este sistema

$$\mathcal{H} = - \sum_{i,j} J(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) \sigma_i \sigma_j + \text{anisotropías}, \quad (1.1)$$

donde la función $J(y)$ es rápidamente oscilante, así que en el límite de muy baja dilución puede ser considerada como random. Con la variable σ_i hemos denotado el momento magnético del átomo de hierro situado en la posición espacial i -ésima (con coordenadas $\mathbf{r}_i \equiv (x_i, y_i, z_i)$).

Las características especiales de los vidrios de spin provienen de que la función de acoplamiento, $J(y)$, induce en el sistema frustración (al cambiar de signo el acoplamiento entre los spines, éstos son incapaces de encontrar una situación favorable energéticamente que los satisfaga a todos) y además desorden (como hemos escrito, el que oscile rápidamente hace que la magnitud de la interacción varíe mucho de un átomo de hierro a otro). En la siguiente sección estudiaremos con mas profundidad los conceptos de desorden y frustración.

Normalmente en Mecánica Estadística [1] debemos escribir el Hamiltoniano del sistema (la energía) para posteriormente escribir la función de partición. Obviamente el Hamiltoniano de un sistema es terriblemente complicado, aunque la hipótesis de universalidad nos permite escribirlo de una forma bastante simple. En el caso de los vidrios de spin se usa el denominado modelo de Edwards-Anderson (EA) [3,4], en vez de J oscilante la elegiremos

aleatoria, que usualmente se toma gaussiana, con media nula y varianza unidad. Es ligeramente diferente a (1.1) aunque se cree que están en la misma clase de universalidad y las simulaciones numéricas no han encontrado diferencias cualitativas entre los dos Hamiltonianos.

El tratamiento analítico del modelo EA es muy complicado, aunque se ha conseguido resolver en la aproximación de campo medio. Se puede demostrar que esta aproximación es equivalente a resolver el modelo de EA en dimensión infinita, modelo de Sherrington-Kirkpatrick (SK) [3,4].

2 Frustración y tipos de desorden

Ya hemos escrito que las características fundamentales de los vidrios de spin son la frustración y el desorden.

Comenzaremos describiendo la frustración. A menudo en nuestra vida encontramos situaciones que son mutuamente incompatibles y debemos elegir una de ellas. Llevada la analogía a los modelos de spines encontramos situaciones en las cuales la mitad de los vecinos de un spin le dicen que debe ser $+1$ y la otra mitad que debe de ser -1 . Esto lo podemos reescribir de la siguiente manera. Pensemos en tres situaciones A, B y C. Una situación A y B favorable dará lugar a una interacción $J_{AB} = 1$ mientras que si son incompatibles $J_{AB} = -1$, analogamente para J_{BC} y J_{AC} . Se dirá que el conjunto de estas tres situaciones es frustrada, es decir no podemos satisfacer simultáneamente A, B y C, si $J_{AB}J_{BC}J_{AC} = -1$. Un ejemplo de situación frustrada es la de la figura 3.

En un vidrio de spin la frustración se introduce en el momento que exigimos que, en promedio, haya tantas J 's positivas como negativas.

Podemos asociar intuitivamente el desorden con la existencia de impurezas. Aunque en una primera aproximación al sistema físico se tienda a eliminarlas, estas impurezas (“imperfecciones”) de los materiales pueden introducir comportamientos muy diferentes e interesantes [2].

Para exponer que es el desorden y su tratamiento imaginemos que tenemos un sistema con dos tipos de variables aleatorias: σ 's que están distribuidas con el peso de Boltzmann y variables J 's que están distribuidas mediante una distribución $p[J]$. En el desorden denominado “quenched” (congelado) los elementos del sistema descritos por las variables σ 's tienen tiempos de reacción mucho menores que los elementos del sistema descritos por las J 's, que

podemos denominar variables de control. Los vidrios de spin son un ejemplo de este tipo de desorden. Los spines (momentos magnéticos de los átomos magnéticos) cambian mucho más rápido que lo que cambian las posiciones de las impurezas, que dan lugar a las J 's.¹

Para finalizar esta sección describiremos el otro tipo de desorden, el desorden “annealed”. En esta situación las impurezas y los átomos base tienen tiempos de reacción comparables y por lo tanto se deben de tratar en pie de igualdad.

Antes de pasar a la siguiente sección es interesante remarcar que se puede tener desorden sin frustración (*e.g.* exigiendo las J 's aleatorias y positivas) y frustración sin desorden (por ejemplo en sistemas antiferromagnéticos –todas las J 's negativas– en una red triangular).

3 La solución del modelo SK

Usualmente en Mecánica Estadística (ME) es muy complicado, por no decir imposible, resolver analíticamente el modelo (es decir, calcular la función de partición). Esto se ha conseguido fundamentalmente en sistemas bidimensionales. Por ello se han desarrollado diferentes técnicas aproximadas para intentar obtener la máxima información de un modelo. Una de las más populares es la llamada aproximación de campo medio. Esta aproximación funciona especialmente bien en dimensiones altas mientras que suele fracasar en predecir el comportamiento del sistema a bajas dimensiones.

En ME se parte de un Hamiltoniano (función de energía, que puede contener interacciones a primeros vecinos, segundos, etc) y de un tipo de red (cúbica, cúbica centrada en caras, etc), donde viven los spines. Imaginemos que tenemos una interacción de primeros vecinos y una red cúbica tridimensional. En este caso cada átomo interacciona con sus 6 vecinos. Si decidimos que todos los átomos interaccionen con todos resulta que un átomo dado interacciona con un número de átomos igual al volumen del sistema, V . Imaginemos ahora que olvidamos que la red es tridimensional: tenemos un conjunto de V átomos que interaccionan todos con todos. Este sistema se comportará aproximadamente como si viviera en una red cúbica en una

¹Esta situación es análoga a la que ocurre en Física Molecular cuando es aplicable la aproximación de Born-Oppenheimer: los electrones, ligeros, serían descritos por las σ 's mientras los núcleos pesados darían lugar a las J 's.

dimensión $V/6$. Es decir, un sistema donde todos los átomos interactúan entre sí es equivalente a un sistema donde la interacción es a primeros vecinos pero la red es infinito dimensional (en el límite termodinámico).²

El modelo SK, que es la versión en dimensión infinita del modelo EA, se ha resuelto exactamente. Primero, y parcialmente, por Sherrington y Kirpatrick en 1975 y finalmente por G. Parisi en 1985.

La solución de Parisi presentaba rasgos diferentes a los encontrados anteriormente en sistemas magnéticos. Por encima de la temperatura crítica el vidrio de spin se encuentra en una fase paramagnética, mientras que por debajo de la citada temperatura crítica aparece la llamada fase vidrio de spin que es muy diferente de la fase ferromagnética. La fase vidrio de spin está compuesta por un número infinito de estados puros. La magnetización de esta fase es cero, así que es una fase más desordenada que la ferromagnética.

Por ejemplo, la fase ferromagnética está compuesta por solo dos estados puros: todos los spins hacia arriba o todos los spins hacia abajo.³

Sorprendentemente este número infinito de estados puros se organizaba en una forma ultramétrica, igual que los seres vivos en un árbol taxonómico. En la siguiente sección estudiaremos con más detalle este tipo de organización.

Para finalizar esta discusión diremos que en tres dimensiones las simulaciones numéricas indican que la fase de baja temperatura sigue cualitativamente las predicciones del campo medio [5].

4 El descubrimiento de la ultrametricidad

Ya hemos descrito que la fase vidrio de spin tiene un número infinito de estados puros que no están relacionados entre sí por ninguna transformación de simetría. Se puede demostrar que estos estados puros se organizan de forma ultramétrica. Esta es la primera vez que se ha introducido el concepto de espacios ultramétricos en Física [6].

²Esencialmente la aproximación de campo medio lo que hace es eliminar las fluctuaciones de una posición espacial a otra.

³Solo a $T = 0$ podemos identificar configuración y estado puro. En el modelo de Ising sin desorden, Figura 2, podemos identificar dos estados puros: uno con magnetización positiva y otro con magnetización negativa. El estado puro correspondiente a la magnetización positiva estará “compuesto” por todas las configuraciones que tengan una magnetización cercana o igual a la magnetización del mínimo (las fluctuaciones térmicas nos separan del mínimo).

Un espacio métrico es un espacio donde hemos definido una distancia, que obedece, entre otras propiedades, la desigualdad triangular:

$$d(A, B) \leq d(A, C) + d(B, C),$$

donde A, B y C son tres puntos cualesquiera del espacio. Los espacios ultramétricos verifican la desigualdad ultramétrica, aún mas fuerte que la triangular,

$$d(A, B) \leq \max[d(A, C), d(B, C)],$$

es decir en un espacio ultramétrico todos los triángulos que podemos dibujar o son equiláteros o son isósceles.

En un vidrio de spin a partir del solapamiento entre dos estados puros σ y μ , $q_{\sigma\mu}$, podemos definir una distancia llamada “distancia de Hamming”, como

$$d(\sigma, \mu) \equiv \frac{1}{2}(q_{EA} - q_{\sigma\mu}), \quad q_{\sigma\mu} \equiv \frac{1}{V} \sum_{i=1}^V m_i(\sigma)m_i(\mu),$$

donde es el promedio termodinámico y $m_i(\sigma)$ es la magnetización media local para la elección dada de los acoplamientos del estado σ . El solapamiento máximo se da cuando solapamos un estado consigo mismo y denotaremos este solapamiento como q_{EA} . Se puede ver que q_{EA} es independiente del estado puro elegido, que es el máximo solapamiento que puede tener el sistema y que es el parámetro de orden de la transición de fase.

Si reescribimos la desigualdad ultramétrica en términos de estos solapamientos, obtenemos

$$q_{AB} \geq \min(q_{AC}, q_{BC}),$$

para cualquier tripleta A, B y C de estados puros. Es decir tendremos dos solapamientos mas pequeños e iguales y un tercero mayor.

La aproximación de campo medio nos dice que un cuarto de los triángulos que podemos formar con estados puros son equiláteros y que el resto son isósceles.

Se puede formular una analogía entre vidrios de spin y la naturaleza. Se pueden identificar especies con estados puros e individuos pertenecientes a una especie con configuraciones pertenecientes a un estado puro.

Para definir una familia de estados puros, fijamos un q_F , y esto nos rompe el árbol taxonómico de los estados puros en ramas que denominaremos familias. Es decir, dos estados puros pertenecerán a una misma familia si

su solapamiento es mayor o igual que q_F . Análogamente podemos definir géneros, órdenes, etc (Figura 4).

Podemos preguntarnos si el árbol taxonómico de los seres vivos tiene las anteriores propiedades matemáticas que emergen de la organización de los vidrios de spin. De ser así podríamos decir que esta estructura de árbol no es una particularidad de los vidrios de spin (al menos de lo que emerge de la solución en dimensión infinita de los vidrios de spin).

En particular, Epstein y Ruelle comprobaron que un árbol taxonómico real (el de las plantas monocotiledoneas) seguía las predicciones cualitativas del árbol “taxonómico” de los vidrios de spin [7].

Conclusiones

Hemos descrito unos materiales magnéticos denominados vidrios de spin y que muchas de sus propiedades, que emergen de la solución de campo medio, pueden ser compartidas por sistemas que comparten entre si su gran complejidad tales como la organización de las especies biológicas. Otros ejemplos que no hemos podido desarrollar en este artículo pueden ser los problemas computacionalmente difíciles (problemas NP completos, como el problema del viajante) o el modelo de Hopfield de la memoria asociativa en mamíferos.

Obviamente la imagen que emerge de esta descripción es la existencia de un número muy grande de estados puros, con una cierta organización interna, acompañada de un número también muy grande de estados metaestables, aunque no quisiera que el lector perciba que todos los sistemas complejos siguen cualitativamente la descripción obtenida de los vidrios de spin en dimensión infinita y expuesta en este artículo. Lo cual no impide que las propiedades que han emergido en el estudio de estos sistemas sean suficientemente atractivas como para buscarlas en sistemas aún mas “complejos” que los vidrios de spin.

Agradecimientos

A Giorgio Parisi y a Enzo Marinari por las interesantes discusiones que hemos mantenido en los últimos años sobre este tema. Especialmente a María

del Carmen Espejo, Antonio Muñoz Sudupe, Juan Ruiz y a Daniel Stariolo por su atenta lectura del manuscrito así como por sus diversas e interesantes sugerencias que han conseguido que este manuscrito mejorase notablemente. Finalmente a A. F. Rañada por animarme a escribir este artículo.

Bibliografía

Algunas referencias generales, de carácter divulgativo, de Mecánica Estadística, sistemas desordenados y vidrios de spin:

1. D. Ruelle, *Azar y Caos*, Alianza Editorial. 1993.

2. J. P. Bouchaud, *Defectos de calidad en La importancia de ser imperfecto*, Investigación y Ciencia. Octubre 1994. pag 69.

Tres referencias bastante generales (aunque técnicas) de la teoría de campo medio y vidrios de spin son

3. G. Parisi, *Field Theory, disorder and simulations*, World Scientific, 1994.

4. M. Mezard, G. Parisi y M. A. Virasoro, *Spin Glass theory and beyond*, World Scientific, 1992.

Un estudio de la fase de baja temperatura de un vidrio de spin tridimensional

5. E. Marinari, G. Parisi, J. J. Ruiz-Lorenzo y F. Ritort, *Numerical Evidence for Spontaneously Broken Replica Symmetry in 3D Spin Glasses*, Phys. Rev. Lett. **76** (1996) 843.

Una exposición bastante clara de la ultrametricidad

6. R. Rammal, G. Toulouse y M. A. Virasoro, *Ultrametricity for physicist*, Rev. Mod. Phys. **58** (1986) 765.

La relación entre los vidrios de spin y la organización taxonómica de las monocotiledoneas puede verse en

7. H. Epein y D. Ruelle, *Test of a probabilistic model of evolutionary success*, Physics Reports **184** (1989) 289-292.

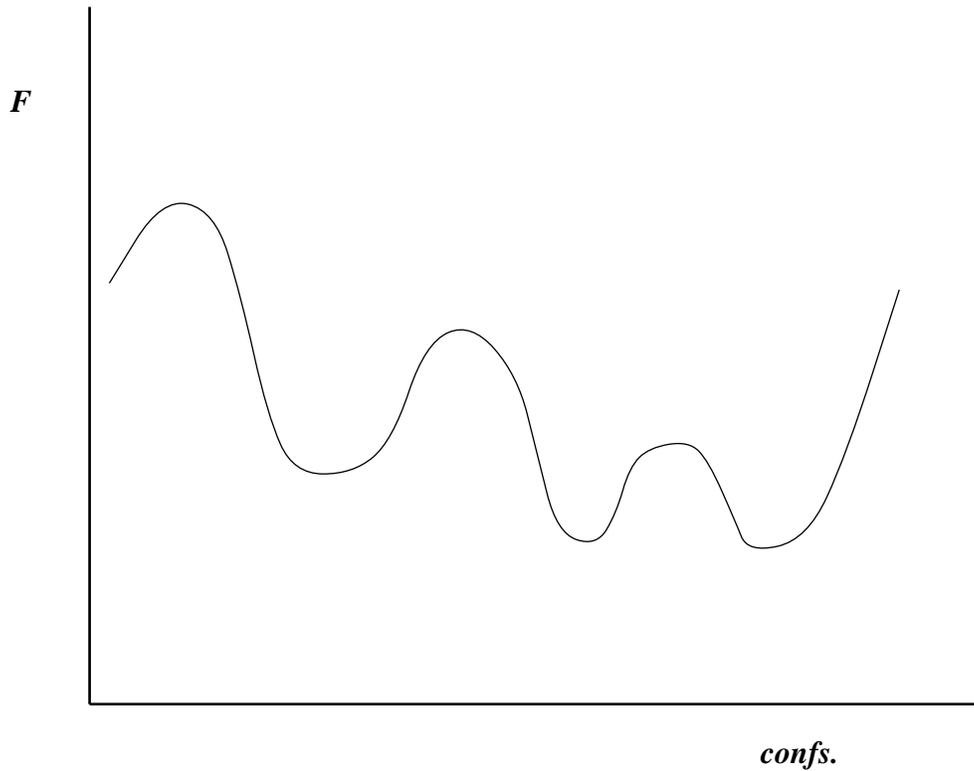


Figura 1: Energía libre como función de una variable que hemos denotado genéricamente como “confs” que pudiera corresponder a las posibles configuraciones que puede adoptar el sistema (en el ejemplo de las proteínas serían las posibles conformaciones de los ángulos entre los péptidos, obviamente la dimensión de este espacio es muy alta aunque lo hayamos representado simbólicamente como una línea recta). El estado de equilibrio vivirá en el mínimo absoluto de esta función. El resto de los mínimos relativos corresponden a estados metaestables (*e.g.* piénsese en el ejemplo típico del agua subenfriada o hielo sobrecalentado, aunque el agua no sea un sistema que pueda denominarse como complejo desde el punto de vista que estamos exponiendo en este artículo). En esta figura la energía libre de estos estados metaestables es muy similar a la del mínimo absoluto. Nótese también la gran cantidad de estos estados.

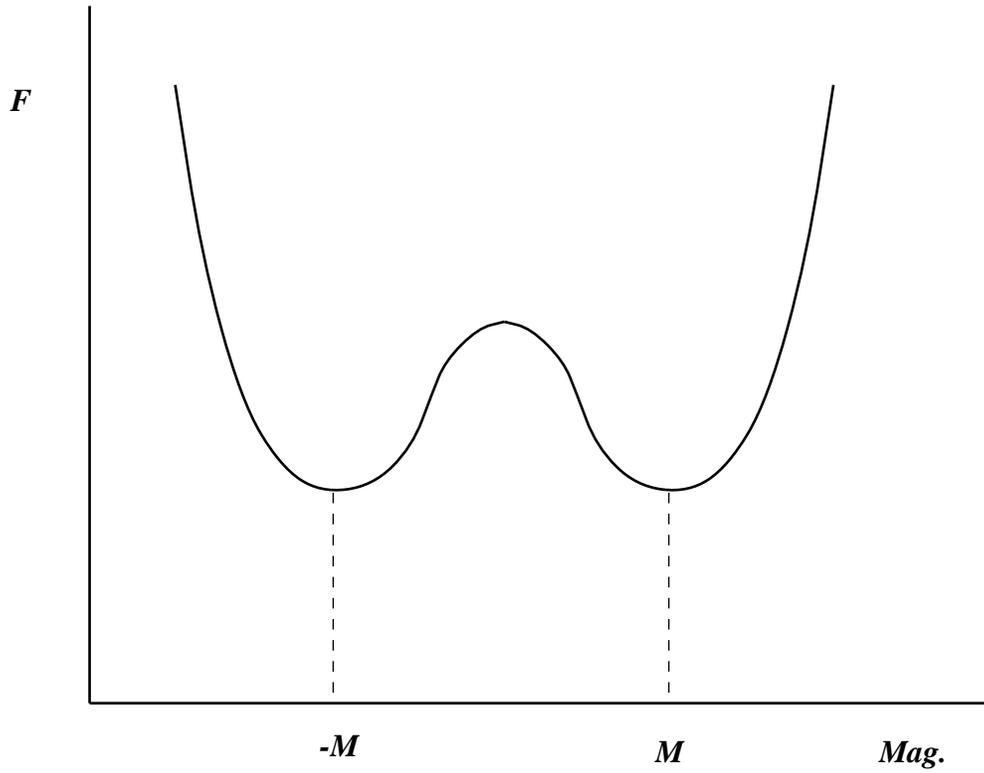


Figura 2: Energía libre como función de la magnetización que bien pudiera corresponder al modelo de Ising a una temperatura por debajo de la transición de fase. Este sistema presenta dos mínimos absolutos, uno con magnetización positiva y otro con magnetización negativa, y no presenta estados metaestables. Es el paradigma de lo que no es un sistema complejo.

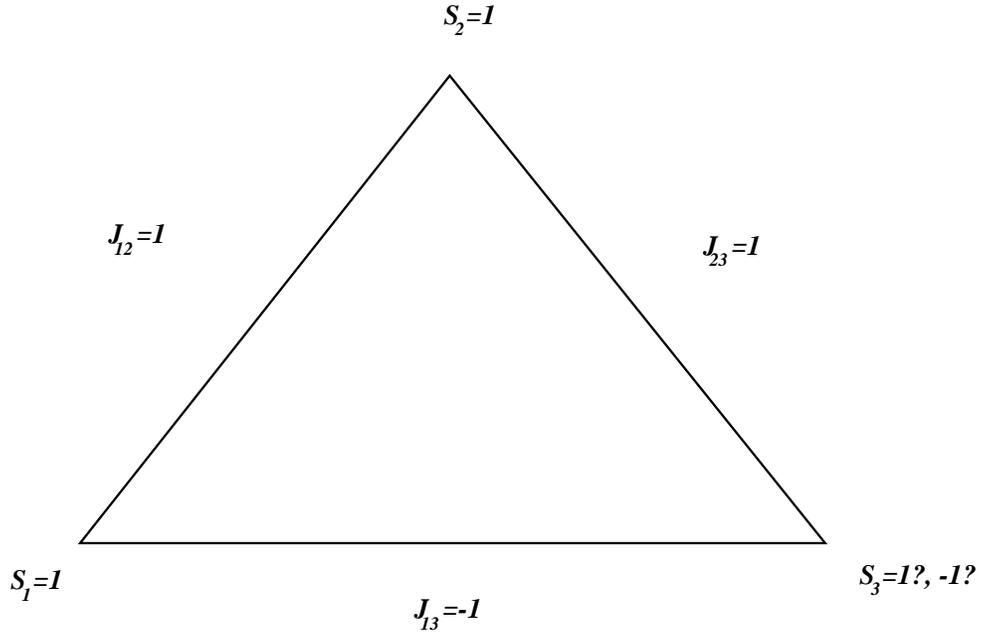


Figura 3: Triángulo frustrado, el producto de los tres acoplamientos (J_{12} , J_{13} y J_{23}) es negativo. El sistema intenta minimizar la suma de las tres energías de los lados (la energía del lado 1 – 2 es $-S_1J_{12}S_2$) comenzando con $S_1 = 1$. Dependiendo del sentido en que se recorre el triángulo, S_3 tomará valores 1 o -1 y en ambas situaciones se obtiene la misma energía total: frustración. En esta figura hemos usado S para denotar los spines en vez de σ .

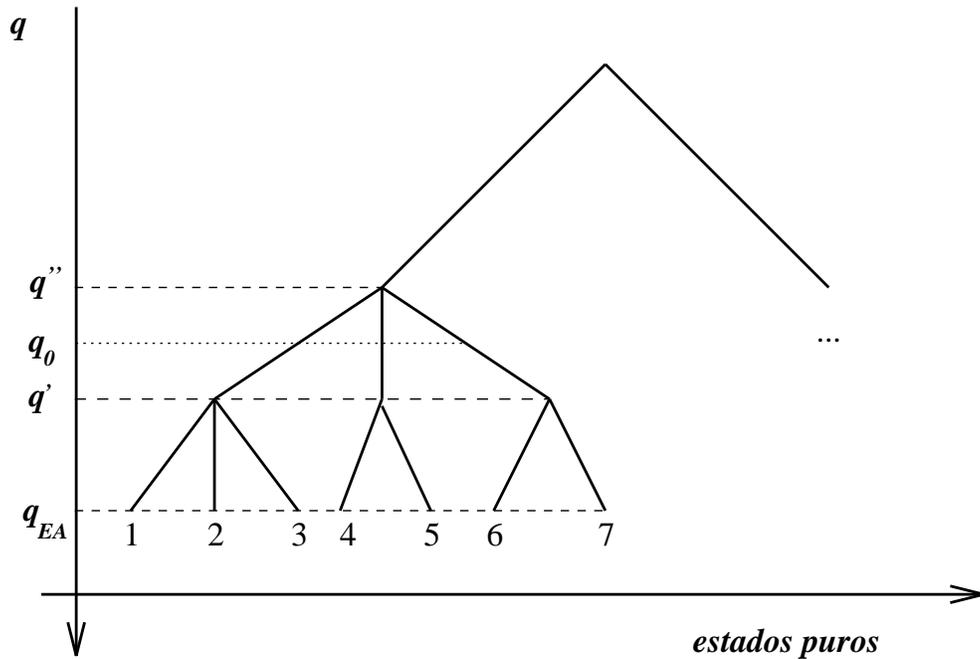


Figura 4: Organización ultramétrica de los estados puros de los vidrios de spin. Nótese que si decidimos usar q' para definir las familias tenemos que los estados puros se agrupan de la siguiente forma: (1,2,3), (4,5) y (6,7); tres familias. Si usamos q_0 en vez de q' para definir las familias obtenemos la misma distribución que con q' . Finalmente usando q'' para definir familias obtenemos que en la figura solo hay una familia. En la figura se observa que el solapamiento entre 1 y 2 es q' , mientras que el solapamiento entre 1 y 5 es $q'' < q_0$. En esta figura: $q_{EA} > q' > q_0 > q''$.