

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO  
INSTITUTO DE FÍSICA

## Modelo de vidro de spin esférico antiferromagnético

Danilo Barbosa Liarte

---

Dissertação de mestrado  
apresentada ao Instituto de Física  
da Universidade de São Paulo  
para a obtenção do título de Mestre em  
Ciências.

---

Orientador: Prof. Dr. Carlos Seihiti Orii Yokoi

### BANCA EXAMINADORA

Prof. Dr. Carlos Seihiti Orii Yokoi (IFUSP)

Prof. Dr. Walter Felipe Wreszinski (IFUSP)

Prof. Dr. Walter Karl Theumann (IFUFRGS)

São Paulo

2007



# Agradecimentos

- À minha família, em especial aos meus pais e irmãos, pelo apoio e incentivo.
- Ao Prof. Dr. Carlos Yokoi, pela orientação.
- A todos os amigos, dentro e fora da vida acadêmica.
- A vários dos professores, pelo auxílio na formação acadêmica.
- Ao CNPq, pelo apoio financeiro.



# Resumo

Neste trabalho investigamos as propriedades estáticas de um modelo de vidro de spin esférico antiferromagnético com interação de multi-spins por meio do método das réplicas. O objetivo consiste em modelar materiais antiferromagnéticos diluídos como  $\text{Fe}_x\text{Mg}_{1-x}\text{Cl}_2$  e compostos antiferromagnéticos mistos como  $\text{Fe}_x\text{Mn}_{1-x}\text{TiO}_3$  que apresentam evidências de comportamento característico da fase vidro de spin para um intervalo de valores de concentração  $x$ . Analisamos a solução réplica simétrica e a solução de Parisi com uma etapa de quebra de simetria entre réplicas, a qual espera-se que seja a solução mais geral para este modelo. Quatro fases são obtidas no diagrama de fases: paramagnética, vidro de spin, antiferromagnética e antiferromagnética com quebra de simetria ou fase mista. As linhas de transição podem ser contínuas ou descontínuas.



# Abstract

In this work we investigate the static properties of a multi-spin antiferromagnetic spherical spin-glass model using the replica method. The aim is to try to model diluted antiferromagnetic materials (*e.g.*  $\text{Fe}_x\text{Mg}_{1-x}\text{Cl}_2$ ) and mixed antiferromagnetic compounds (*e.g.*  $\text{Fe}_x\text{Mn}_{1-x}\text{TiO}_3$ ) that present evidences of a spin-glass behavior for certain range of  $x$  values. The replica-symmetric and the one-step replica-symmetry-breaking solution given by Parisi are analysed, the last one being expected to be the most general solution for this model. Four phases are found in the phase diagram: paramagnetic, spin glass, antiferromagnetic and mixed or glassy antiferromagnetic phase. The transition lines may be either continuous or discontinuous.





# Sumário

<b>1</b>	<b>Introdução</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Teoria de Campo Médio para Vidros de Spin</b>	<b>7</b>
2.1	Modelo de Sherrington e Kirkpatrick . . . . .	8
2.1.1	O Modelo . . . . .	8
2.1.2	O Método das Réplicas . . . . .	10
2.1.3	Solução Réplica-Simétrica . . . . .	13
2.1.4	Análise da Estabilidade da Solução Réplica Simétrica . . . . .	19
2.1.5	Solução de Parisi com uma Etapa de Quebra de Simetria entre Réplicas . . . . .	25
2.2	Modelo de Vidro de Spin Esférico Ferromagnético . . . . .	29
2.2.1	O Modelo . . . . .	31
2.2.2	O Método das Réplicas . . . . .	32
2.2.3	Solução Réplica Simétrica . . . . .	38
2.2.4	Solução com Quebra de Simetria . . . . .	39
2.2.5	Diagrama de Fases . . . . .	40
<b>3</b>	<b>Modelo de Vidro de Spin Esférico Antiferromagnético</b>	<b>45</b>
3.1	Introdução . . . . .	45
3.2	O Modelo . . . . .	50
3.3	O Método das Réplicas . . . . .	51
3.4	Solução Réplica Simétrica . . . . .	58
3.5	Solução de Parisi com uma Etapa de Quebra de Simetria entre Réplicas . . . . .	58

---

3.6 Diagrama de fases . . . . .	60
<b>4 Considerações Finais</b>	<b>67</b>
<b>Referências Bibliográficas</b>	<b>71</b>

# Lista de Figuras

- 2.1 Parâmetros de ordem do modelo de Sherrington e Kirkpatrick em função da temperatura a campo nulo para  $J_0 = 0$  (à esquerda) e  $J_0 = 1, 1$  (à direita). A linha contínua representa  $q^{1/2}$  e a linha pontilhada representa  $m$ . 16
- 2.2 Diagrama de fases ( $J_0 \times T$ ) do modelo de Sherrington e Kirkpatrick a campo nulo. As fases paramagnética, ferromagnética e vidro de spin são indicadas pelas letras P, F e SG respectivamente. . . . . 17
- 2.3 Susceptibilidade magnética a campo nulo em função da temperatura para  $J_0 = 0$ . . . . . 18
- 2.4 Limite de estabilidade da solução réplica-simétrica no diagrama de fases ( $J_0 \times T$ ) do modelo de Sherrington e Kirkpatrick a campo nulo. As fases paramagnética, ferromagnética e vidro de spin são indicadas pelas letras P, F e SG respectivamente. F' denota a região onde a solução simétrica ferromagnética é instável. A solução vidro de spin é instável em toda a sua região de existência. . . . . 25
- 2.5 Limite de estabilidade da solução réplica-simétrica no diagrama campo *versus* temperatura do modelo de Sherrington e Kirkpatrick. U e S denotam as regiões onde a solução simétrica é instável e estável, respectivamente. . . 26

- 2.6 Diagrama de fases a campo nulo ( $J_0 \times T$ ) do modelo de vidro de spin esférico ferromagnético com interação de multi-spins para  $p = 4$ . As letras P, F, SG e MX representam as fases paramagnética, ferromagnética, vidro de spin e mista, respectivamente. A linha tracejada é a linha de transição descontínua entre as soluções réplica simétrica e de Parisi com uma etapa de quebra de simetria entre réplicas, e corresponde à linha  $x = 1$ . As demais linhas não-contínuas são soluções com uma quebra de simetria entre réplicas para  $x=1/2, 1/4, 1/8$  e  $1/16$ . . . . . 42
- 3.1 Diagrama de fases do  $\text{Fe}_x\text{Mg}_{1-x}\text{Cl}_2$ , extraído de (Bertrand et al., 1982). O diagrama é proposto traçando-se a temperatura de Néel para  $0 \leq x \leq 0,45$ , a temperatura de congelamento para  $0,5 \leq x \leq 0,6$  e o provável ponto de transição entre as fases antiferromagnética e vidro de spin para  $x = 0,45$ . . . . . 46
- 3.2 Diagrama de fases campo versus temperatura do  $\text{Fe}_x\text{Mn}_{1-x}\text{TiO}_3$ , extraído de (Yoshizawa et al., 1994). . . . . 47
- 3.3 Diagrama de fases no plano ( $T, J_0$ ) de um antiferromagneto frustrado, extraído de (Korenblit e Shender, 1985). P, AF, F e SG indicam as fases paramagnética, antiferromagnética, ferromagnética e vidro de spin, respectivamente. . . . . 48
- 3.4 Diagrama de fases de um antiferromagneto frustrado sob a ação de um campo magnético externo para  $J_0 = 1, 7$ , extraído de (Fyodorov et al., 1987b). P, AF, SG e AFSG indicam as fases paramagnética, antiferromagnética, vidro de spin e mista respectivamente. . . . . 48
- 3.5 Diagramas de fase do REM na presença (gráfico à direita,  $J_0 = 1, 5$ ) e na ausência de campo magnético (gráfico à esquerda), extraído de (Almeida, 1998). PM, AFM, SG e MX indicam as fases paramagnética, antiferromagnética, vidro de spin e mista, respectivamente. . . . . 50

- 
- 3.6 Diagrama de fases a campo nulo do modelo de vidro de spin esférico antiferromagnético segundo a solução réplica simétrica. A letra P indica a região onde a fase é paramagnética. . . . . 61
- 3.7 Diagrama de fases a campo nulo do modelo de vidro de spin esférico antiferromagnético. A, P, SG e MX denotam as fases antiferromagnética, paramagnética, vidro de spin e mista respectivamente. . . . . 62
- 3.8 Diagrama de fases campo versus temperatura do modelo de vidro de spin esférico antiferromagnético. A, P, SG e MX denotam as fases antiferromagnética, paramagnética, vidro de spin e mista respectivamente. . . . . 64
- 3.9 Parâmetros de ordem versus temperatura para  $T = 0,5$ ,  $J_0 = 1,5$  e  $r = 3$ . . . . . 66



# Capítulo 1

## Introdução

A elucidação de propriedades macroscópicas de sistemas de muitos corpos, partindo de interações microscópicas fundamentais, é um dos grandes triunfos da mecânica estatística de equilíbrio de Boltzmann e Gibbs, e a tornou fonte de pesquisa perene desde o início do século XX. Entre os temas de principal interesse está a compreensão de estados condensados da matéria, que teve início com sistemas bastante simples, tais como o estudo das transições entre as fases líquida e gasosa em um fluido de Van der Waals e a teoria de campo médio de Weiss para o ferromagnetismo, e vem evoluindo no decorrer dos anos para incluir fenômenos com propriedades cada vez mais complexas e sutis. Considerados por alguns como o tipo de estado mais complexo encontrado em física do estado sólido, é possível afirmar que vidros de spin estão na fronteira deste desenvolvimento (Fischer e Hertz, 1991).

Arriscando pecar por reticência, vidros de spin podem ser entendidos como conjuntos de spins que exibem uma fase congelada a baixas temperaturas, sem entretanto apresentarem ordenamento magnético de longo alcance, como ocorre nos casos usuais de ferromagnetos e antiferromagnetos. Dois ingredientes são necessários e parecem estar por trás deste tipo de comportamento, a saber, frustração e desordem. Por “frustração” entenda-se a competição entre diferentes tipos de interação entre os momentos magnéticos, que pode ser tanto ferromagnética quanto antiferromagnética. O fato de o sistema ser desordenado implica que estas interações devem ser ao menos parcialmente aleatórias.

Baseados em resultados experimentais recentes (Canella e Mydosh, 1972) e nos ingre-

dientes citados no parágrafo anterior, Edwards e Anderson propõem em 1975 um modelo para vidros de spin fundado na seguinte hamiltoniana (Edwards e Anderson, 1975),

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j, \quad (1.1)$$

onde  $J_{ij}$  são variáveis aleatórias sujeitas a uma distribuição de probabilidades adequada e os spins estão distribuídos em todos os sítios de uma rede regular <sup>1</sup>. A impossibilidade em obter-se uma solução exata para o modelo de Edwards-Anderson com as técnicas disponíveis, assim como as várias incertezas na análise de Edwards e Anderson, dirigiram diversos estudos à busca por modelos onde espera-se que a teoria de campo médio seja exata. De fato, é conhecido que teorias de campo médio para um ferromagneto puro tornam-se exatas no limite termodinâmico desde que as interações de troca entre os spins sejam constantes, adequadamente escaladas com o número de spins do sistema e de alcance infinito (Stanley, 1971).

O modelo de Sherrington e Kirkpatrick (SK) (Sherrington e Kirkpatrick, 1975; Kirkpatrick e Sherrington, 1978), paradigma para modelos de campo médio para vidros de spin, é descrito por uma hamiltoniana similar à de Edwards-Anderson (equação (1.1)), mas com interações aleatórias entre todos os spins. Os spins são simplificados a spins do tipo Ising  $S_i = \pm 1$ , e  $J_{ij}$  são variáveis aleatórias independentes e identicamente distribuídas com média  $J_0/N$  e variância  $J^2/N$ . Teorias de campo de médio para vidros de spin, longe de limitarem-se ao objetivo inicial de explicar comportamentos singulares de certas ligas magnéticas, têm sido aplicadas a um sem-número de sistemas complexos, como problemas de otimização, biologia e processamento de informação, de forma que é possível afirmar que estas teorias possuem certa existência independente (Mezard, Parisi, e Virasoro, 1987; Nishimori, 2001).

A fase vidro de spin do modelo SK, descrita pela solução de Parisi com um número infinito de etapas de quebras de simetria entre réplicas (Parisi, 1979, 1980c, 1980b, 1980a), não é fácil de ser analisada analítica ou numericamente, tornando conveniente o estudo

---

<sup>1</sup>De fato, a hamiltoniana de Edwards-Anderson não aparece como em (1.1) em seu trabalho (Edwards e Anderson, 1975), e é possível que tenha sido escrita explicitamente pela primeira vez por Sherrington e Southern (Sherrington e Southern, 1975).



de modelos mais simples mas que retenham os aspectos essenciais do modelo SK <sup>2</sup>. Uma possibilidade consiste em generalizar a interação entre pares de spin para uma interação entre  $p > 2$  spins (Gross e Mezard, 1984), considerando a seguinte expressão para a hamiltoniana,

$$\mathcal{H} = - \sum_{1 \leq i_1 < \dots < i_p \leq N} J_{i_1 \dots i_p} S_{i_1} \dots S_{i_p}, \quad (1.2)$$

onde  $S_i = \pm 1$  e  $J_{i_1 \dots i_p}$  são variáveis aleatórias independentes e identicamente distribuídas com uma densidade gaussiana de probabilidades, com média e variância escolhidas adequadamente de forma a garantir a existência do limite termodinâmico e o limite  $p \rightarrow \infty$  é tomado no final (Derrida, 1980). Uma outra situação em que os cálculos tornam-se mais simples do ponto de vista analítico é obtida ao considerarmos variáveis de spin contínuas, isto é,  $-\infty < S_i < \infty$ , sujeitas ao vínculo esférico

$$\sum_{i=1}^N S_i^2 = N, \quad (1.3)$$

onde  $N$  é o número de spins do sistema. Este modelo é considerado mais simples porque a fase vidro de spin é descrita por apenas uma etapa de quebra de simetria entre réplicas até o zero absoluto para qualquer  $p > 2$  (Crisanti e Sommers, 1992). A versão em duas sub-redes deste modelo e suas conexões com vidros de spin antiferromagnéticos serão objeto de intenso estudo na presente dissertação.

De fato, diversas evidências experimentais têm apontado para a existência de uma fase vidro de spin em materiais antiferromagnéticos desordenados, sob certas circunstâncias. Entre elas estão experiências realizadas em antiferromagnetos diluídos, como  $\text{Fe}_x\text{Mg}_{1-x}\text{Cl}_2$  (Bertrand, Fert, Schmidt, Bensamka, e Legrand, 1982; Wong et al., 1985), e em compostos antiferromagnéticos mistos, como  $\text{Fe}_x\text{Mn}_{1-x}\text{TiO}_3$  (Yoshizawa, Mitsuda, Aruga, e Ito, 1987; Yoshizawa et al., 1994), que apresentam evidências de comportamento característico da fase vidro de spin para um intervalo de valores da concentração  $x$ . Versões em duas sub-redes do modelo SK têm sido propostas para explicar o ordenamento antiferromagnético e vidro de spin observado nesses sistemas (Korenblit e Shender, 1985; Fyodorov,

<sup>2</sup>O autor acredita, concordando com Onsager, Berlin e Kac (Berlin e Kac, 1952), que é sempre interessante estudar modelos que levam a resultados exatos e que exibem transições de fase, mesmo quando tais modelos estão longe de representar a realidade física do sistema, desde que possam esclarecer algumas das complexidades e dos mecanismos envolvidos nas transições.

Korenblit, e Shender, 1987b, 1987a; Takayama, 1988; Vieira, Nobre, e Yokoi, 2000). Os resultados teóricos concordam bem, ao menos qualitativamente, com o diagrama de fases experimental (campo-temperatura) para  $\text{Fe}_x\text{Mn}_{1-x}\text{TiO}_3$  (Yoshizawa et al., 1994), bem como a linha de instabilidade de Almeida-Thouless (Almeida e Thouless, 1978).

A proposta desta dissertação é analisar as propriedades estáticas de um modelo de vidro de spin esférico antiferromagnético com interação de multi-spins. O modelo consiste de  $2N$  spins contínuos,  $-\infty < S_i < \infty$ , divididos em dois subconjuntos  $A$  e  $B$ , de  $N$  spins cada. Esses subconjuntos correspondem às sub-redes dos modelos de curto alcance. A hamiltoniana é dada por,

$$\mathcal{H} = - \sum_{\substack{1 \leq i_1 < \dots < i_r \leq N \\ 1 \leq j_1 < \dots < j_r \leq N}} J_{i_1 \dots i_r j_1 \dots j_r} S_{i_1} \dots S_{i_r} \sigma_{j_1} \dots \sigma_{j_r} + \frac{J_0}{N} \sum_{i,j=1}^N S_i \sigma_j - H \sum_{i=1}^N (S_i + \sigma_i), \quad (1.4)$$

onde  $H$  é o campo magnético aplicado e  $J_0 > 0$  representa a interação antiferromagnética entre as sub-redes.  $J_{i_1 \dots i_r j_1 \dots j_r}$  representa a interação de conjuntos de  $r$  spins entre diferentes sub-redes. Essas interações são variáveis aleatórias gaussianas independentes e identicamente distribuídas com média zero e variância

$$\langle J_{i_1 \dots i_r j_1 \dots j_r}^2 \rangle = \frac{J^2 (r!)^2}{N^{2r-1}}, \quad (1.5)$$

onde o fator  $(r!)^2$  é escolhido por conveniência e a dependência em  $N$  foi escolhida de tal modo que a energia livre seja extensiva. A notação adotada é tal que  $S_i$  pertence à sub-rede  $A$  e  $\sigma_i$  à sub-rede  $B$ , para  $1 \leq i \leq N$ . Além disso, a existência de um limite de baixas temperaturas bem definido é assegurada pelos vínculos esféricos,

$$\sum_{i=1}^N S_i^2 = N, \quad \sum_{i=1}^N \sigma_i^2 = N. \quad (1.6)$$

No Capítulo 2, é apresentada uma breve revisão teórica do modelo de Sherrington e Kirkpatrick (Sherrington e Kirkpatrick, 1975; Kirkpatrick e Sherrington, 1978) e do modelo de vidro de spin esférico ferromagnético com interação de multi-spins (Crisanti e Sommers, 1992; Hertz, Sherrington, e Nieuwenhuizen, 1999). O capítulo é dividido em duas seções, sendo que os principais conceitos e definições tratados nesta dissertação são apresentados na primeira, sobre o modelo de Sherrington e Kirkpatrick. Na segunda seção, sobre o modelo de vidro de spin esférico ferromagnético, ênfase é dada aos aspectos mais

técnicos, objetivando a introdução das ferramentas necessárias à resolução do modelo de vidro de spin esférico antiferromagnético, a ser tratado no Capítulo 3. Em ambas as seções são analisadas as soluções réplica-simétrica e de Parisi com uma etapa de quebra de simetria entre réplicas.

O modelo de vidro de spin esférico antiferromagnético é introduzido e resolvido no Capítulo 3. Uma breve revisão experimental e teórica sobre vidros de spin antiferromagnéticos é apresentada na primeira seção, de forma que as demais seções são dedicadas à solução, aos resultados e às discussões relevantes deste modelo. Conclusões e perspectivas futuras são apresentadas no Capítulo 4.



## Capítulo 2

# Teoria de Campo Médio para Vidros de Spin

Teorias de campo médio têm servido como ponto de partida na análise teórica de diversos sistemas físicos, como fluidos e sistemas magnéticos, e têm sido amplamente aplicadas a estudos de transição de fase e fenômenos críticos. No caso do ferromagnetismo, estas teorias possuem duas características essenciais a qualquer boa aproximação; (a) elas são simples, (b) seus resultados concordam bem com os resultados experimentais (ao menos qualitativamente) (Binder e Young, 1986).

Entretanto, teorias de campo médio são consideradas “grosseiras” sob o ponto de vista fundamental, como observa-se por exemplo na aproximação de Bragg-Williams, na qual as flutuações nas funções de correlação são desprezadas (Salinas, 1997). Um outro tipo de aproximação de campo médio consiste em considerar um limite superior para a energia livre de Gibbs, determinado pela desigualdade de Peierls-Bogoliubov (Falk, 1970). Baseada em um princípio variacional, a energia livre aproximada é obtida a partir da minimização de um funcional, e os resultados obtidos são consistentes com os de uma teoria de campo médio.

É conhecido que teorias de campo médio para um ferromagneto puro tornam-se exatas no limite termodinâmico desde que as interações de troca entre os spins sejam constantes, adequadamente escaladas com o número de spins do sistema e de alcance infinito (Stanley, 1971). Neste capítulo, estudaremos situações análogas para sistemas que podem exibir

comportamentos ferromagnético e vidro de spin. Aplicaremos o método das réplicas ao modelo de Sherrington e Kirkpatrick (SK) (Sherrington e Kirkpatrick, 1975; Kirkpatrick e Sherrington, 1978) e ao modelo de vidro de spin esférico com interação de multi-spins (Crisanti e Sommers, 1992), dos quais analisaremos as soluções réplica-simétrica e de Parisi com uma etapa de quebra de simetria entre réplicas.

## 2.1 Modelo de Sherrington e Kirkpatrick

Em um artigo publicado em 1975, Edwards e Anderson introduzem um modelo para vidros de spin baseado em uma hamiltoniana do tipo Ising onde os spins encontram-se dispostos em uma rede regular e as interações de troca entre primeiros vizinhos são variáveis aleatórias sujeitas a uma distribuição de probabilidades adequada (Edwards e Anderson, 1975). Este modelo continua sem solução analítica hoje e mesmo simulações numéricas apresentam vários problemas em suas realizações. No mesmo ano, Sherrington e Kirkpatrick propuseram uma versão de campo médio para o modelo de Edwards e Anderson, na qual a interação entre primeiros vizinhos é estendida para uma interação de alcance infinito, adequadamente escalada com o tamanho do sistema de forma a garantir o limite termodinâmico (Sherrington e Kirkpatrick, 1975; Kirkpatrick e Sherrington, 1978).

### 2.1.1 O Modelo

O modelo de Sherrington e Kirkpatrick é um modelo de Ising com interações aleatórias de alcance infinito. A hamiltoniana é dada por,

$$\mathcal{H} = - \sum_{i < j} J_{ij} S_i S_j - H \sum_i S_i, \quad S_i = \pm 1, \quad (2.1)$$

onde as interações de troca aleatórias  $J_{ij}$  são identicamente distribuídas com média  $\langle J_{ij} \rangle$  e variância  $\sigma_J$ , obedecendo a uma distribuição gaussiana de probabilidades,

$$p(J_{ij}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_J}} \exp \left[ - \frac{(J_{ij} - \langle J_{ij} \rangle)^2}{2\sigma_J} \right], \quad (2.2)$$

com,

$$\langle J_{ij} \rangle = \frac{J_0}{N}, \quad \sigma_J = \frac{J^2}{N},$$

onde  $J_0$  e  $J$  são parâmetros intensivos, escolhidos desta forma de maneira que, a temperatura fixa, a energia total seja proporcional ao número de partículas  $N$  e a densidade de energia não dependa do número de spins.  $H$  é um campo magnético externo e a primeira soma é tomada sobre todos os pares de sítios.

É cabível analisar as seguintes questões: i) como calcular uma média sobre esta desordem? ii) como saber se esta média de fato corresponde aos resultados experimentais? Uma vez que estes versam sobre uma única amostra, com um dado conjunto de parâmetros de troca  $J_{ij}$ .

A resposta à primeira pergunta depende das flutuações nos parâmetros de troca. Uma vez que os parâmetros de troca dos sistemas de interesse variam em uma escala de tempo muito maior do que a dos spins, podemos calcular uma energia livre termodinâmica aplicando o formalismo padrão de mecânica estatística para um dado conjunto  $J_{ij}$  fixo.

Entretanto, não conhecemos os parâmetros  $J_{ij}$  *a priori*, mas conhecemos a sua distribuição de probabilidades. A energia livre do sistema é obtida tomando-se médias sobre a energia livre sobre os possíveis valores dos parâmetros de troca. Este tipo de tratamento é adequado a variáveis do tipo “quenched”, em oposição a desordem similar do tipo “annealed”, onde tomamos médias sobre a função de partição ao invés da energia livre.

É possível responder a segunda pergunta afirmando que, em geral, podemos tomar médias sobre grandezas extensivas. Grandezas que podem ser mediadas desta forma são chamadas auto-mediadas (*self-averaging quantities*). Brout, em um artigo publicado em 1959, fornece um argumento bastante simples para explicar o fato de que grandezas extensivas são auto-mediadas, (Brout, 1959).

O problema reside portanto em calcular a energia livre  $f$  segundo uma expressão do tipo,

$$f = \int p(J) f_J dJ,$$

onde  $f_J$  é a energia livre para um dado conjunto de parâmetros  $J_{ij}$  e a integração deve

ser efetuada sobre todos os  $J_{ij}$ . Para o modelo SK, temos,

$$-\beta f = -\beta \langle f_J \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{i<j} dJ_{ij} \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln \text{Tr} \exp \left[ \beta \left( \sum_{i<j} J_{ij} S_i S_j + H \sum_i S_i \right) \right] \\ \times \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_J}} \exp \left( -\frac{(J_{ij} - \langle J_{ij} \rangle)^2}{2\sigma_J} \right), \quad (2.3)$$

onde o traço implica uma soma sobre todos os valores de spin em cada sítio.

### 2.1.2 O Método das Réplicas

A integral acima é de difícil análise. Trata-se de uma integral sobre o logaritmo de uma soma de exponenciais cuja solução, longe de trivial, baseia-se em um método que tem sido debatido no decorrer dos anos, o método das réplicas, a ser descrito a seguir.

O cálculo da média sobre a desordem na função de partição, ao invés da energia livre, não só é factível, como é razoavelmente simples. A função de partição de um sistema de  $n$  réplicas independentes do sistema original é dada por,

$$Z^n = \text{Tr}_n \exp \left[ \beta \sum_{\alpha=1}^n \left( \sum_{i<j} J_{ij} S_i^\alpha S_j^\alpha + H \sum_i S_i^\alpha \right) \right],$$

onde  $1 \leq \alpha \leq n$  denotam as  $n$  réplicas do sistema original e o traço agora corresponde a uma soma sobre as variáveis de spin em cada réplica.

O método das réplicas consiste em considerar a seguinte identidade logarítmica,

$$\langle \ln Z \rangle = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{\ln \langle Z^n \rangle}{n},$$

calcular  $\langle Z^n \rangle$  para  $n$  inteiro, e obter a energia livre por meio de uma continuação analítica em  $n$ . As manipulações matemáticas que se seguem não são rigorosas em diversos pontos, doravante é impossível prosseguir sem o ponto de vista de um físico.

As integrais sobre a função de partição de  $n$  réplicas são gaussianas, de forma que é fácil verificar que,

$$\langle Z^n \rangle = \text{Tr}_n \exp \left[ \sum_{i<j} \left( \frac{\beta J_0}{N} \sum_{\alpha} S_i^\alpha S_j^\alpha + \frac{\beta^2 J^2}{2N} \sum_{\alpha, \beta} S_i^\alpha S_j^\alpha S_i^\beta S_j^\beta \right) + \beta H \sum_{\alpha, i} S_i^\alpha \right], \quad (2.4)$$



ou ainda,

$$\begin{aligned} \langle Z^n \rangle = & \exp\left(\frac{\beta^2 J^2}{4} nN + O(n)\right) \text{Tr}_n \exp \left\{ N \left[ \frac{\beta^2 J^2}{2N^2} \sum_{\alpha < \beta} \left( \sum_i S_i^\alpha S_i^\beta \right)^2 + \right. \right. \\ & \left. \left. \frac{\beta J_0}{2N^2} \sum_\alpha \left( \sum_i S_i^\alpha \right)^2 + \frac{\beta H}{N} \sum_\alpha \left( \sum_i S_i^\alpha \right) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (2.5)$$

Os termos  $\left(\sum_i S_i^\alpha S_i^\beta\right)^2$  e  $\left(\sum_i S_i^\alpha\right)^2$  podem ser linearizados através de sucessivas aplicações de identidades gaussianas,

$$\exp(\lambda a^2) = \sqrt{\frac{N}{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp\left(-\frac{N}{2}x^2 + \sqrt{2N}\lambda ax\right), \quad (2.6)$$

o que nos permite desacoplar a soma sobre as partículas <sup>1</sup>,

$$\begin{aligned} \langle Z^n \rangle = & \exp\left(\frac{\beta^2 J^2}{4} nN + O(n)\right) \int \left[ \prod_\alpha \left( \sqrt{\frac{N\beta J_0}{2\pi}} dm^\alpha \right) \prod_{\alpha < \beta} \left( \sqrt{\frac{N\beta^2 J^2}{2\pi}} dq^{\alpha\beta} \right) \right] \\ & \times \exp \left\{ -N \left[ \frac{\beta^2 J^2}{2} \sum_{\alpha < \beta} (q^{\alpha\beta})^2 + \frac{\beta J_0}{2} \sum_\alpha (m^\alpha)^2 \right] \right\} \\ & \times \text{Tr}_n \exp \left\{ \sum_i \left[ \beta^2 J^2 \sum_{\alpha < \beta} S_i^\alpha S_i^\beta q^{\alpha\beta} + \beta J_0 \sum_\alpha S_i^\alpha m^\alpha + \beta H \sum_\alpha S_i^\alpha \right] \right\}, \end{aligned} \quad (2.7)$$

onde as integrais em  $m^\alpha$  acima provêm de aplicações de identidades gaussianas tomando-se  $a = \sum_i S_i^\alpha$ ,  $\lambda = \beta J_0/2N$  e  $x = \sqrt{\beta J_0} m^\alpha$  em (2.6). Similarmente,  $a = \sum_i S_i^\alpha S_i^\beta$ ,  $\lambda = \beta^2 J^2/2N$  e  $x = \beta J q^{\alpha\beta}$  provêm as integrais em  $q^{\alpha\beta}$ . A soma sobre os spins se fatoriza sobre os sítios, levando a uma simplificação na expressão para o traço e à expressão,

$$\langle Z^n \rangle = \int \left[ \prod_\alpha \left( \sqrt{\frac{N\beta J_0}{2\pi}} dm^\alpha \right) \prod_{\alpha < \beta} \left( \sqrt{\frac{N\beta^2 J^2}{2\pi}} dq^{\alpha\beta} \right) \right] \exp [NG(m^\alpha, q^{\alpha\beta})], \quad (2.8)$$

com,

$$\begin{aligned} G(m^\alpha, q^{\alpha\beta}) = & -\frac{\beta^2 J^2}{2} \sum_{\alpha < \beta} (q^{\alpha\beta})^2 - \frac{\beta J_0}{2} \sum_\alpha (m^\alpha)^2 + \frac{\beta^2 J^2}{4} n \\ & + \ln \text{Tr} \exp \left[ \beta^2 J^2 \sum_{\alpha < \beta} S^\alpha S^\beta q^{\alpha\beta} + \beta J_0 \sum_\alpha S^\alpha m^\alpha + \beta H \sum_\alpha S^\alpha \right], \end{aligned} \quad (2.9)$$

onde o traço corresponde agora a uma soma sobre os valores de spin para cada réplica em um único sítio e desprezamos termos da ordem de  $n$  no argumento da exponencial

<sup>1</sup>Os limites de integração serão omitidos sempre que não houver possibilidade de engano, como em (2.7).

(note que, no limite termodinâmico, os termos que persistem são os termos de ordem  $nN$ ). O método das réplicas permite-nos portanto desacoplar a soma sobre os sítios, ao preço de um acoplamento sobre as réplicas. Poderia-se pensar que o método das réplicas descrito acima permitiria a solução de modelos com interação entre primeiros vizinhos, como o modelo de Edwards e Anderson, entretanto, infelizmente o truque de réplicas não é suficiente para desacoplar os sítios em tais modelos, e as manipulações que se seguem não seriam factíveis.

Uma vez que o argumento da função exponencial é proporcional ao número de partículas  $N$ , é possível obter a solução assintótica das integrais acima utilizando o método de Laplace (Bruijn, 1981), segundo o qual o valor da integral é dado pelo integrando em seu valor máximo, a menos de termos da ordem de  $N^{-1}$ . Obtemos então,

$$\langle Z^n \rangle = \exp [NG (m^\alpha, q^{\alpha\beta}) + O(\ln N)], \quad (2.10)$$

com  $m^\alpha$  e  $q^{\alpha\beta}$  escolhidos tal que  $G$  é dada pela equação (2.9).

A aplicação do método de Laplace pressupõe que a inversão na ordem dos limites em  $N$  e  $n$  é lícita, pois a princípio deveríamos calcular o limite  $n \rightarrow 0$  antes de tomar o limite no número de partículas  $N$ . Tal proposição, admitida nos trabalhos de Sherrington e Kirkpatrick, é analisada em um trabalho publicado em 1979 por van Hemmen e Palmer (Hemmen e Palmer, 1979), no qual concluem que, ao menos para o modelo SK, não existe problema em inverter a ordem dos limites.

A energia livre é dada então por,

$$-\beta f = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{G}{n} = \frac{\beta^2 J^2}{4} + \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{n} \left\{ -\frac{\beta^2 J^2}{2} \sum_{\alpha < \beta} (q^{\alpha\beta})^2 - \frac{\beta J_0}{2} \sum_{\alpha} (m^\alpha)^2 \right. \\ \left. + \ln \text{Tr} \exp \left[ \beta^2 J^2 \sum_{\alpha < \beta} S^\alpha S^\beta q^{\alpha\beta} + \beta J_0 \sum_{\alpha} S^\alpha m^\alpha + \beta H \sum_{\alpha} S^\alpha \right] \right\}, \quad (2.11)$$

com  $m^\alpha$  e  $q^{\alpha\beta}$  obtidas das condições de extremo,

$$\frac{\partial G}{\partial m^\alpha} = 0, \quad \frac{\partial G}{\partial q^{\alpha\beta}} = 0,$$

isto é,

$$-\beta^2 J^2 q^{\alpha\beta} + \frac{\text{Tr } \beta^2 J^2 S^\alpha S^\beta \exp(L)}{\text{Tr } \exp(L)} = 0 \quad \Rightarrow \quad q^{\alpha\beta} = \langle S^\alpha S^\beta \rangle_L, \quad (2.12)$$

$$-\beta J_0 m^\alpha + \frac{\text{Tr } \beta J_0 S^\alpha \exp(L)}{\text{Tr } \exp(L)} = 0 \quad \Rightarrow \quad m^\alpha = \langle S^\alpha \rangle_L, \quad (2.13)$$

onde  $\langle \cdots \rangle_L$  denota uma média com peso probabilístico  $\exp(L)$ ,  $L$  dado por,

$$L = \beta^2 J^2 \sum_{\alpha < \beta} S^\alpha S^\beta q^{\alpha\beta} + \beta J_0 \sum_{\alpha} S^\alpha m^\alpha + \beta H \sum_{\alpha} S^\alpha. \quad (2.14)$$

Para calcular o limite  $n \rightarrow 0$  é necessário considerarmos algum tipo de *Ansatz* sobre a estrutura de  $q^{\alpha\beta}$  e  $m^\alpha$ . Além disso, a introdução destas variáveis, apenas como uma abstrata manipulação algébrica, torna possível o cálculo da energia livre, sem permitir entretanto a análise termodinâmica do modelo, que só é possível se estas variáveis possuírem algum significado físico.

### 2.1.3 Solução Réplica-Simétrica

O *Ansatz* adotado por Sherrington e Kirkpatrick consiste em considerarmos réplicas simétricas, ou seja,  $q^{\alpha\beta}$  e  $m^\alpha$  são iguais a  $q$  e  $m$  respectivamente, para todo  $\alpha$  e  $\beta$ , satisfazendo as condições de extremo acima. Da equação (2.11), obtemos,

$$-\beta f = \frac{\beta^2 J^2}{4} (1 - q)^2 - \frac{\beta J_0}{2} m^2 + \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{n} \ln \text{Tr} \exp \left[ \frac{\beta^2 J^2}{2} q \left( \sum_{\alpha} S^\alpha \right)^2 + \beta J_0 m \sum_{\alpha} S^\alpha + \beta H \sum_{\alpha} S^\alpha \right], \quad (2.15)$$

de forma que podemos desacoplar o termo quadrático do argumento da exponencial aplicando novamente uma identidade gaussiana, obtendo para a segunda linha da equação (2.15),

$$\lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{n} \ln \int \frac{dz}{\sqrt{2\pi}} \exp \left( -\frac{z^2}{2} \right) \text{Tr} \exp \left[ (\beta J q^{1/2} z + \beta J_0 m + \beta H) \sum_{\alpha} S^\alpha \right], \quad (2.16)$$

ou ainda,

$$\int \frac{dz}{\sqrt{2\pi}} \exp \left( -\frac{z^2}{2} \right) \ln 2 \cosh \Xi, \quad (2.17)$$

com,

$$\Xi = \beta J q^{1/2} z + \beta J_0 m + \beta H,$$

onde em (2.16) a expressão para o traço se fatoriza sobre as réplicas, o traço em uma réplica resulta  $2 \cosh \Xi$  e o cálculo do limite é trivial. Obtemos então,

$$-\beta f = \frac{\beta^2 J^2}{4} (1 - q)^2 - \frac{\beta J_0}{2} m^2 + \int \frac{dz}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{z^2}{2}\right) \ln 2 \cosh \Xi. \quad (2.18)$$

Podemos obter  $q$  e  $m$  extremizando a energia livre a partir da equação acima ou tomando o limite  $n \rightarrow 0$  nas equações (2.13) e (2.12), para  $m^\alpha = m$  e  $q^{\alpha\beta} = q$ . A equação de estado para  $m$  resulta,

$$m = \int \frac{dz}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{z^2}{2}\right) \tanh \Xi, \quad (2.19)$$

e para  $q$ ,

$$\beta J q^{1/2} (1 - q) = \int \frac{dz}{\sqrt{2\pi}} z \exp\left(-\frac{z^2}{2}\right) \tanh \Xi, \quad (2.20)$$

ou seja,

$$q = \int \frac{dz}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{z^2}{2}\right) \tanh^2 \Xi, \quad (2.21)$$

onde obtemos (2.21) de (2.20) através de uma integração por partes.

O método das réplicas provê a energia livre em função das variáveis  $q$  e  $m$ , assim como equações de estado auto-consistentes relacionando estas grandezas. Entretanto, ainda não é claro o significado físico destas variáveis, que reconheceremos como os parâmetros de ordem do sistema. Para este fim, consideremos a seguinte quantidade,

$$\left\langle \frac{\text{Tr}_n S_i^\alpha S_i^\beta \exp\left(-\beta \sum_\gamma \mathcal{H}^\gamma\right)}{\text{Tr}_n \exp\left(-\beta \sum_\gamma \mathcal{H}^\gamma\right)} \right\rangle, \quad (2.22)$$

onde lembramos que a média  $\langle \dots \rangle$  corresponde à média gaussiana sobre a desordem e o traço corresponde a uma soma sobre os valores de spin em cada sítio e réplica do sistema. O denominador da quantidade acima é  $Z^n$ , que tende a um no limite  $n \rightarrow 0$ . O numerador é dado pela mesma expressão de  $\langle Z^n \rangle$  calculada em (2.4), inserindo  $S_i^\alpha S_i^\beta$  após o traço.

Procedendo-se de forma semelhante à anterior, obtemos então, ao invés de (2.7),

$$\begin{aligned} & \exp\left(\frac{\beta^2 J^2}{4} nN + O(n)\right) \int \left[ \prod_{\alpha} \left( \sqrt{\frac{N\beta J_0}{2\pi}} dm^{\alpha} \right) \prod_{\alpha < \beta} \left( \sqrt{\frac{N\beta^2 \tilde{J}^2}{2\pi}} dq^{\alpha\beta} \right) \right] \\ & \cdot \exp\left\{-N \left[ \frac{\beta^2 J^2}{2} \sum_{\alpha < \beta} (q^{\alpha\beta})^2 + \frac{\beta J_0}{2} \sum_{\alpha} (m^{\alpha})^2 \right]\right\} \\ & \cdot \text{Tr}_n S_i^{\alpha} S_i^{\beta} \exp\left\{\sum_i \left[ \beta^2 J^2 \sum_{\alpha < \beta} S_i^{\alpha} S_i^{\beta} q^{\alpha\beta} + \beta J_0 \sum_{\alpha} S_i^{\alpha} m^{\alpha} + \beta H \sum_{\alpha} S_i^{\alpha} \right]\right\}, \end{aligned} \quad (2.23)$$

de forma que o traço acima se fatoriza sobre as partículas, resultando,

$$(\text{Tr exp}(L))^{N-1} \text{Tr}(S^{\alpha} S^{\beta} \text{exp}(L)) = (\text{Tr exp}(L))^N \langle S^{\alpha} S^{\beta} \rangle_L, \quad (2.24)$$

onde o traço é tomado agora sobre as  $n$  réplicas para uma única partícula. Da aplicação do método de Laplace, obtemos,

$$\langle Z^n \rangle \langle S^{\alpha} S^{\beta} \rangle_L, \quad (2.25)$$

portanto, no limite  $n \rightarrow 0$ ,

$$\left\langle \frac{\text{Tr}_n S_i^{\alpha} S_i^{\beta} \exp\left(-\beta \sum_{\gamma} \mathcal{H}^{\gamma}\right)}{\text{Tr}_n \exp\left(-\beta \sum_{\gamma} \mathcal{H}^{\gamma}\right)} \right\rangle = \langle S^{\alpha} S^{\beta} \rangle_L = q^{\alpha\beta}. \quad (2.26)$$

Podemos ainda escrever a expressão acima da seguinte forma,

$$\begin{aligned} q^{\alpha\beta} &= \left\langle \frac{\text{Tr}_n S_i^{\alpha} S_i^{\beta} \exp\left(-\beta \sum_{\gamma} \mathcal{H}^{\gamma}\right)}{\text{Tr}_n \exp\left(-\beta \sum_{\gamma} \mathcal{H}^{\gamma}\right)} \right\rangle \\ &= \left\langle \frac{\text{Tr} S_i^{\alpha} \exp\left(-\beta \mathcal{H}^{\alpha}\right)}{\text{Tr} \exp\left(-\beta \mathcal{H}^{\alpha}\right)} \frac{\text{Tr} S_i^{\beta} \exp\left(-\beta \mathcal{H}^{\beta}\right)}{\text{Tr} \exp\left(-\beta \mathcal{H}^{\beta}\right)} \right\rangle = \langle \langle S_i \rangle_T^2 \rangle, \end{aligned} \quad (2.27)$$

onde consideramos *a priori* que as réplicas são indistinguíveis, e usamos o fato de que os traços no numerador e no denominador cancelam-se para todas as réplicas, exceto para  $\alpha$  e  $\beta$ . A média  $\langle \dots \rangle_T$  é a média térmica usual em mecânica estatística, cujo peso probabilístico é o fator de Boltzmann. Procedendo de forma similar à anterior, obtemos,

$$m^{\alpha} = \langle \langle S_i \rangle_T \rangle, \quad (2.28)$$

de forma que reconhecemos imediatamente o significado físico dos parâmetros de ordem  $m$  e  $q$  do sistema.

De fato, na fase paramagnética, as flutuações no spin em cada sítio, devidas às elevadas temperaturas, levam as médias térmicas a anularem-se, resultando portanto,  $m = 0$  e  $q = 0$ . Na fase ferromagnética, os spins encontram-se ordenados, orientados em posições de equilíbrio, tal que, em geral  $\langle S_i \rangle_T > 0$  para a maioria dos sítios, e portanto  $m \neq 0$  e  $q \neq 0$  (a escolha do sinal da desigualdade acima é arbitrária). Por fim, na fase vidro de spin os spins encontram-se congelados em posições de equilíbrio,  $\langle S_i \rangle_T \neq 0$ , embora não exista ordem de longo alcance, uma vez que a competição entre interações ferro e antiferromagnéticas pode levar a  $\langle S_i \rangle_T > 0$  ou  $\langle S_i \rangle_T < 0$ , dependendo do sítio considerado, de forma que em geral  $m = 0$ , embora  $q \neq 0$ .

São apresentadas na Figura 2.1 as curvas  $q^{1/2} \times T$  e  $m \times T$  para  $H$  fixo igual a zero,  $J_0 = 0$  e  $J_0 = 1, 1$ , obtidas da solução numérica das equações (2.19) e (2.21).

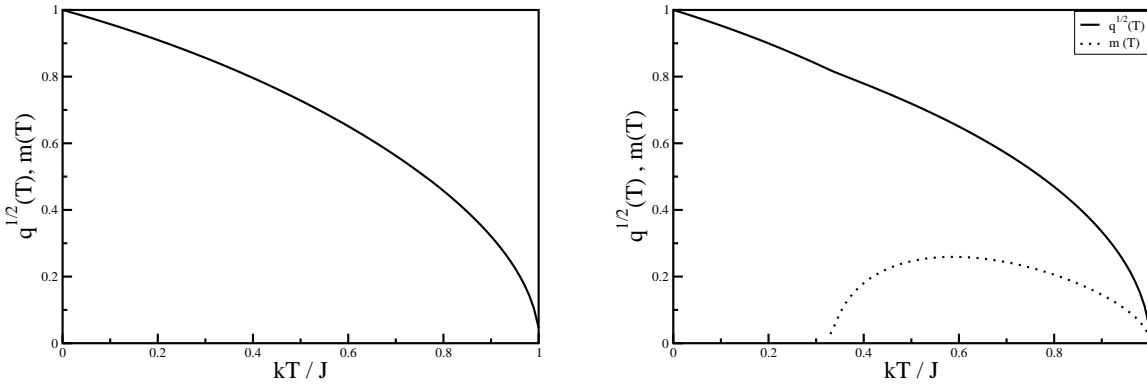


Figura 2.1: Parâmetros de ordem do modelo de Sherrington e Kirkpatrick em função da temperatura a campo nulo para  $J_0 = 0$  (à esquerda) e  $J_0 = 1, 1$  (à direita). A linha contínua representa  $q^{1/2}$  e a linha pontilhada representa  $m$ .

É possível obter o diagrama de fases resolvendo as equações (2.19) e (2.21) para dados  $T$ ,  $J_0$  e  $H$ . O problema é simples do ponto de vista numérico, haja vista a grande variedade de algoritmos disponíveis. Sob o ponto de vista analítico, é possível obter algumas curvas, válidas para alguns limites a serem tratados a seguir.

Considerando campo nulo, para a análise da linha de transição entre as fases vidro de spin e paramagnética assumimos  $m = 0$  e consideramos  $q$  pequeno, de forma que uma

expansão em série de potências do lado direito da equação (2.21) resulta,

$$q = \frac{y^2(1-y^2)}{2} + O(q^2), \quad (2.29)$$

onde  $y = 1/(\beta J)$ . A equação acima admite solução  $q > 0$  apenas para  $\beta J > 1$ , isto é,  $kT/J < 1$ . A linha  $kT/J = 1$  define portanto a transição entre as fases paramagnética (acima da linha) e vidro de spin (abaixo da linha), a saber, enquanto valer  $m = 0$ .

De forma semelhante, considerando  $m$  e  $q$  pequenos e combinando as equações (2.19) e (2.21) expandidas em séries de potências até a ordem  $O(m^4, q^2)$ , podemos escrever,

$$\frac{x^3}{y^3} m^2 \frac{(y^2 + 2)}{3} = (y^2 - 1)(x/y - 1) + O(m^4, q^2), \quad (2.30)$$

onde definimos  $x = J_0/J$  e  $y = kT/J$ . A solução  $m \neq 0$  só é válida para  $kT/J > 1$  e  $kT/J < J_0/J$  (a condição  $kT/J < 1$  e  $J_0/J > kT/J$  seria válida *a priori*, porém não tem sentido físico), ou seja, a linha  $kT/J = J_0/J$  define a transição entre as fases ferromagnética (abaixo da linha) e paramagnética (acima da linha), para  $kT/J > 1$ .

A linha de transição entre as fases ferromagnética e vidro de spin pode ser obtida através da solução numérica das equações (2.19) e (2.21). Na Figura 2.2, apresentamos o diagrama de fases do modelo SK para campo nulo. Os eixos são a temperatura e a interação ferromagnética  $J_0$ , adequadamente escalados com  $J$ .

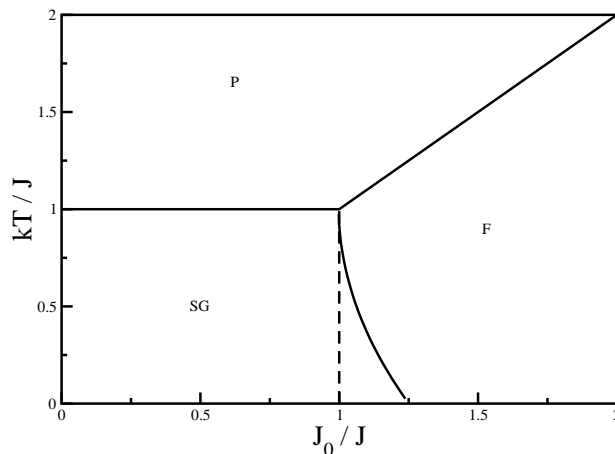


Figura 2.2: Diagrama de fases ( $J_0 \times T$ ) do modelo de Sherrington e Kirkpatrick a campo nulo. As fases paramagnética, ferromagnética e vidro de spin são indicadas pelas letras P, F e SG respectivamente.

A susceptibilidade magnética a campo nulo pode ser obtida facilmente de (2.19), e é

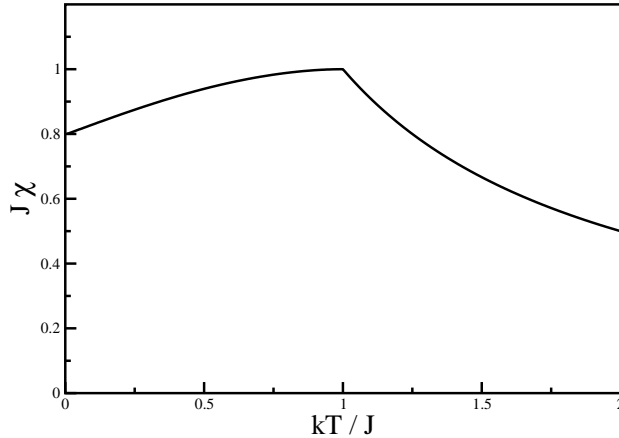


Figura 2.3: Susceptibilidade magnética a campo nulo em função da temperatura para  $J_0 = 0$ .

dada por,

$$\chi(T) = \left( \frac{\partial m}{\partial H} \right)_{H=0} = \frac{\beta(1-q)}{1 - \beta J_0(1-q)}. \quad (2.31)$$

Note-se que acima da temperatura crítica ( $q = m = 0$ ) a susceptibilidade obedece a lei de Curie-Weiss, sendo proporcional ao inverso de  $T - T_c$ , resultado válido para um ferromagneto ideal.

Na Figura 2.3 apresentamos o gráfico da susceptibilidade a campo nulo em função da temperatura para  $J_0 = 0$ . É possível identificar na temperatura crítica ( $kT_c/J = 1$ ) a presença de um “cusp”, marca registrada nos resultados experimentais para vidros de spin.

A energia interna por partícula pode ser obtida da expressão para a energia livre (2.18),

$$-\beta u = \frac{1}{2} [m^2 \beta J_0 + \beta^2 J^2 (1 - q^2)]. \quad (2.32)$$

Apesar da solução réplica-simétrica apresentar bons resultados no que concerne ao diagrama de fases e às curvas da susceptibilidade, a entropia tende a um valor negativo no limite de baixas temperaturas (um resultado absurdo para um sistema com número discreto de configurações). Este resultado foi apontado por Sherrington e Kirkpatrick como sendo devido à inversão na ordem dos limites em  $N$  e  $n$ , porém, uma análise cuidadosa da estabilidade da solução réplica-simétrica realizada por Almeida e Thouless (Almeida e Thouless, 1978), revela que apesar destas soluções serem de fato pontos estacionários,



elas são instáveis em toda a fase vidro de spin e em parte da fase ferromagnética. No mesmo trabalho, eles sugerem que o sistema deve quebrar a simetria entre réplicas, a fim de gerar soluções estáveis.

#### 2.1.4 Análise da Estabilidade da Solução Réplica Simétrica

A questão levantada por Almeida e Thouless em seu trabalho em 1978 é se a solução réplica-simétrica, adotada por Sherrington e Kirkpatrick, corresponde de fato a um máximo da integral calculada pelo método de Laplace, como espera-se que seja. O problema consiste em analisar a positividade da forma quadrática  $d^2(-G(m^\alpha, q^{\alpha\beta}))$ , indicando estabilidade se  $d^2(-G)$  for positiva-definida e instabilidade caso contrário.

Definindo  $y^{\alpha\beta} = \beta J q$  e  $x^\alpha = \sqrt{\beta J_0} m$ , obtemos, escrevendo,

$$x^\alpha = x + \epsilon^\alpha, y^{\alpha\beta} = y + \eta^{\alpha\beta}, \quad (2.33)$$

a seguinte expressão para  $d^2(-G)$ ,

$$\begin{aligned} d^2(-G) &= \sum_{\alpha,\beta} [\delta_{\alpha\beta} - \beta J_0 (\langle S^\alpha S^\beta \rangle_L - \langle S^\alpha \rangle_L \langle S^\beta \rangle_L)] \epsilon^\alpha \epsilon^\beta \\ &+ \sum_{(\alpha\beta),(\gamma\delta)} [\delta_{(\alpha\beta),(\gamma\delta)} - \beta^2 J^2 (\langle S^\alpha S^\beta S^\gamma S^\delta \rangle_L - \langle S^\alpha S^\beta \rangle_L \langle S^\gamma S^\delta \rangle_L)] \eta^{(\alpha\beta)} \eta^{(\gamma\delta)} \\ &+ \sum_{\delta,(\alpha\beta)} [\beta J \sqrt{\beta J_0} (\langle S^\alpha S^\beta S^\delta \rangle_L - \langle S^\alpha S^\beta \rangle_L \langle S^\delta \rangle_L)] \epsilon^\delta \eta^{(\alpha\beta)}, \end{aligned} \quad (2.34)$$

que é obtida a partir da expansão da equação (2.9) em segunda ordem em  $\epsilon^\alpha$  e  $\eta^{\alpha\beta}$ .

Para a solução réplica-simétrica corresponder a um máximo, a forma quadrática  $d^2(-G)$  deve ser positiva-definida, ou seja,  $d^2(-G)$  deve ser positiva quaisquer que sejam os valores de  $\epsilon^\alpha$  e  $\eta^{(\alpha\beta)}$ , o que ocorre desde que os autovalores da matriz dos coeficientes associados a esta forma quadrática sejam todos positivos. A matriz  $\mathbb{G}$  associada a esta forma

quadrática tem sete elementos distintos, a saber

$$G_{\alpha\alpha} = 1 - \beta J_0 (1 - \langle S^\alpha \rangle_L^2) = A, \quad (2.35)$$

$$G_{\alpha\beta} = \beta J_0 (\langle S^\alpha \rangle_L^2 - \langle S^\alpha S^\beta \rangle_L) = B, \quad (2.36)$$

$$G_{(\alpha\beta)(\alpha\beta)} = 1 - \beta J (1 - \langle S^\alpha S^\beta \rangle_L^2) = P, \quad (2.37)$$

$$G_{(\alpha\beta)(\alpha\gamma)} = \beta^2 J^2 (\langle S^\alpha S^\beta \rangle_L^2 - \langle S^\beta S^\gamma \rangle_L) = Q, \quad (2.38)$$

$$G_{(\alpha\beta)(\gamma\delta)} = \beta^2 J^2 (\langle S^\alpha S^\beta \rangle_L^2 - \langle S^\alpha S^\beta S^\gamma S^\delta \rangle_L) = R, \quad (2.39)$$

$$G_{\alpha,(\alpha\beta)} = \sqrt{\beta J_0} \beta J (\langle S^\alpha \rangle_L \langle S^\alpha S^\beta \rangle_L - \langle S^\beta \rangle_L) = C, \quad (2.40)$$

$$G_{\gamma,(\alpha\beta)} = \sqrt{\beta J_0} \beta J (\langle S^\alpha S^\beta \rangle_L \langle S^\gamma \rangle_L - \langle S^\alpha S^\beta S^\gamma \rangle_L) = D. \quad (2.41)$$

Para a solução réplica-simétrica, no limite  $n \rightarrow 0$ , é fácil demonstrar que,

$$t = \langle S^\alpha S^\beta S^\gamma \rangle_L = \int \frac{dz}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{z^2}{2}\right) \tanh^3 \Xi, \quad (2.42)$$

$$r = \langle S^\alpha S^\beta S^\gamma S^\delta \rangle_L = \int \frac{dz}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{z^2}{2}\right) \tanh^4 \Xi, \quad (2.43)$$

onde  $\Xi = \beta J q^{1/2} z + \beta J_0 m$ .

Na fase paramagnética,  $m = q = t = r = 0$ , assim,

$$A = 1 - \beta J_0,$$

$$P = 1 - \beta^2 J^2,$$

$$B = Q = C = D = 0,$$

de forma que a matriz é diagonal e a solução torna-se estável somente se  $J_0/kT > 1$  e  $J/kT > 1$ , condições que delimitam a fase paramagnética da solução de Sherrington e Kirkpatrick. A solução paramagnética é portanto estável na região delimitada acima, entretanto, é necessário obter os autovalores de  $\mathbb{G}$  para determinar a estabilidade das demais fases.

Calcularemos os autovalores de  $\mathbb{G}$  para  $n$  inteiro e então faremos uma continuação analítica para  $n \rightarrow 0$ .  $\mathbb{G}$  é diagonalizável uma vez que é real e simétrica. Existem portanto um total de  $n(n+1)/2$  autovetores linearmente independentes, que podemos

escrever na forma,

$$|\mu\rangle = \begin{pmatrix} \{\epsilon^\alpha\} \\ \{\eta^{(\alpha\beta)}\} \end{pmatrix}, \quad (2.44)$$

onde  $\{\epsilon^\alpha\}$  e  $\{\eta^{(\alpha\beta)}\}$  correspondem a vetores-coluna com dimensão  $n$  e  $n(n-1)/2$  respectivamente. Estes vetores devem satisfazer a equação de autovalores,

$$\mathbb{G} |\mu\rangle = \lambda |\mu\rangle.$$

Almeida e Thouless demonstraram que é possível gerar todo o espaço de autovetores linearmente independentes do sistema considerando apenas três classes distintas de simetria entre os índices dos autovetores. A vantagem está em escolher autovetores apropriados, que gerem todo o espaço de autovetores e que permitam-nos, através de argumentos de simetria, reduzir a dimensão da matriz a ser diagonalizada, simplificando desta forma o problema.

A primeira classe, correspondente a autovetores com simetria entre todos os índices,

$$\epsilon^\alpha = a, \quad \forall \alpha; \quad \eta^{(\alpha\beta)} = b, \quad \forall \alpha \text{ e } \beta, \quad (2.45)$$

leva-nos ao seguinte resultado para a equação de autovalores,

$$\begin{bmatrix} A + (n-1)B - \lambda & (n-1) + \frac{1}{2}(n-1)(n-2)D \\ 2C + (n-2)D & P + 2(n-2)Q + \frac{1}{2}(n-2)(n-3)R - \lambda \end{bmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = 0, \quad (2.46)$$

que admite solução não trivial para,

$$\begin{aligned} \lambda = \frac{1}{2} \left\{ [A + (n-1)B + P + 2(n-2)Q + \frac{1}{2}(n-2)(n-3)R] \right. \\ \left. \pm \left\{ [A + (n-1)B - P - 2(n-2)Q - \frac{1}{2}(n-2)(n-3)R]^2 \right. \right. \\ \left. \left. + 2(n-1)[2C + (n-2)D]^2 \right\}^{1/2} \right\}, \quad (2.47) \end{aligned}$$

autovalores não degenerados, uma vez que o subespaço gerado por esta classe de simetria tem dimensão 2.

A segunda classe de simetria consiste em considerarmos vetores do seguinte tipo,

$$\begin{aligned} \epsilon^\alpha = a, \quad \text{para } \alpha = \theta; \quad \epsilon^\alpha = b, \quad \text{para } \alpha \neq \theta \\ \eta^{(\alpha\beta)} = c, \quad \text{para } \alpha \text{ ou } \beta = \theta; \quad \eta^{(\alpha\beta)} = d, \quad \text{para } \alpha, \beta \neq \theta. \quad (2.48) \end{aligned}$$

Os vetores da primeira classe de simetria estão contidos na classe descrita acima, de forma que asseguramos ortogonalidade igualando o produto escalar entre eles a zero, assim,

$$a = (1 - n)b; \quad c = \left(1 - \frac{n}{2}\right)d. \quad (2.49)$$

Considerando a equação de autovalores para as linhas entre 1 e  $n$ , fazemos distinção entre duas situações: O produto correspondente a linha  $\theta$  e o produto correspondente às demais linhas. Para a linha  $\theta$  obtemos,

$$(A - B - \lambda)a + (n - 1)(C - D)c = 0, \quad (2.50)$$

relação que permanece válida para as demais linhas.

Para as linhas entre  $n + 1$  e  $(1/2)n(n + 1)$ , as duas situações (linhas correspondentes a  $\alpha$  ou  $\beta = \theta$  e demais linhas) levam novamente ao mesmo resultado, a saber,

$$\frac{(n - 2)}{(n - 1)}(C - D)a + [P + ((n - 4)Q - (n - 3)R - \lambda)]c = 0, \quad (2.51)$$

que, junto a (2.50), permite-nos obter a relação matricial,

$$\begin{bmatrix} (A - B - \lambda) & (n - 1)(C - D) \\ \frac{(n-2)}{(n-1)}(C - D) & [P + (n - 4)Q - (n - 3)R - \lambda] \end{bmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = 0, \quad (2.52)$$

admitindo solução não trivial para

$$\lambda = \frac{1}{2} \left\{ (A - B + P + (n - 4)Q - (n - 3)R) \pm [(A - B - P - (n - 4)Q + (n - 3)R)^2 + 4(n - 2)(C - D)^2]^{1/2} \right\}, \quad (2.53)$$

autovalores com degenerescência  $n - 1$ , uma vez que esta classe de simetria gera um subespaço invariante  $2n$ -dimensional,  $n$  para cada vetor  $\{\epsilon^\alpha\}$  e  $\{\eta^{(\alpha\beta)}\}$  correspondente às  $n$  escolhas possíveis de  $\theta$ , e que subtraímos os dois vetores obtidos da primeira classe de simetria.

A terceira classe de vetores é simétrica com respeito a todos os índices, exceto para dois deles,

$$\begin{aligned} \epsilon^\alpha &= a, \text{ para } \alpha = \theta \text{ ou } \nu; & \epsilon^\alpha &= b, \text{ para } \alpha \neq \theta, \nu; \\ \eta^{(\theta\nu)} &= c; & \eta^{(\theta\alpha)} &= \eta^{(\nu\alpha)} = d, \text{ para } \alpha \neq \theta, \nu; & \eta^{(\alpha\beta)} &= e, \text{ para } \alpha, \beta \neq \theta, \nu; \end{aligned} \quad (2.54)$$

de forma que obtemos as seguintes restrições, resultantes das relações de ortogonalidade com os vetores gerados pelas duas primeiras classes de autovetores,

$$a = b = 0; \quad c = (2 - n) d; \quad d = \frac{1}{2} (3 - n) e. \quad (2.55)$$

A partir da equação característica, observa-se a ocorrência de três situações distintas resultantes dos vetores definidos pelas equações (2.54) e (2.55): a linha correspondente a  $\eta^{(\theta\nu)}$ , a  $\eta^{(\theta\alpha)}$  e a  $\eta^{(\alpha\beta)}$ . Todas fornecem o mesmo autovalor, a saber,

$$\lambda = P - 2Q + R. \quad (2.56)$$

Esta terceira classe vetores gera todo o espaço de autovetores, uma vez que temos  $n(n-1)/2$  maneiras de escolher  $\theta$  e  $\nu$ , diferentes e não ordenados, e que a dimensão do subespaço invariante de vetores  $\{\epsilon^\alpha\}$  é  $n$ , assim,  $n(n+1)/2 = n + n(n-1)/2$  e o autovalor acima tem degenerescência  $n(n-3)/2$ .

Dos cinco autovalores distintos obtidos para  $n$  inteiro, apenas três deles permanecem diferentes entre si no limite  $n \rightarrow 0$  (autovalores correspondentes a autovetores com simetria entre todos os índices e com simetria entre todos os índices menos um são iguais neste limite), o que resulta no seguinte espectro de autovalores,

$$\lambda = \left( A - B + P - 4Q + 3R \pm \sqrt{(A - B - P + 4Q - 3R)^2 - 8(C - D)^2} \right) / 2, \quad (2.57)$$

$$\lambda = P - 2Q + R. \quad (2.58)$$

Dadas expressões analíticas para os autovalores da hessiana, (2.57) e (2.58), é possível, no mínimo, delimitar os limites de estabilidade da solução simétrica através de soluções numéricas das equações de estado (2.19) e (2.21). Sabemos de antemão que a solução réplica-simétrica é estável em toda a fase paramagnética. Além disso, não foi encontrada nenhuma região no diagrama de fases em que os autovalores dados por (2.57) sejam negativos, o que implica que a condição de estabilidade da solução simétrica está diretamente relacionada à condição de positividade do autovalor dado por (2.58).  $P$ ,  $Q$  e  $R$  podem ser escritos em termos da temperatura e das correlações entre 2 e 4 spins, que por sua vez podem ser escritos explicitamente em termos dos parâmetros de ordem  $m$  e  $q$ , de forma

que, após algumas manipulações algébricas, a condição de positividade resulta na seguinte desigualdade, a campo nulo,

$$\beta^2 J^2 > \int \frac{dz}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{z^2}{2}\right) \operatorname{sech}^4 [\beta (J q^{1/2} z + J_0 m)]. \quad (2.59)$$

que é violada em toda a fase vidro de spin, como é fácil perceber expandindo-se o lado direito de (2.59) para  $q$  pequeno, na região próxima a  $\beta J = 1$ ,

$$\left(\frac{kT}{J}\right)^2 > 1 - 2(\beta J)^2 q + 7(\beta J)^4 q^2 + O(q^3), \quad (2.60)$$

enquanto a expansão de (2.21) resulta,

$$\left(\frac{kT}{J}\right)^2 = 1 - 2(\beta J)^2 q + \frac{17}{3}(\beta J)^4 q^2 + O(q^3), \quad (2.61)$$

de onde observa-se que a desigualdade é violada por termos da ordem de  $q^2$ . A linha de estabilidade pode ser obtida tornando a desigualdade uma igualdade em (2.59), e resolvendo esta equação em conjunto com as equações (2.19) e (2.21).

Apresentamos a linha de Almeida e Thouless, como ficou conhecida a linha de estabilidade da solução réplica-simétrica, na Figura 2.4. Note que embora toda a região paramagnética seja estável, a fase vidro de spin é instável em todo o diagrama de fases, assim como parte da região ferromagnética.

Não existe transição de fase ordem-desordem para campos magnéticos não nulos, neste caso, a condição de estabilidade implica, para  $J_0 = 0$ ,

$$\left(\frac{kT}{J}\right)^2 > \int \frac{dz}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{z^2}{2}\right) \operatorname{sech}^4 [\beta (J q^{1/2} z + H)], \quad (2.62)$$

com,

$$q = \int \frac{dz}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{z^2}{2}\right) \tanh^2 [\beta (J q^{1/2} z + H)]. \quad (2.63)$$

Na Figura 2.5, apresentamos o diagrama de fases campo versus temperatura para  $J_0 = 0$ . Note que a solução simétrica torna-se instável no limite de baixas temperaturas qualquer que seja o valor do campo.

A violação na estabilidade da solução réplica-simétrica adotada por Sherrington e Kirkpatrick lançou uma luz sobre o problema da entropia negativa obtida no limite de baixas temperaturas, assim como sobre as discrepâncias com os resultados obtidos através de simulações numéricas. De fato, o sistema parece quebrar espontaneamente a simetria entre

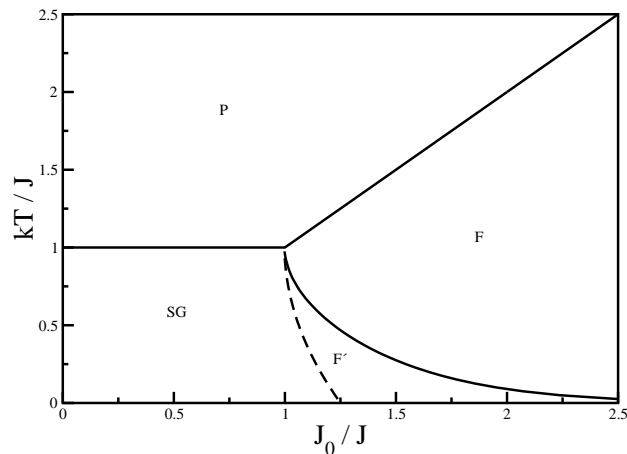


Figura 2.4: Limite de estabilidade da solução réplica-simétrica no diagrama de fases ( $J_0 \times T$ ) do modelo de Sherrington e Kirkpatrick a campo nulo. As fases paramagnética, ferromagnética e vidro de spin são indicadas pelas letras P, F e SG respectivamente. F' denota a região onde a solução simétrica ferromagnética é instável. A solução vidro de spin é instável em toda a sua região de existência.

réplicas de forma a produzir uma solução estável, com autovalores positivo-definidos em todo o diagrama de fases. O esquema de quebra de simetria de permutação entre réplicas<sup>2</sup> não é único, e tem sido debatido no decorrer dos anos.

### 2.1.5 Solução de Parisi com uma Etapa de Quebra de Simetria entre Réplicas

Diversos esquemas de quebra de simetria foram propostos com o intuito de obter soluções estáveis para o modelo SK que concordem bem com os resultados numéricos, veja-se por exemplo os trabalhos de Blandin *et al.* (Blandin, Gabay, e Garel, 1980) e Bray e Moore (Bray e Moore, 1978). Infelizmente, a solução obtida por Bray e Moore leva a uma energia livre infinita, e os resultados de Blandin *et al.* levam a uma solução instável assim como o é a solução réplica simétrica. Foi Parisi quem reconheceu os problemas relativos às soluções citadas acima e propôs algo que pode ser entendido com uma generalização das idéias de Blandin, através de um *Ansatz* sobre a estrutura de  $q^{\alpha\beta}$ , obtendo desta forma uma solução estável e que concorda bem com as soluções numéricas, *vide e.g.* (Parisi, 1979, 1980c, 1980b, 1980a).

<sup>2</sup>Falar em quebra de simetria entre réplicas é um abuso de linguagem, pois, conforme veremos na próxima seção, é a simetria de permutação entre réplicas, e não a simetria entre réplicas, que deve ser quebrada.

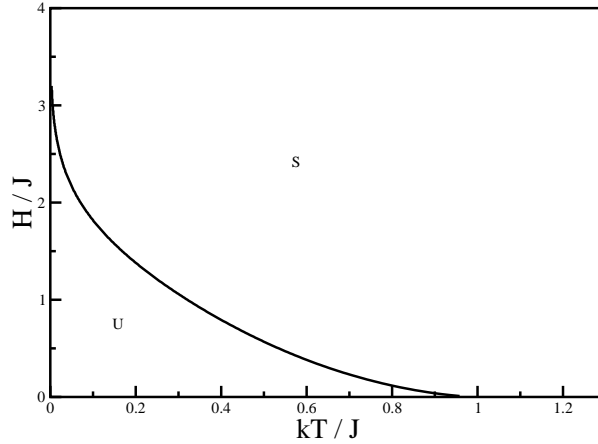


Figura 2.5: Limite de estabilidade da solução réplica-simétrica no diagrama campo *versus* temperatura do modelo de Sherrington e Kirkpatrick. U e S denotam as regiões onde a solução simétrica é instável e estável, respectivamente.

Apresentamos nesta seção a solução de Parisi com uma etapa de quebra de simetria entre réplicas (1RSB)<sup>3</sup>, que mesmo sendo instável em determinada região do diagrama de fases, leva a resultados que podem ser considerados “melhores” que os da solução réplica-simétrica. Além disso, alguns modelos têm como solução mais geral a 1RSB, justificando *a posteriori* sua apresentação para o modelo SK.

Por simplicidade, consideremos  $J = 1$ ,  $H = 0$  e  $J_0 = 0$ , de forma que, segundo a equação (2.11), podemos escrever a energia livre na forma,

$$-\beta f = \frac{\beta^2}{4} + \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{n} \left[ -\frac{\beta^2}{2} \sum_{\alpha < \beta} (q^{\alpha\beta})^2 + \ln \text{Tr} \exp \left( \beta^2 \sum_{\alpha < \beta} S^\alpha S^\beta q^{\alpha\beta} \right) \right]. \quad (2.64)$$

Embora não existam muitas indicações de como a simetria de permutação entre réplicas deve ser quebrada, Parisi apoiou-se em premissas simples para validar sua proposta e descartar as anteriores. Por exemplo, observa-se imediatamente a partir da equação (2.64) para a energia livre que as réplicas devem ser equivalentes, ou seja, para obtermos uma energia livre finita devemos ter

$$\frac{1}{n} \sum_{\alpha < \beta} (q^{\alpha\beta})^2$$

<sup>3</sup>A solução aceita para o modelo SK é a solução de Parisi com um número infinito de etapas de quebra de simetria entre réplicas ( $\infty$  RSB). Entretanto, infelizmente, esta solução é difícil de ser analisada analítica e numericamente.



finito, o que ocorre ao admitirmos,

$$\sum_{\alpha} (q^{\alpha\beta})^2 = \sum_{\alpha} (q^{\alpha\gamma})^2,$$

para todo  $\beta$  e  $\gamma$ . Além disto, a expressão para a susceptibilidade,

$$\chi = \beta \lim_{n \rightarrow 0} \left( 1 + \frac{1}{n} \sum_{\alpha < \beta} q^{\alpha\beta} \right), \quad (2.65)$$

sugere

$$\sum_{\alpha} q^{\alpha\beta} = \sum_{\alpha} q^{\alpha\gamma},$$

de maneira que é razoável considerarmos,

$$\sum_{\alpha} (q^{\alpha\beta})^k = \sum_{\alpha} (q^{\alpha\gamma})^k, \quad (2.66)$$

válido para qualquer potência  $k$  e para todo  $\beta$  e  $\gamma$ . Ou seja, grandezas envolvendo uma única réplica não devem depender da réplica escolhida <sup>4</sup>.

A solução de Parisi com uma etapa de quebra de simetria entre réplicas é obtida a partir do seguinte *Ansatz* sobre a estrutura de  $q^{\alpha\beta}$ ,

$$\begin{aligned} q^{\alpha\beta} &= p + t, & \text{se } I[\alpha/x] = I[\beta/x] \\ q^{\alpha\beta} &= p, & \text{se } I[\alpha/x] \neq I[\beta/x], \end{aligned} \quad (2.67)$$

onde  $x$  é tal que  $n/x$  é inteiro.  $I[z]$  é o menor inteiro maior ou igual a  $z$ . Podemos construir a matriz  $\mathbf{q}$  que representa  $q^{\alpha\beta}$  da seguinte forma: Dividimos a matriz em  $(n/x)^2$  blocos de dimensão  $x$ . Os elementos da diagonal principal devem ser nulos e aos elementos dentro dos  $n/x$  blocos diagonais atribuímos o valor  $p + t$ . O valor  $p$  é atribuído aos elementos externos aos blocos diagonais. Apresentamos abaixo um exemplo de uma matriz construída desta forma,

$$\mathbf{q} = \begin{pmatrix} 0 & q_1 & q_1 & q_0 & q_0 & q_0 \\ q_1 & 0 & q_1 & q_0 & q_0 & q_0 \\ q_1 & q_1 & 0 & q_0 & q_0 & q_0 \\ q_0 & q_0 & q_0 & 0 & q_1 & q_1 \\ q_0 & q_0 & q_0 & q_1 & 0 & q_1 \\ q_0 & q_0 & q_0 & q_1 & q_1 & 0 \end{pmatrix},$$

<sup>4</sup>Doravante usaremos os termos quebra de simetria entre réplicas e quebra de simetria de permutação entre réplicas indistintamente, embora seja o segundo o termo apropriado.

onde  $x = 3$  e  $n = 6$ , sendo  $q_0 = p$  e  $q_1 = p + t$ .

A energia livre do modelo SK segundo a solução de Parisi com 1RSB é então dada por,

$$-\beta f = \frac{\beta^2}{4} + \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{n} \left\{ -\frac{\beta^2}{4} n [(n-x)p^2 + (x-1)(p+t)^2] \right. \\ \left. + \ln \text{Tr} \exp \left( \frac{\beta^2}{2} \sum_{\alpha, \beta} S^\alpha S^\beta q^{\alpha\beta} \right) \right\}, \quad (2.68)$$

ou ainda, após algumas manipulações algébricas usuais,

$$-\beta f = \frac{\beta^2}{4} [1 + xp^2 + (1-x)(p+t)^2 - 2(p+t)] + \ln 2 + \int \frac{dz}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{z^2}{2}\right) \frac{1}{x} \\ \times \log \left\{ \int \frac{dy}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{y^2}{2}\right) [\cosh(\beta(zp^{1/2} + yt^{1/2}))]^x \right\}, \quad (2.69)$$

onde  $x$ ,  $p$  e  $t$  são tais que a energia livre é máxima. Haja vista que,

$$u = \frac{\partial(\beta f)}{\partial \beta},$$

obtemos, a partir da equação (2.69),

$$u = -\frac{\beta}{2} (1 - q^2), \quad (2.70)$$

com,

$$q^2 = xp^2 + (1-x)(p+t)^2. \quad (2.71)$$

A solução réplica-simétrica de Sherrington e Kirkpatrick fornece um valor negativo para a entropia no limite de baixas temperaturas. A saber, para  $T \rightarrow 0$ , a entropia e a energia livre assumem os seguintes valores,

$$S(0) \approx -0.16 \quad U(0) \approx -0.798,$$

enquanto a solução numérica das equações de estado para uma etapa de quebra de simetria entre réplicas resulta,

$$S(0) \approx -0.01 \quad U(0) \approx -0.765,$$

de forma que ao compararmos os resultados acima aos de simulações de Monte Carlo,

$$U(0) \approx -0.76,$$

percebemos que o *Ansatz* adotado por Parisi para 1RSB provê uma solução melhor que a solução réplica-simétrica. Parisi logo percebeu que a solução deste modelo deveria ter um

número infinito de etapas de quebras de simetria entre réplicas, somente no qual verifica-se o limite correto a baixas temperaturas, os resultados concordam bem com simulações numéricas e a solução é estável em todo o diagrama de fases.

## 2.2 Modelo de Vidro de Spin Esférico Ferromagnético

O modelo esférico foi introduzido e resolvido em 1952, em um artigo publicado por Berlin e Kac (Berlin e Kac, 1952), com a proposta de modelar materiais ferromagnéticos em um tipo de generalização do modelo de Ising. O modelo pode ser resolvido exatamente em uma ou mais dimensões, e apesar do seu caráter não realístico, seu estudo é interessante sob o ponto de vista teórico, permitindo um maior entendimento dos mecanismos envolvidos em transições de fase de sistemas magnéticos.

Neste modelo, são considerados  $N$  spins contínuos distribuídos em uma rede regular. A hamiltoniana é dada por

$$\mathcal{H} = -\frac{J}{kT} \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j,$$

onde  $J$  representa a energia de interação, a soma é sobre os sítios primeiros vizinhos e  $\sigma_i$  são variáveis escalares ( $-\infty < \sigma_i < \infty$ ) sujeitas ao vínculo esférico,

$$\sum_i \sigma_i^2 = N.$$

A semelhança com o modelo de Ising deve-se ao vínculo esférico e à relação  $\langle \sigma_j^2 \rangle = 1$ . Diferentemente do modelo gaussiano, proposto e resolvido no mesmo artigo, este modelo é bem definido para todas as temperaturas e apresenta uma transição de fase para dimensão maior que dois. Por ser um modelo de spins contínuos a entropia diverge no limite  $T \rightarrow 0$  e o calor específico não é nulo neste limite. Uma descrição geométrica do modelo pode ser pensada da seguinte forma: Imagine um sistema de dois spins do tipo Ising de maneira que cada estado do sistema possa ser descrito utilizando um sistema de eixos cartesianos caracterizado pelas variáveis  $\sigma_1$  e  $\sigma_2$ . Desta forma, os estados são representados por vértices de um quadrado de lado dois. No modelo esférico, qualquer ponto do círculo que circunscreve o quadrado é acessível ao sistema. Para um sistema de  $N$  spins a generalização é evidente, basta considerar cada ponto da hipersfera de raio

$N^{1/2}$  um estado acessível do sistema, o modelo de Ising seria obtido ao limitarmos os estados acessíveis aos vértices do hipercubo circunscrito pela hipersfera de raio  $N^{1/2}$ .

A função de partição canônica do modelo esférico é dada por,

$$Z = \int_{-\infty}^{\infty} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} d\sigma_1 \cdots d\sigma_N \exp \left( K \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j \right),$$

onde  $K = J/2kT$  e a integração está sujeita ao vínculo esférico,

$$\sum_i \sigma_i^2 = N,$$

que pode ser escrito explicitamente considerando-se a representação complexa da função delta de Dirac, isto é,

$$Z = \int \cdots \int d\sigma_1 \cdots d\sigma_N \int_{-i\infty}^{i\infty} \frac{ds}{2\pi i} \exp \left( sN - s \sum_i \sigma_i^2 + K \sum'_{i,j} \sigma_i \sigma_j \right). \quad (2.72)$$

É possível obter a solução invertendo-se a ordem de integração e diagonalizando a forma quadrática envolvendo as variáveis de spin. As integrais resultantes sobre as configurações são gaussianas de forma que o resultado final pode ser obtido através de uma aplicação cuidadosa do método do ponto de sela, haja vista o limite termodinâmico (Bruijn, 1981). Seguindo os procedimentos descritos acima, a energia livre  $\psi$ <sup>5</sup> fica dada por,

$$-\beta\psi = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln Z = \frac{1}{2} \ln \pi - \frac{1}{2} \ln 2K + 2Kz_s - \frac{1}{2} f(z_s), \quad (2.73)$$

onde  $f$  é dado por

$$f(z) = \left( \prod_{i=1}^d \int_0^{2\pi} \frac{d\omega_i}{2\pi} \right) \ln \left( z - \sum_{i=1}^d \cos \omega_i \right),$$

com  $d = 1, 2$  e  $3$ , para as redes unidimensional, quadrada e cúbica respectivamente.  $z_s$  é obtido da equação de ponto de sela,

$$4K = \left( \prod_{i=1}^d \int_0^{2\pi} \frac{d\omega_i}{2\pi} \right) \frac{1}{z_s - \sum_{i=1}^d \cos \omega_i}. \quad (2.74)$$

$\psi$  é uma função analítica de  $T$  para  $0 < T < \infty$  para as redes unidimensional e quadrada. Entretanto, para a rede cúbica, a equação de ponto de sela é dada por,

$$4K = \frac{1}{(2\pi)^3} \int \int \int d\omega_1 d\omega_2 d\omega_3 \frac{1}{z_s - \cos \omega_1 - \cos \omega_2 - \cos \omega_3}, \quad (2.75)$$

<sup>5</sup>A letra grega  $\psi$  denota energia livre por partícula apenas na presente seção, por conveniência. No restante da dissertação, adotar-se-á a letra  $f$  como padrão.

sendo que as integrais convergem para  $z_s = 3$ . Esta integral foi calculada por Watson, e o resultado fornece,

$$4K_c = 0,50546, \quad T_c = (3,9568) \frac{J}{k},$$

ou seja, a singularidade é atingida para uma temperatura finita, sugerindo a presença de uma transição de fase para  $d = 3$ . Berlin e Kac demonstraram que esta transição de fato corresponde a uma transição para um estado com magnetização espontânea, ou seja, ferromagnético.

### 2.2.1 O Modelo

A solução de Parisi com um número infinito de etapas de quebra de simetria entre réplicas para o modelo SK não é fácil de ser analisada analítica ou numericamente, de forma que é interessante estudar modelos mais simples que ainda retenham as características essenciais do modelo SK. Em um artigo publicado em 1980, Bernard Derrida propõe uma generalização da interação entre pares de spins do modelo SK para uma interação entre  $p$  spins. Derrida percebeu que a solução torna-se bastante simplificada no limite  $p \rightarrow \infty$ , recaindo em um outro modelo para sistemas desordenados, o modelo de energias aleatórias (REM) (Derrida, 1980). O modelo SK com interações de  $p$  spins foi estudado diretamente em 1984 em um artigo escrito por Gross e Mezard (Gross e Mezard, 1984).

Além do limite  $p \rightarrow \infty$ , uma outra situação em que o modelo SK torna-se mais simples é a versão esférica do modelo. O modelo de vidro de spin esférico, com interação entre pares de spin, já havia sido estudado por Kosterlitz *et al.* (Kosterlitz, Thouless, e Jones, 1976), em 1976. A generalização para o modelo de vidro de spin esférico com interação de multi-spins foi estudada alguns anos mais tarde, por Crisanti e Sommers (Crisanti e Sommers, 1992) (estudo das propriedades estáticas) e Crisanti *et al.* (Crisanti, Horner, e Sommers, 1993) (estudo das propriedades dinâmicas). Em 1999, Hertz *et al.* analisaram estática e dinâmica do mesmo modelo, com um termo de interação ferromagnética adicional (Hertz *et al.*, 1999). Um dos atrativos deste modelo repousa no fato de que a fase vidro de spin é descrita pela solução de Parisi com uma etapa de quebra de simetria entre réplicas

(1RSB) para qualquer  $p > 2$ .

O modelo consiste de um sistema de  $N$  spins contínuos, com interações aleatórias do tipo *quenched*. A hamiltoniana é dada por

$$\mathcal{H} = - \sum_{1 \leq i_1 < \dots < i_p \leq N} J_{i_1 \dots i_p} S_{i_1} \dots S_{i_p} - \frac{J_0}{N} \sum_{i < j} S_i S_j - H \sum_i S_i, \quad (2.76)$$

onde  $J_{i_1 \dots i_p}$  são variáveis aleatórias gaussianas independentes e identicamente distribuídas com média zero e variância

$$\langle J_{i_1 \dots i_p}^2 \rangle = \frac{J^2 p!}{2N^{p-1}},$$

onde a escala com  $N$  é escolhida apropriadamente de forma a garantir a existência do limite termodinâmico, com a energia livre extensiva. O fator  $p!/2$  é escolhido por conveniência. Os spins podem assumir valores contínuos no intervalo  $(-\infty, \infty)$  e obedecem ao vínculo esférico,

$$\sum_{i=1}^N S_i^2 = N,$$

que garante um limite de baixas temperaturas bem definido, *vide e.g.* (Berlin e Kac, 1952). A desordem é do tipo *quenched*, de forma que a energia livre é auto-mediada e pode ser escrita na forma,

$$f = \langle f_J \rangle_J = \prod_{1 \leq i_1 < \dots < i_p \leq N} \left[ \int \frac{dJ_{i_1 \dots i_p}}{\sqrt{2\pi \langle J_{i_1 \dots i_p}^2 \rangle}} \right] \exp \left( - \sum_{1 \leq i_1 < \dots < i_p \leq N} \frac{J_{i_1 \dots i_p}^2}{2 \langle J_{i_1 \dots i_p}^2 \rangle} \right) f_J, \quad (2.77)$$

onde  $f_J$  é dado por

$$-\beta f_J = \ln \text{Tr} \exp(-\beta \mathcal{H}), \quad (2.78)$$

e o traço é calculado sobre os spins contínuos, sujeitos ao vínculo esférico

$$\text{Tr}(\dots) = \prod_i \left[ \int_{-\infty}^{\infty} d\sigma_i \right] \delta \left( N - \sum_i \sigma_i^2 \right) (\dots).$$

### 2.2.2 O Método das Réplicas

Para calcularmos o valor médio em (2.77), devemos novamente recorrer ao método das réplicas, que consiste em considerarmos uma média do tipo *annealed* em um sistema de

$n$  réplicas idênticas e independentes do sistema,

$$\langle Z^n \rangle_J = \left\langle \text{Tr}_n \exp \left( -\beta \sum_{\alpha=1}^n \mathcal{H}_\alpha \right) \right\rangle_J, \quad (2.79)$$

de forma que a energia livre pode ser obtida através de uma continuação analítica de  $n$ , segundo a relação

$$-\beta f = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \lim_{n \rightarrow 0} \frac{\ln \langle Z^n \rangle_J}{n}. \quad (2.80)$$

Para a hamiltoniana definida em (2.76),  $\langle Z^n \rangle$  é dado por,

$$\begin{aligned} \langle Z^n \rangle_J &= \text{Tr}_n \exp \left\{ \beta \sum_{\alpha=1}^n \left[ \frac{J_0}{N} \sum_{i < j} S_i^\alpha S_j^\alpha + H \sum_i S_i^\alpha \right] \right\} \prod_{1 \leq i_1 < \dots < i_p \leq N} \\ &\times \left[ \int \frac{dJ_{i_1 \dots i_p}}{\sqrt{2\pi \langle J_{i_1 \dots i_p}^2 \rangle}} \exp \left( -\frac{J_{i_1 \dots i_p}^2}{2 \langle J_{i_1 \dots i_p}^2 \rangle} + \beta J_{i_1 \dots i_p} \sum_{\alpha} S_{i_1}^\alpha \dots S_{i_p}^\alpha \right) \right], \end{aligned} \quad (2.81)$$

onde o traço é calculado sobre os spins das  $n$  réplicas do sistema. As integrais sobre  $J_{i_1 \dots i_p}$  são gaussianas e podem ser calculadas facilmente, resultando,

$$\begin{aligned} \langle Z^n \rangle_J &= \text{Tr}_n \exp \left[ \beta \sum_{\alpha=1}^n \left( \frac{J_0}{N} \sum_{i < j} S_i^\alpha S_j^\alpha + H \sum_i S_i^\alpha \right) \right. \\ &\left. + \frac{\beta^2 J^2 p! N}{4N^p} \sum_{1 \leq i_1 < \dots < i_p \leq N} \left( \sum_{\alpha, \beta} S_{i_1}^\alpha S_{i_1}^\beta \dots S_{i_p}^\alpha S_{i_p}^\beta \right) \right], \end{aligned} \quad (2.82)$$

ou ainda,

$$\begin{aligned} \langle Z^n \rangle_J &= \text{Tr}_n \exp \left[ \beta \sum_{\alpha=1}^n \left( \frac{J_0}{N} \sum_{i < j} S_i^\alpha S_j^\alpha + H \sum_i S_i^\alpha \right) \right. \\ &\left. + \frac{\beta^2 J^2 N}{4} \sum_{\alpha, \beta} \left( \frac{\sum_i S_i^\alpha S_i^\beta}{N} \right)^p \right], \end{aligned} \quad (2.83)$$

onde foi usada a relação,

$$\sum_{i_1, \dots, i_p} = p! \sum_{i_1 < \dots < i_p} + \frac{p(p-1)}{2} \sum_{i_1, i_1 \neq i_3, \dots, i_p} + \dots, \quad (2.84)$$

sendo que o termo  $p!$  na primeira soma do lado direito corresponde às possíveis permutações de  $p$  elementos que não estão presentes na soma ordenada. A segunda soma no lado direito da equação é uma soma sobre os termos com dois índices iguais, de maneira que o termo  $p(p-1)/2$  provêm do número de pares possíveis mantidos iguais durante

a soma. Note que a soma irrestrita possui  $N^p$  termos, a primeira soma do lado direito  $N(N-1)(N-2)\cdots(N-p+1)$  termos e a segunda soma  $N(N-1)\cdots(N-p+2)$  termos. No limite termodinâmico, o primeiro termo é da ordem de  $N^p$ , o segundo da ordem  $N^p/N$  e assim por diante. Portanto, com um pouco de reflexão vemos que a equação,

$$\sum_{i_1, \dots, i_p} = p! \sum_{i_1 < \dots < i_p}, \quad (2.85)$$

está correta desprezando-se termos de ordem  $N^{-1}$ .

Utilizando o vínculo esférico e desprezando termos de ordem  $N^{-1}$ , é possível mostrar que,

$$\begin{aligned} \langle Z^n \rangle_J = \text{Tr}_n \exp \left\{ \frac{\beta J_0}{2N} \sum_{\alpha=1}^n \left( \sum_i S_i^\alpha \right)^2 + \beta H \sum_{\alpha, i} S_i^\alpha \right. \\ \left. + \frac{\beta^2 J^2 N}{4} \sum_{\alpha, \beta} \left( \frac{\sum_i S_i^\alpha S_i^\beta}{N} \right)^p \right\}. \end{aligned} \quad (2.86)$$

A soma sobre  $S_i^\alpha$  no termo de interação ferromagnética pode ser linearizada através de aplicações de identidades gaussianas,

$$\exp \left[ \frac{\beta J_0}{2N} \left( \sum_i S_i^\alpha \right)^2 \right] = \sqrt{\frac{N\beta J_0}{2\pi}} \int dm^\alpha \exp \left( -\frac{1}{2} N\beta J_0 m^{\alpha 2} + \beta J_0 m^\alpha \sum_i S_i^\alpha \right),$$

resultando portanto,

$$\begin{aligned} \langle Z^n \rangle_J = \int \left( \prod_\alpha \sqrt{\frac{N\beta J_0}{2\pi}} dm^\alpha \right) \exp \left( -\frac{1}{2} N\beta J_0 \sum_\alpha m^{\alpha 2} \right) \\ \times \text{Tr}_n \exp \left\{ \sum_\alpha (\beta J_0 m^\alpha + \beta H) \sum_i S_i^\alpha + \frac{\beta^2 J^2 N}{4} \sum_{\alpha, \beta} \left( \frac{\sum_i S_i^\alpha S_i^\beta}{N} \right)^p \right\}. \end{aligned} \quad (2.87)$$

O problema agora reside em simplificarmos o termo  $((1/N) \sum_i S_i^\alpha S_i^\beta)^p$ . Para isto, vamos introduzir a função de acoplamento entre réplicas,  $q_{\alpha\beta}$ , definida por,

$$q^{\alpha\beta} = \frac{1}{N} \sum_i S_i^\alpha S_i^\beta. \quad (2.88)$$

$\mathbf{q}$  é simétrica e possui os elementos diagonais iguais a um, devido ao vínculo esférico. Além disso, é fácil verificar que  $\mathbf{q}$  é positiva semi-definida e que seus elementos pertencem ao intervalo  $[-1, 1]$ . De fato, uma matriz  $\mathbb{A}$  é positiva semi-definida se, para todo vetor  $\mathbf{x}$  não nulo, valer

$$\mathbf{x}^\dagger \mathbb{A} \mathbf{x} \geq 0.$$



Verificamos facilmente que  $\mathbf{q}$  satisfaz a desigualdade acima,

$$\begin{aligned} \mathbf{x}^\dagger \mathbf{q} \mathbf{x} &= \sum_{\alpha} x^{\alpha} (\mathbf{q} \mathbf{x})^{\alpha} = \sum_{\alpha} x^{\alpha} \sum_{\beta} q^{\alpha\beta} x^{\beta} = \sum_{\alpha,\beta} \frac{1}{N} \sum_i S_i^{\alpha} S_i^{\beta} x^{\alpha} x^{\beta} \\ &= \sum_i \frac{1}{N} \left( \sum_{\alpha} S_i^{\alpha} x^{\alpha} \right) \left( \sum_{\beta} S_i^{\beta} x^{\beta} \right) = \sum_i \frac{1}{N} \left( \sum_{\alpha} S_i^{\alpha} x^{\alpha} \right)^2 \geq 0, \end{aligned} \quad (2.89)$$

como queríamos demonstrar. Além disso, desde que  $q^{\alpha\alpha} = 1$ ,

$$\sum_{\alpha,\beta} x^{\alpha} q^{\alpha\beta} x^{\beta} = \sum_{\alpha} x^{\alpha 2} + 2 \sum_{\alpha < \beta} q^{\alpha\beta} x^{\alpha} x^{\beta} \geq 0,$$

deve valer para qualquer vetor  $\mathbf{x}$  não nulo. Escolhendo,

$$x^{\alpha} = x \delta^{\alpha\beta} + y \delta^{\alpha\gamma},$$

é possível escrever,

$$(x + yq^{\alpha\beta})^2 + (1 - q^{\rho\gamma})y^2 \geq 0,$$

logo,

$$|q^{\alpha\beta}| \leq 1,$$

ou seja, os elementos de  $\mathbf{q}$  pertencem ao intervalo  $[-1, 1]$ , como queríamos demonstrar.

O traço sobre os spins pode ser calculado através da aplicação das identidades

$$1 = \int_{\mathbf{q}>0} \prod_{\alpha<\beta} dq^{\alpha\beta} \int_{-i\infty}^{i\infty} \prod_{\alpha<\beta} \left( \frac{N}{2\pi i} d\lambda^{\alpha\beta} \right) \exp \left[ -\frac{1}{2} \sum_{\alpha \neq \beta} \lambda^{\alpha\beta} \left( Nq^{\alpha\beta} - \sum_i S_i^{\alpha} S_i^{\beta} \right) \right], \quad (2.90)$$

$$\delta \left( N - \sum_i S_i^{\alpha 2} \right) = \int_{-i\infty}^{i\infty} \left( \frac{1}{4\pi i} d\lambda^{\alpha\alpha} \right) \exp \left[ -\frac{1}{2} \sum_{\alpha} \lambda^{\alpha\alpha} \left( Nq^{\alpha\alpha} - \sum_i S_i^{\alpha 2} \right) \right], \quad (2.91)$$

onde restringimos a integração à região onde  $\mathbf{q}$  é positiva definida.  $\langle Z^n \rangle_J$  é dado então por,

$$\begin{aligned} \langle Z^n \rangle_J &= \int \prod_{\alpha} \sqrt{\frac{N\beta J_0}{2\pi}} dm^{\alpha} \exp \left( -\frac{1}{2} N\beta J_0 \sum_{\alpha} m^{\alpha 2} \right) \int_{\mathbf{q}>0} \prod_{\alpha<\beta} dq^{\alpha\beta} \int_{-i\infty}^{i\infty} \prod_{\alpha<\beta} \left( \frac{N}{2\pi i} d\lambda^{\alpha\beta} \right) \\ &\quad \times \int_{-i\infty}^{i\infty} \prod_{\alpha} \left( \frac{1}{4\pi i} d\lambda^{\alpha\alpha} \right) \exp \left\{ -N \left[ \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} \lambda^{\alpha\beta} q^{\alpha\beta} - \frac{\beta^2 J^2}{4} \sum_{\alpha,\beta} (q^{\alpha\beta})^p \right] \right\} \\ &\quad \times \left\{ \int_{-i\infty}^{i\infty} \prod_{\alpha} dS^{\alpha} \exp \left[ \frac{1}{2} \sum_{\alpha,\beta} \lambda^{\alpha\beta} S^{\alpha} S^{\beta} + \sum_{\alpha} (\beta J_0 m^{\alpha} + \beta H) S^{\alpha} \right] \right\}^N. \end{aligned} \quad (2.92)$$

A integral sobre os spins é gaussiana, de forma que podemos torná-la bem definida se deslocarmos a integração em  $\lambda$  de tal forma que possua a parte real suficientemente negativa. É fácil então obter,

$$\int_{-\infty}^{\infty} \prod_{\alpha} dS^{\alpha} \exp \left[ \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta} \lambda^{\alpha\beta} S^{\alpha} S^{\beta} + \sum_{\alpha} (\beta J_0 m^{\alpha} + \beta H) S^{\alpha} \right] = \frac{(2\pi)^{\frac{n}{2}}}{\sqrt{\det(-\Lambda)}} \\ \times \exp \left\{ -\frac{\beta^2}{2} \sum_{\alpha, \beta} \left[ J_0^2 m^{\alpha} m^{\beta} (\Lambda^{-1})_{\alpha\beta} + 2J_0 H m^{\alpha} (\Lambda^{-1})_{\alpha\beta} + H^2 (\Lambda^{-1})_{\alpha\beta} \right] \right\}, \quad (2.93)$$

onde  $\Lambda$  é a matriz definida por  $\lambda^{\alpha\beta}$ . Assim, é possível escrever,

$$\langle Z^n \rangle_J = \int \prod_{\alpha} \sqrt{\frac{N\beta J_0}{2\pi}} dm^{\alpha} \int_{\mathbf{q}>0} \prod_{\alpha<\beta} dq^{\alpha\beta} \int_{-i\infty}^{i\infty} \prod_{\alpha<\beta} \left( \frac{N}{2\pi i} d\lambda^{\alpha\beta} \right) \\ \times \int_{-i\infty}^{i\infty} \prod_{\alpha} \left( \frac{1}{4\pi i} d\lambda^{\alpha\alpha} \right) \exp \{-NG\}, \quad (2.94)$$

onde,

$$2G = \beta J_0 \sum_{\alpha} m^{\alpha 2} - \frac{\beta^2 J^2}{2} \sum_{\alpha, \beta} (q^{\alpha\beta})^p + \sum_{\alpha\beta} \lambda^{\alpha\beta} q^{\alpha\beta} - n \ln 2\pi + \ln \det(-\Lambda) \\ + \beta^2 J_0^2 \sum_{\alpha, \beta} m^{\alpha} m^{\beta} (\Lambda^{-1})_{\alpha\beta} + 2\beta^2 J_0 H \sum_{\alpha, \beta} m^{\alpha} (\Lambda^{-1})_{\alpha\beta} + \beta^2 H^2 \sum_{\alpha, \beta} (\Lambda^{-1})_{\alpha\beta}. \quad (2.95)$$

Admitindo que podemos inverter a ordem dos limites em  $N$  e  $n$ , a solução assintótica das integrais em (2.94) pode ser obtida através da aplicação do método do ponto de sela, *vide e.g.* (Bruijn, 1981).

Por conveniência, vamos definir as matrizes  $\mathbb{A}$ ,  $\mathbb{B}$  e  $\mathbb{C}$ , segundo as relações

$$(\mathbb{A})^{\alpha\beta} = m^{\alpha} m^{\beta}, \quad (\mathbb{B})^{\alpha\beta} = m^{\alpha}, \quad (\mathbb{C})^{\alpha\beta} = 1,$$

o que possibilita escrever,

$$\ln \det(-\Lambda - \beta^2 J_0^2 \mathbb{A} - 2\beta^2 J_0 H \mathbb{B} - \beta^2 H^2 \mathbb{C}) = \ln \det(-\Lambda) + \ln \det(\mathbb{I} + \mathbb{X})$$

onde  $\mathbb{I}$  é a matriz identidade e  $\mathbb{X}$  é definida por,

$$\mathbb{X} = \Lambda^{-1} (\beta^2 J_0^2 \mathbb{A} + 2\beta^2 J_0 H \mathbb{B} + \beta^2 H^2 \mathbb{C}),$$

de forma que é possível usar a relação,

$$\ln \det(\mathbb{I} + \mathbb{X}) = \mathbb{I} + \text{Tr} \mathbb{X} - \frac{\text{Tr} \mathbb{X}^2}{2} + \dots,$$

para escrever

$$\begin{aligned} \ln \det \left( -\Lambda - \beta^2 J_0^2 \mathbb{A} - 2\beta^2 J_0 H \mathbb{B} - \beta^2 H^2 \mathbb{C} \right) &= \ln \det \left( -\Lambda \right) + \beta^2 J_0^2 \sum_{\alpha, \beta} m^\alpha m^\beta \left( \Lambda^{-1} \right)^{\alpha\beta} \\ &+ 2\beta^2 J_0 H \sum_{\alpha, \beta} m^\alpha \left( \Lambda^{-1} \right)^{\alpha\beta} + \beta^2 H^2 \sum_{\alpha, \beta} \left( \Lambda^{-1} \right)^{\alpha\beta} + O \left( n^2 \right). \end{aligned} \quad (2.96)$$

Substituindo (2.96) em (2.95), podemos escrever a parte relevante de  $G$  na integração em  $\lambda$  na forma,

$$2\tilde{G} = \sum_{\alpha\beta} \lambda^{\alpha\beta} q^{\alpha\beta} + \ln \det \left( -\Lambda - \beta^2 J_0^2 \mathbb{A} - 2\beta^2 J_0 H \mathbb{B} - \beta^2 H^2 \mathbb{C} \right). \quad (2.97)$$

onde desprezamos termos de ordem  $n^2$ . A integração pode ser realizada pela aplicação do método do ponto de sela, a equação de ponto de sela resultando,

$$q^{\alpha\beta} - \left[ \left( -\Lambda - \beta^2 J_0^2 \mathbb{A} - 2\beta^2 J_0 H \mathbb{B} - \beta^2 H^2 \mathbb{C} \right)^{-1} \right] = 0, \quad (2.98)$$

ou ainda,

$$\lambda_{\alpha\beta} + \beta^2 J_0^2 m^\alpha m^\beta + 2\beta^2 J_0 H m^\alpha + \beta^2 H^2 + \left( \mathbf{q}^{-1} \right)^{\alpha\beta} = 0. \quad (2.99)$$

Substituindo (2.99) de volta em (2.97), obtemos,

$$2\tilde{G} = \sum_{\alpha\beta} \left( - \left( \mathbf{q}^{-1} \right)^{\alpha\beta} - \beta^2 J_0^2 m^\alpha m^\beta - 2\beta^2 J_0 H m^\alpha - \beta^2 H^2 \right) q^{\alpha\beta} + \ln \det \left( \mathbf{q}^{-1} \right), \quad (2.100)$$

e portanto,

$$\langle Z^n \rangle_J = \int \prod_{\alpha} \sqrt{\frac{N\beta J_0}{2\pi}} dm^\alpha \int_{\mathbf{q}>0} \prod_{\alpha<\beta} dq^{\alpha\beta} \exp \left( -NG_0 \right), \quad (2.101)$$

onde,

$$\begin{aligned} 2G_0 &= \beta J_0 \sum_{\alpha} m^{\alpha^2} - \frac{\beta^2 J^2}{2} \sum_{\alpha, \beta} \left( q^{\alpha\beta} \right)^p - \ln \det \mathbf{q} - \beta^2 J_0^2 \sum_{\alpha\beta} m^\alpha m^\beta q^{\alpha\beta} \\ &\quad - 2\beta^2 J_0 H \sum_{\alpha\beta} m^\alpha q^{\alpha\beta} - \beta^2 H^2 \sum_{\alpha\beta} q^{\alpha\beta}. \end{aligned} \quad (2.102)$$

O valor da integral em (2.101), no limite assintótico  $N \rightarrow \infty$ , é dominado pelo integrando em seu ponto máximo, de forma que a aplicação do método de Laplace resulta, para a energia livre,

$$\beta f = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{G_0 [\mathbf{q}, \mathbf{m}]}{n}, \quad (2.103)$$

com  $\mathbf{q}$  e  $\mathbf{m}$  obtidos das condições de ponto estacionário,

$$\mu (q^{\alpha\beta})^{p-1} + (\mathbf{q}^{-1})^{\alpha\beta} + \mu_0^2 m^\alpha m^\beta + 2\mu_0 b m^\alpha + b^2 = 0, \quad (2.104)$$

$$m^\alpha - \mu_0 \sum_{\beta} m^\beta q^{\alpha\beta} - b \sum_{\beta} q^{\alpha\beta} = 0, \quad (2.105)$$

onde  $\mu = \beta^2 J^2 p/2$ ,  $\mu_0 = \beta J_0$  e  $b = \beta H$ .

### 2.2.3 Solução Réplica Simétrica

Para calcular o limite  $n \rightarrow 0$ , como no modelo SK, é necessário obter uma expressão explícita de  $G_0$  como função de  $n$ . Para isto é preciso fazer um *Ansatz* a respeito da estrutura de  $\mathbf{q}$ . Espera-se que a solução réplica simétrica seja válida no limite de campos e temperaturas elevados, sendo portanto razoável considerar,

$$q^{\alpha\beta} = (1 - q)\delta^{\alpha\beta} + q, \quad m^\alpha = m, \quad (2.106)$$

e assim,

$$(\mathbf{q}^{-1})^{\alpha\beta} = A\delta^{\alpha\beta} + B, \quad (2.107)$$

onde,

$$A = \frac{1}{1 - q}, \quad \lim_{n \rightarrow 0} B = -\frac{q}{(1 - q)^2}, \quad (2.108)$$

As equações de estado podem ser escritas então na forma,

$$\mu q^{p-1} + b^2 - \frac{q}{(1 - q)^2} + \mu_0^2 m^2 + 2\mu_0 b m = 0, \quad (2.109)$$

$$m [1 - \mu_0 (1 - q)] - b (1 - q) = 0, \quad (2.110)$$

e a energia livre é obtida da equação,

$$\begin{aligned} \lim_{n \rightarrow 0} \frac{2G_0}{n} &= -\frac{\mu}{p} (1 - q^p) - b^2 (1 - q) + \mu_0 m^2 - \mu_0^2 m^2 (1 - q) \\ &\quad - 2\mu_0 b m (1 - q) - \ln(1 - q) - \frac{q}{1 - q}. \end{aligned} \quad (2.111)$$

Novamente, a análise da estabilidade indica regiões de instabilidade da solução réplica simétrica, o que sugere que o sistema quebra espontaneamente a simetria entre réplicas, e que um novo tipo de *Ansatz* deve ser feito sobre a estrutura de  $\mathbf{q}$ . Consideramos a seguir o *Ansatz* proposto por Parisi para uma etapa de quebra de simetria entre réplicas.

Crisanti e Sommers verificaram que, de fato, segundo o esquema de Parisi, esta solução corresponde à solução mais geral com quebra de simetria entre réplicas para este modelo (Crisanti e Sommers, 1992).

### 2.2.4 Solução com Quebra de Simetria

Seguindo o esquema proposto por Parisi, é possível parametrizar a matriz de acoplamento entre réplicas escrevendo  $q^{\alpha\beta}$  convenientemente na forma,

$$q^{\alpha\beta} = (1 - q_1)\delta^{\alpha\beta} + (q_1 - q_0)\epsilon^{\alpha\beta} + q_0, \quad (2.112)$$

onde  $\epsilon^{\alpha\beta}$  é definido por,

$$\epsilon^{\alpha\beta} = \begin{cases} 1, & \text{se } \alpha \text{ e } \beta \text{ estão dentro de um bloco diagonal de dimensão } x, \\ 0, & \text{nos demais casos.} \end{cases}$$

É fácil diagonalizar  $\mathbf{q}$  e mostrar que seus autovalores são dados por,

$$\eta_0 = 1 - q_1, \quad \text{deg. } \frac{n(x-1)}{x}, \quad (2.113)$$

$$\eta_1 = 1 - (1-x)q_1 - xq_0, \quad \text{deg. } \frac{n}{x} - 1, \quad (2.114)$$

$$\eta_2 = 1 - (1-x)q_1 - (x-n)q_0, \quad \text{deg. } 1, \quad (2.115)$$

onde deg. denota a degenerescência de cada autovalor. É possível escrever a inversa de  $\mathbf{q}$  então na forma,

$$(\mathbf{q}^{-1})^{\alpha\beta} = A'\delta^{\alpha\beta} + B'\epsilon^{\alpha\beta} + C', \quad (2.116)$$

onde

$$A' = \frac{1}{\eta_0}, \quad (2.117)$$

$$B' = \frac{q_0 - q_1}{\eta_1\eta_0}, \quad (2.118)$$

$$C' = -\frac{q_0}{\eta_1\eta_2}. \quad (2.119)$$

A energia livre a campo nulo ( $b = 0$ ) é obtida da equação,

$$\begin{aligned} 2\beta f = & \beta J_0 m^2 - \frac{\beta^2 J^2}{2} (1 - \bar{q}^p) - \ln(1 - q_1) - \frac{1}{x} \ln \frac{(1 - \bar{q})}{(1 - q_1)} \\ & - \beta^2 J_0^2 m^2 (1 - \bar{q}) - \frac{q_0}{1 - \bar{q}}, \end{aligned} \quad (2.120)$$

onde

$$\bar{q}^p = (1 - x) q_1^p + x q_0^p,$$

com  $m$ ,  $q_0$ ,  $q_1$  e  $x$  satisfazendo as condições de extremo,

$$\frac{m}{1 - \bar{q}} = \beta J_0 m, \quad (2.121)$$

$$\mu q_0^{p-1} + \mu_0^2 m^2 - \frac{q_0}{(1 - \bar{q})^2} = 0, \quad (2.122)$$

$$\mu (q_1^{p-1} - q_0^{p-1}) - \frac{q_1 - q_0}{(1 - q_1)(1 - \bar{q})} = 0, \quad (2.123)$$

$$-\frac{\mu}{p} (q_1^p - q_0^p) + \frac{1}{x^2} \ln \frac{1 - \bar{q}}{1 - q_1} - \frac{1}{x} \frac{q_1 - q_0}{1 - \bar{q}} - \mu_0^2 m^2 (q_1 - q_0) + \frac{q_0}{(1 - \bar{q})^2} (q_1 - q_0) = 0. \quad (2.124)$$

### 2.2.5 Diagrama de Fases

A linha de transição entre as fases ferromagnética e paramagnética pode ser obtida supondo  $m \neq 0$ , de forma que segundo a equação (2.121),

$$\frac{1}{1 - \bar{q}} = \beta J_0, \quad (2.125)$$

e a fase paramagnética é obtida no limite  $\bar{q}, m \rightarrow 0$ , ou seja,

$$\frac{J_0}{J} = \frac{kT}{J}, \quad (2.126)$$

que define uma reta no diagrama de fases a campo nulo do modelo, permanecendo válida apenas enquanto  $m \neq 0$  abaixo dela.

A linha de transição entre as fases vidro de spin e paramagnética é obtida considerando  $m = 0$ . Neste caso, a equação (2.122) implica  $q_0 = 0$  e as duas outras equações podem ser resolvidas para  $x = 1$ , *vide e.g.* (Crisanti e Sommers, 1992), o que resulta,

$$\frac{\beta^2}{2} q_1^p + \ln(1 - q_1) + q_1 = 0, \quad (2.127)$$

de forma que o problema reside em encontrar a temperatura crítica abaixo da qual existe solução  $q_1 \neq 0$ . Esta temperatura é facilmente obtida numericamente para um dado  $p$ .

Substituindo (2.122) em (2.124), obtemos,

$$\frac{\mu}{p} (q_1^p - q_0^p) - \mu q_0^{p-1} (q_1 - q_0) = -\frac{q_1 - q_0}{x \eta_1} - \frac{1}{x^2} \ln \left( \frac{\eta_0}{\eta_1} \right), \quad (2.128)$$

de forma que podemos obter uma equação sem dependência explícita em  $T$ , dividindo (2.128) por (2.123), resultando assim,

$$\frac{(q_1^p - q_0^p) - pq_0^{p-1}(q_1 - q_0)}{p(q_1^{p-1} - q_0^{p-1})(q_1 - q_0)} = -\frac{\eta_0}{x(q_1 - q_0)} - \frac{\eta_0^2}{x^2(q_1 - q_0)^2} \frac{\eta_1}{\eta_0} \ln\left(\frac{\eta_0}{\eta_1}\right). \quad (2.129)$$

Definindo  $u$  e  $v$  segundo as equações,

$$u = \frac{q_0}{q_1}, \quad v = \frac{\eta_0}{\eta_1},$$

obtemos portanto,

$$w = \frac{2}{p} \frac{1 - u^p - pu^{p-1}(1 - u)}{(1 - u^{p-1})(1 - u)} = -2v \frac{1 - v - \ln v}{(1 - v)^2}, \quad (2.130)$$

onde  $q_1$  pode ser obtido da relação,

$$q_1 = \frac{1 - v}{1 - v[1 - x(1 - u)]}. \quad (2.131)$$

A linha de transição entre as fases mista e vidro de spin é obtida considerando-se a região à direita da linha ( $m \neq 0$ ), sendo portanto

$$\frac{J_0}{J} = \frac{kT}{J} \frac{1}{1 - \bar{q}}, \quad (2.132)$$

de forma que, no limite  $m \rightarrow 0$ , a equação (2.122) implica,

$$q_0 = 0, \quad \bar{q} = (1 - x)q_1,$$

e assim,  $u = 0$  em (2.130).  $kT/J$  pode ser expresso em função de  $q_1$  por meio da equação (2.123),

$$\left(\frac{kT}{J}\right) = \frac{pq_1^{p-2}(1 - q_1)(1 - \bar{q})}{2}, \quad (2.133)$$

tal que a linha é obtida variando  $x$  de 0 a 1, obtendo  $q_1$  da equação (2.131) com  $v$  dado por (2.130) e obtendo então  $kT/J$  da equação (2.133) e  $J_0/J$  a partir de (2.132).

A transição entre a solução réplica simétrica e a solução de Parisi com uma etapa de quebra de simetria entre réplicas, que caracterizam as fases ferromagnética e ferromagnética com quebra de simetria ou mista, pode ser contínua ou descontínua em  $q_1 - q_0$ . A linha de transição contínua é obtida através da expansão da equação (2.123) para  $q_1 - q_0 \rightarrow 0$ , que resulta,

$$\mu(p - 1)q^{p-2} - \frac{1}{(1 - q)^2} = 0, \quad (2.134)$$

de forma que a temperatura pode ser obtida de (2.134) e  $J_0$  de (2.132) haja vista  $m \neq 0$ , para  $1 - 2/p \leq q \leq 1$ . O limite inferior  $q = 1 - 2/p$  provém de uma expansão da equação (2.130) para  $u \rightarrow 1$ , que estabelece a seguinte relação entre  $x$  e  $q$ ,

$$x = \frac{p-2}{2q} (1-q),$$

isto é,  $x \in [0, 1]$  implica  $q \in [1 - 2/p, 1]$ .

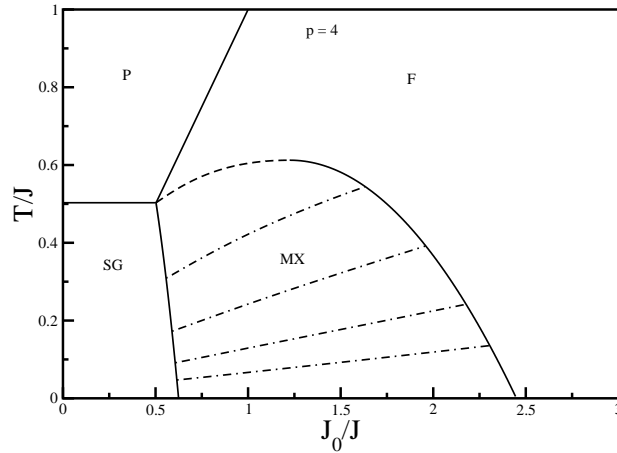


Figura 2.6: Diagrama de fases a campo nulo ( $J_0 \times T$ ) do modelo de vidro de spin esférico ferromagnético com interação de multi-spins para  $p = 4$ . As letras P, F, SG e MX representam as fases paramagnética, ferromagnética, vidro de spin e mista, respectivamente. A linha tracejada é a linha de transição descontínua entre as soluções réplica simétrica e de Parisi com uma etapa de quebra de simetria entre réplicas, e corresponde à linha  $x = 1$ . As demais linhas não-contínuas são soluções com uma quebra de simetria entre réplicas para  $x=1/2, 1/4, 1/8$  e  $1/16$ .

Uma vez que a linha de transição contínua RS-1RSB termina em  $x = 1$ , abaixo deste ponto a solução com quebra de simetria pode ser alcançada apenas descontinuamente (DRSB), sendo que a linha de transição corresponde a própria linha  $x = 1$ . É possível obtê-la da seguinte forma: Para  $x = 1$ , variamos  $0 \leq u \leq 1$ , de forma que obtemos  $w$  a partir da equação (2.130) e  $v = v(w)$  a partir da inversão numérica de  $w = w(v)$ , na mesma equação. Substituindo  $u$  e  $v$  em (2.131) obtemos  $q_1$  e portanto  $q_0$ .  $kT/J$  e  $J_0/J$  são obtidos a partir das equações (2.121) e (2.123). As demais linhas para  $x$  fixo podem ser obtidas de maneira similar.

Na Figura 2.6, apresentamos o diagrama de fases a campo nulo ( $J_0 \times T$ ) deste modelo



para  $p = 4$ . As linhas de transição entre as fases paramagnética e ferromagnética, vidro de spin e mista e a linha contínua entre as fases mista e ferromagnética representam transições de fase contínuas, enquanto a linha de transição entre as fases vidro de spin e paramagnética e a linha tracejada entre as fases mista e ferromagnética representam transições de fase descontínuas. São apresentadas ainda, dentro da fase ferromagnética com quebra de simetria, as linhas da solução 1RSB para  $x = 1/2, 1/4, 1/8$  e  $1/16$ .



## Capítulo 3

# Modelo de Vidro de Spin Esférico Antiferromagnético

O estudo de materiais antiferromagnéticos que exibem comportamentos característicos de uma fase vidro de spin tem atraído considerável interesse entre pesquisadores, experimentais e teóricos, tanto pela aplicação específica aos sistemas tratados, quanto pela possibilidade de uma maior compreensão a respeito das transições de fase e mecanismos envolvidos em sistemas desordenados. Neste capítulo, são estudadas as propriedades estáticas de um modelo de vidro de spin esférico antiferromagnético. Uma breve revisão experimental e teórica sobre vidros de spin antiferromagnéticos é apresentada na próxima seção. Nas demais seções, o modelo de vidro de spin esférico antiferromagnético é apresentado e resolvido, assim como são apresentadas a análise dos resultados e as discussões relevantes.

### 3.1 Introdução

A análise de materiais antiferromagnéticos diluídos, como o  $\text{Fe}_x\text{Mg}_{1-x}\text{Cl}_2$ , permitiu a Bertrand e colaboradores apresentarem em 1982 evidências experimentais de comportamentos característicos de uma fase vidro de spin para um intervalo de valores de concentração  $x$ , *vide e.g.* (Bertrand et al., 1982). A ocorrência de cada fase que parece existir neste sistema (antiferromagnética, vidro de spin e paramagnética) depende da tempera-

tura e do valor da concentração  $x$ , e são separadas por linhas de transição propostas em um diagrama de fases sugerido pelos autores, apresentado na Figura 3.1.

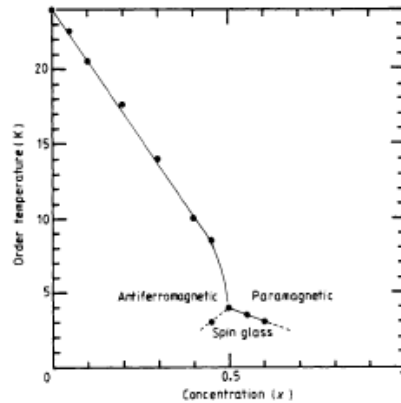


Figura 3.1: Diagrama de fases do  $\text{Fe}_x\text{Mg}_{1-x}\text{Cl}_2$ , extraído de (Bertrand et al., 1982). O diagrama é proposto trançando-se a temperatura de Néel para  $0 \leq x \leq 0,45$ , a temperatura de congelamento para  $0,5 \leq x \leq 0,6$  e o provável ponto de transição entre as fases antiferromagnética e vidro de spin para  $x = 0,45$ .

O mesmo material é analisado por Wong *et al.*, para  $x = 0,55$  (Wong et al., 1985), levando à observação de uma *coexistência* entre as fases antiferromagnética e vidro de spin, isto é, a ordem antiferromagnética de longo alcance não é destruída pela transição para a fase vidro de spin, resultado já previsto pela teoria de campo médio. Evidências de coexistência entre essas fases foram ainda observadas em compostos antiferromagnéticos mistos, tais como  $\text{Fe}_x\text{Mn}_{1-x}\text{TiO}_3$ , em trabalho que sugere a existência de uma linha de transição entre uma fase mista (fase de coexistência entre as fases antiferromagnética e vidro de spin) e uma fase vidro de spin pura, *vide e.g.* (Yoshizawa et al., 1987). Na Figura 3.2, o diagrama de fases experimental do  $\text{Fe}_x\text{Mn}_{1-x}\text{TiO}_3$  (campo magnético versus temperatura) é apresentado, determinado em trabalho posterior por Yoshizawa *et al.* (Yoshizawa et al., 1994).

Variações do modelo SK têm sido propostas para explicar o comportamento vidro de spin observado em materiais antiferromagnéticos desordenados, tais como os descritos acima. A proposta natural parece ser considerar spins do tipo Ising distribuídos em duas

sub-redes  $A$  e  $B$ , cada uma com  $N$  spins, cuja a hamiltoniana é dada por,

$$\mathcal{H} = \sum_{i,j} J_{ij} S_i \sigma_j - H \sum_i (S_i + \sigma_i), \quad (3.1)$$

onde  $S_i$  pertence a sub-rede  $A$  e  $\sigma_i$  a sub-rede  $B$ .  $H$  é um campo magnético aplicado e  $J_{ij}$  são variáveis aleatórias gaussianas independentes e identicamente distribuídas com média  $J_0/N$  e variância  $J^2/N$ . Este modelo, proposto por Korenblit e Shender (Korenblit e Shender, 1985), difere pouco do modelo SK para  $J_0 \leq 0$ , mas permite a existência de ordem antiferromagnética de longo alcance para  $J_0 > 0$ . Suas propriedades estáticas, assim como extensões da proposta inicial, foram ainda amplamente estudadas em trabalhos posteriores por Fyodorov *et al.* (Fyodorov et al., 1987b, 1987a). A solução a campo nulo pode ser obtida através da aplicação do método das réplicas, não apresentando porém diferenças qualitativas significativas quando comparada à do modelo SK, exceto pela possibilidade de ordenamento ferromagnético ( $J_0 < 0$ ) e antiferromagnético ( $J_0 > 0$ ), *vide* Figura 3.3.

A transição entre as fases paramagnética e ferromagnética é destruída pelo campo para o modelo em uma sub-rede (modelo SK) e para o modelo em duas sub-redes com  $J_0 < 0$ . O efeito do campo magnético, entretanto, torna-se bem mais interessante para  $J_0 > 0$ , onde quatro fases são obtidas no diagrama de fases (paramagnética, antiferromagnética,

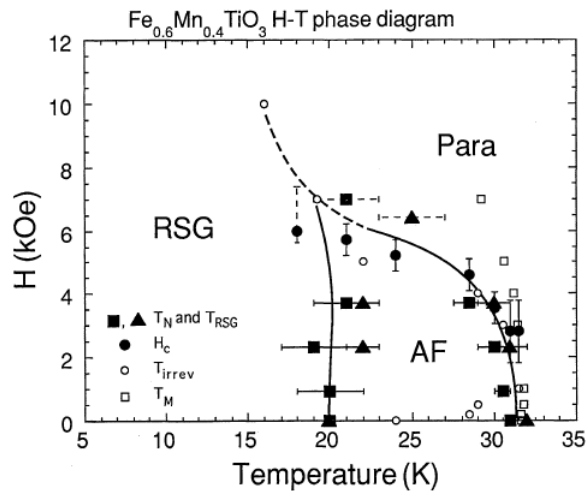


Figura 3.2: Diagrama de fases campo versus temperatura do  $\text{Fe}_x\text{Mn}_{1-x}\text{TiO}_3$ , extraído de (Yoshizawa et al., 1994).

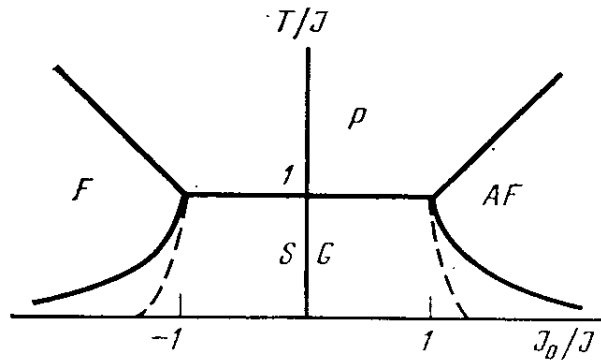


Figura 3.3: Diagrama de fases no plano  $(T, J_0)$  de um antiferromagneto frustrado, extraído de (Korenblit e Shender, 1985). P, AF, F e SG indicam as fases paramagnética, antiferromagnética, ferromagnética e vidro de spin, respectivamente.

vidro de spin e fase mista). O diagrama de fases campo versus temperatura deste modelo para  $J_0 = 1,7$  é apresentado na Figura 3.4, extraída de (Fyodorov et al., 1987b).

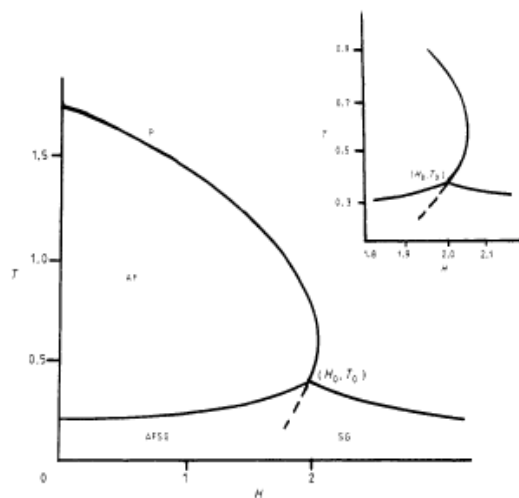


Figura 3.4: Diagrama de fases de um antiferromagneto frustrado sob a ação de um campo magnético externo para  $J_0 = 1,7$ , extraído de (Fyodorov et al., 1987b). P, AF, SG e AFSG indicam as fases paramagnética, antiferromagnética, vidro de spin e mista respectivamente.

A consideração de interações vidro de spin do tipo SK dentro de cada sub-rede leva a uma extensão do modelo proposto por Fyodorov *et al.*, produzindo resultados que concordam bem, ao menos qualitativamente, com os resultados experimentais em sistemas como

$\text{Fe}_x\text{Mg}_{1-x}\text{Cl}_2$  e  $\text{Fe}_x\text{Mn}_{1-x}\text{TiO}_3$ , *vide e.g.* (Takayama, 1988). É possível ainda analisar o efeito de campos aleatórios em vidros de spin antiferromagnéticos do tipo Ising (Vieira et al., 2000), efeito esse já observado experimentalmente por Wong *et al.* (Wong, Molnar, e Dimon, 1982) no  $\text{Fe}_x\text{Mg}_{1-x}\text{Cl}_2$ .

A fase vidro de spin do modelo SK em uma ou duas sub-redes, descrita pela solução de Parisi com um número infinito de etapas de quebra de simetria entre réplicas, é no entanto difícil de ser analisada analítica e numericamente, tornando conveniente o estudo de modelos mais simples mas que retenham os aspectos essenciais do modelo SK. Um candidato é o modelo de energias aleatórias (REM), cuja versão em duas sub-redes proposta para o estudo de vidros de spin antiferromagnéticos foi analisada recentemente por Almeida (Almeida, 1998, 1999), em um modelo definido pela seguinte hamiltoniana,

$$\mathcal{H} = - \sum_{\substack{1 \leq i_1 < \dots < i_p \leq N \\ 1 \leq j_1 < \dots < j_p \leq N}} J_{i_1 \dots i_p j_1 \dots j_p} S_{i_1} \dots S_{i_p} \sigma_{j_1} \dots \sigma_{j_p} + \frac{J_0}{N} \sum_{i,j} S_i \sigma_j - h \sum_i (S_i + \sigma_i), \quad (3.2)$$

onde  $S_i$  e  $\sigma_i$  são variáveis de spin do tipo Ising pertencentes às subredes  $A$  e  $B$  respectivamente, cada uma com  $N$  spins.  $J_0 > 0$  representa a interação antiferromagnética entre os spins das duas sub-redes e  $h$  o campo magnético aplicado.  $J_{i_1 \dots i_p j_1 \dots j_p}$  são variáveis aleatórias gaussianas independentes e identicamente distribuídas com média zero e variância,

$$\langle J_{i_1 \dots i_p j_1 \dots j_p}^2 \rangle = \frac{J^2 (p!)^2}{N^{2p-1}},$$

onde a dependência em  $N$  é escolhida de forma a garantir a existência do limite termodinâmico e o limite  $p \rightarrow \infty$  é tomado ao final dos cálculos. Na Figura 3.5, os diagramas de fases do REM em duas subredes a campo nulo,  $J_0 \times T$  (gráfico à esquerda), e na presença de campo,  $H \times T$  (gráfico à direita), são apresentados, extraídos de (Almeida, 1998).

Uma outra situação em que o modelo SK com interação de multi-spins torna-se mais simples é a versão esférica do modelo, onde as variáveis de spin do tipo Ising são substituídas por variáveis contínuas, obedecendo ao vínculo esférico

$$\sum_{i=1}^N S_i^2 = N,$$

onde  $N$  é o número de spins do sistema. Este modelo é considerado mais simples porque a fase vidro de spin é descrita por apenas uma etapa de quebra de simetria entre réplicas

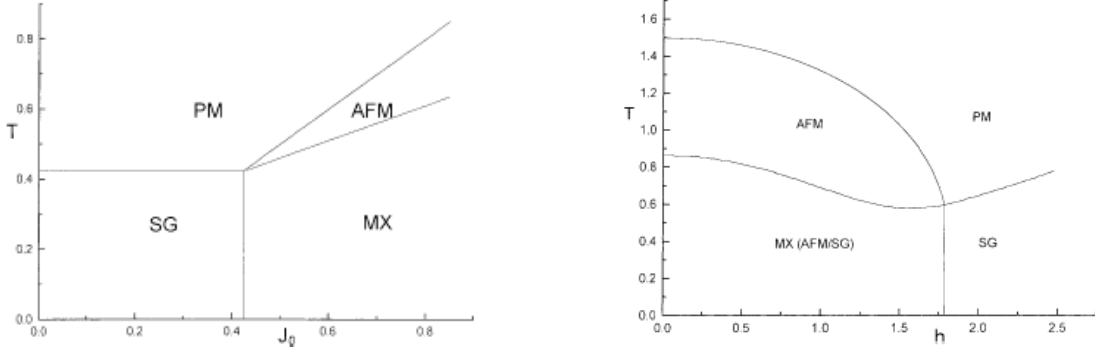


Figura 3.5: Diagramas de fase do REM na presença (gráfico à direita,  $J_0 = 1, 5$ ) e na ausência de campo magnético (gráfico à esquerda), extraído de (Almeida, 1998). PM, AFM, SG e MX indicam as fases paramagnética, antiferromagnética, vidro de spin e mista, respectivamente.

até o zero absoluto para qualquer  $p > 2$  (Crisanti e Sommers, 1992). Os resultados por nós obtidos referentes à análise das propriedades estáticas do modelo de vidro de spin esférico antiferromagnético com interação de multi-spins são apresentados nas seções a seguir.

### 3.2 O Modelo

O modelo estudado neste trabalho consiste de  $2N$  spins contínuos,  $-\infty < S_i < \infty$ , divididos em dois subconjuntos  $A$  e  $B$ , de  $N$  spins cada. Esses subconjuntos correspondem às sub-redes dos modelos de curto alcance. A hamiltoniana é dada por,

$$\mathcal{H} = - \sum_{\substack{1 \leq i_1 < \dots < i_r \leq N \\ 1 \leq j_1 < \dots < j_r \leq N}} J_{i_1 \dots i_r j_1 \dots j_r} S_{i_1} \dots S_{i_r} \sigma_{j_1} \dots \sigma_{j_r} + \frac{J_0}{N} \sum_{i,j=1}^N S_i \sigma_j - H \sum_{i=1}^N (S_i + \sigma_i), \quad (3.3)$$

onde  $H$  é o campo magnético aplicado e  $J_0 > 0$  representa a interação antiferromagnética entre as sub-redes.  $J_{i_1 \dots i_r j_1 \dots j_r}$  representa a interação de conjuntos de  $r$  spins entre diferentes sub-redes. Essas interações são variáveis aleatórias gaussianas independentes e identicamente distribuídas com média zero e variância

$$\langle J_{i_1 \dots i_r j_1 \dots j_r}^2 \rangle = \frac{J^2 (r!)^2}{N^{2r-1}},$$

onde o fator  $(r!)^2$  é escolhido por conveniência e a dependência em  $N$  foi escolhida de tal modo que a energia livre seja extensiva. A notação adotada é tal que  $S_i$  pertence à



sub-rede  $A$  e  $\sigma_i$  à sub-rede  $B$ , para  $1 \leq i \leq N$ . Além disso, a existência de um limite de baixas temperaturas bem definido é assegurada pelos vínculos esféricos,

$$\sum_{i=1}^N S_i^2 = N, \quad \sum_{i=1}^N \sigma_i^2 = N.$$

### 3.3 O Método das Réplicas

O tratamento analítico envolvido na solução deste modelo é similar ao empregado no modelo de vidro de spin esférico ferromagnético com interação de multi-spins, examinado no Capítulo 2 e nas referências (Crisanti e Sommers, 1992; Hertz et al., 1999).  $J_{i_1 \dots i_r j_1 \dots j_r}$  são variáveis do tipo *quenched*, sendo a energia livre portanto auto-mediada e dada por,

$$f = \langle f_J \rangle_J, \quad (3.4)$$

onde,

$$-\beta f_J = \ln \text{Tr} \exp(-\beta \mathcal{H}), \quad (3.5)$$

com  $\text{Tr}$  denotando o traço sobre os spins contínuos, sujeitos aos vínculos esféricos, isto é,

$$\text{Tr}(\dots) = \prod_{i=1}^N \left[ \int_{-\infty}^{\infty} dS_i \int_{-\infty}^{\infty} d\sigma_i \right] \delta \left( N - \sum_i S_i^2 \right) \delta \left( N - \sum_i \sigma_i^2 \right) (\dots), \quad (3.6)$$

e  $\langle \dots \rangle_J$  uma média gaussiana sobre os parâmetros de troca  $J_{i_1 \dots i_r j_1 \dots j_r}$ ,

$$\langle \dots \rangle_J = \prod_{\substack{1 \leq i_1 < \dots < i_r \leq N \\ 1 \leq j_1 < \dots < j_r \leq N}} \left[ \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dJ_{i_1 \dots i_r j_1 \dots j_r}}{\sqrt{2\pi \langle J_{i_1 \dots i_r j_1 \dots j_r}^2 \rangle}} \exp \left( -\frac{J_{i_1 \dots i_r j_1 \dots j_r}^2}{2 \langle J_{i_1 \dots i_r j_1 \dots j_r}^2 \rangle} \right) \right] (\dots). \quad (3.7)$$

Novamente, o cálculo deste valor médio torna-se mais simples (de fato, factível) ao considerarmos a seguinte identidade logarítmica,

$$\langle \ln x \rangle = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{\ln \langle x^n \rangle}{n},$$

que nos permite escrever,

$$-\beta f = \lim_{N \rightarrow \infty} \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{nN} \ln \langle Z^n \rangle_J. \quad (3.8)$$

Para  $n$  inteiro, é possível calcular a função de partição de um sistema de  $n$  réplicas independentes do sistema, e obter a energia livre posteriormente através de uma continuação analítica em  $n$ , tomando o limite  $n \rightarrow 0$ . A função de partição de um sistema de

$n$  réplicas independentes é dada por,

$$Z^n = \text{Tr}_n \exp \left( -\beta \sum_{\alpha=1}^n \mathcal{H}^\alpha \right), \quad (3.9)$$

onde  $1 \leq \alpha \leq n$  denota a  $\alpha$ -ésima réplica do sistema e o traço corresponde a soma (ou integral) sobre os valores de spin de cada réplica. É possível escrever o valor médio de  $Z^n$  então na forma,

$$\begin{aligned} \langle Z^n \rangle_J = \text{Tr}_n \exp \left\{ \sum_{\alpha} \left[ -\frac{\beta J_0}{N} \sum_{i,j} S_i^\alpha \sigma_j^\alpha + \beta H \sum_i (S_i^\alpha + \sigma_i^\alpha) \right] \right\} \\ \cdot \prod_{\substack{1 \leq i_1 < \dots < i_r \leq N \\ 1 \leq j_1 < \dots < j_r \leq N}} \left[ \int \frac{dJ_{AB}}{\sqrt{2\pi \langle J_{AB}^2 \rangle}} \exp \left( -\frac{J_{AB}^2}{2 \langle J_{AB}^2 \rangle} \right. \right. \\ \left. \left. + \beta J_{AB} \sum_{\alpha} S_{i_1}^\alpha \dots S_{i_r}^\alpha \sigma_{j_1}^\alpha \dots \sigma_{j_r}^\alpha \right) \right], \quad (3.10) \end{aligned}$$

onde denotamos por  $J_{AB}$  os parâmetros de troca  $J_{i_1 \dots i_r j_1 \dots j_r}$ , apenas por conveniência. As integrais, gaussianas, são idênticas, exceto pelo fator  $\beta \sum_{\alpha} S_{i_1}^\alpha \dots S_{i_r}^\alpha \sigma_{j_1}^\alpha \dots \sigma_{j_r}^\alpha$  multiplicado por  $J_{AB}$  no argumento da exponencial. Seus cálculos não representam qualquer dificuldade, sendo imediato verificar que,

$$\begin{aligned} \int \frac{dJ_{AB}}{\sqrt{2\pi \langle J_{AB}^2 \rangle}} \exp \left( -\frac{J_{AB}^2}{2 \langle J_{AB}^2 \rangle} + \beta J_{AB} \sum_{\alpha} S_{i_1}^\alpha \dots S_{i_r}^\alpha \sigma_{j_1}^\alpha \dots \sigma_{j_r}^\alpha \right) \\ = \exp \left[ \frac{\beta^2 J^2 (r!)^2}{2N^{2r-1}} \sum_{\alpha, \beta} S_{i_1}^\alpha S_{i_1}^\beta \dots S_{i_r}^\alpha S_{i_r}^\beta \sigma_{j_1}^\alpha \sigma_{j_1}^\beta \dots \sigma_{j_r}^\alpha \sigma_{j_r}^\beta \right], \quad (3.11) \end{aligned}$$

e portanto,

$$\begin{aligned} \langle Z^n \rangle_J = \text{Tr}_n \exp \left\{ \sum_{\alpha} \left[ -\frac{\beta J_0}{N} \sum_{i,j} S_i^\alpha \sigma_j^\alpha + \beta H \sum_i (S_i^\alpha + \sigma_i^\alpha) \right] \right. \\ \left. + \sum_{\alpha, \beta} \frac{\beta^2 J^2 (r!)^2}{2N^{2r-1}} \sum_{\substack{1 \leq i_1 < \dots < i_r \leq N \\ 1 \leq j_1 < \dots < j_r \leq N}} S_{i_1}^\alpha S_{i_1}^\beta \dots S_{i_r}^\alpha S_{i_r}^\beta \sigma_{j_1}^\alpha \sigma_{j_1}^\beta \dots \sigma_{j_r}^\alpha \sigma_{j_r}^\beta \right\}. \quad (3.12) \end{aligned}$$

Admitindo que a inversão dos limites em  $N$  e  $n$  não gera problemas sensíveis às propriedades termodinâmicas estudadas, podemos usar a seguinte relação para simplificar as somas sobre os termos de  $r$  spins,

$$r! \sum_{1 \leq i_1 < \dots < i_r \leq N} = \sum_{i_1, \dots, i_r} + O(N^{-1}), \quad (3.13)$$

e então escrever,

$$\begin{aligned} \langle Z^n \rangle_J = \text{Tr}_n \exp \left\{ \sum_{\alpha} \left[ -\frac{\beta J_0}{N} \sum_{i,j} S_i^{\alpha} \sigma_j^{\alpha} + \beta H \sum_i (S_i^{\alpha} + \sigma_i^{\alpha}) \right] \right. \\ \left. + \sum_{\alpha,\beta} \frac{\beta^2 J^2 N}{2} \left( \sum_i \frac{S_i^{\alpha} S_i^{\beta}}{N} \right)^r \left( \sum_i \frac{\sigma_i^{\alpha} \sigma_i^{\beta}}{N} \right)^r \right\}, \end{aligned} \quad (3.14)$$

que está correta desprezando-se termos de ordem  $N^{-1}$  na soma (3.13).

A dificuldade representada pelos termos de interação antiferromagnética e vidro de spin em (3.14) pode ser transposta através da introdução de variáveis apropriadas, fazendo uso das propriedades da representação complexa da função delta de Dirac. Por exemplo, o termo de interação vidro de spin pode ser linearizado através da introdução de funções de *overlap* entre réplicas,

$$q_A^{\alpha\beta} = \frac{1}{N} \sum_i S_i^{\alpha} S_i^{\beta}, \quad q_B^{\alpha\beta} = \frac{1}{N} \sum_i \sigma_i^{\alpha} \sigma_i^{\beta},$$

cujas propriedades são apresentadas em maiores detalhes em (Crisanti e Sommers, 1992), ou no Capítulo 2 desta dissertação. De fato,  $\mathbf{q}_I$  (a matriz definida pelos elementos  $q_I^{\alpha\beta}$ , onde  $I \in \{A, B\}$ ) é simétrica e possui os elementos diagonais iguais a um, devido ao vínculo esférico. Além disso,  $\mathbf{q}_I$  é positiva semi-definida e seus elementos pertencem ao intervalo  $[-1, 1]$ . É possível então estabelecer as seguintes identidades, tendo em vista as definições acima e a representação complexa da função delta de Dirac,

$$1 = \int_{\mathbf{q}_A > 0} \prod_{\alpha < \beta} dq_A^{\alpha\beta} \int_{-i\infty}^{i\infty} \prod_{\alpha < \beta} \left( \frac{N}{2\pi i} d\lambda_A^{\alpha\beta} \right) \exp \left[ -\frac{1}{2} \sum_{\alpha \neq \beta} \lambda_A^{\alpha\beta} \left( N q_A^{\alpha\beta} - \sum_i S_i^{\alpha} S_i^{\beta} \right) \right], \quad (3.15)$$

$$\prod_{\alpha} \delta \left( N - \sum_i S_i^{\alpha 2} \right) = \int_{-i\infty}^{i\infty} \prod_{\alpha} \left( \frac{d\lambda_A^{\alpha\alpha}}{4\pi i} \right) \exp \left[ -\frac{1}{2} \sum_{\alpha} \lambda_A^{\alpha\alpha} \left( N q_A^{\alpha\alpha} - \sum_i S_i^{\alpha 2} \right) \right], \quad (3.16)$$

onde utilizamos  $q^{\alpha\alpha} = 1$  e equações similares são válidas para as substituições  $A \leftrightarrow B$ ,  $S \leftrightarrow \sigma$ . Além disto, a integração em  $\mathbf{q}_I$  foi restrita à região onde  $\mathbf{q}_I$  é positiva definida, restrição lícita e necessária a algumas manipulações posteriores.  $\langle Z^n \rangle_J$  fica dado então

por,

$$\begin{aligned}
\langle Z^n \rangle_J &= \prod_{I \in \{A, B\}} \left[ \int_{\mathbf{q} > 0} \prod_{\alpha < \beta} dq_I^{\alpha\beta} \int_{-i\infty}^{i\infty} \prod_{\alpha < \beta} \left( \frac{N}{2\pi i} d\lambda_I^{\alpha\beta} \right) \int_{-i\infty}^{i\infty} \prod_{\alpha} \left( \frac{d\lambda_I^{\alpha\alpha}}{4\pi i} \right) \right] \\
&\times \exp \left[ \sum_{\alpha, \beta} \frac{\beta^2 J^2 N}{2} (q_A^{\alpha\beta})^r (q_B^{\alpha\beta})^r - \frac{N}{2} \sum_{\alpha, \beta} (\lambda_A^{\alpha\beta} q_A^{\alpha\beta} + \lambda_B^{\alpha\beta} q_B^{\alpha\beta}) \right] \\
&\times \prod_{\alpha, i} \left( \int dS_i^\alpha \int d\sigma_i^\alpha \right) \exp \left\{ \sum_{\alpha} \left[ -\beta J_0 N \left( \sum_i \frac{S_i^\alpha}{N} \right) \left( \sum_i \frac{\sigma_i^\alpha}{N} \right) \right. \right. \\
&\left. \left. + \beta H N \sum_i \frac{(S_i^\alpha + \sigma_i^\alpha)}{N} \right] + \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta} \left( \lambda_A^{\alpha\beta} \sum_i S_i^\alpha S_i^\beta + \lambda_B^{\alpha\beta} \sum_i \sigma_i^\alpha \sigma_i^\beta \right) \right\}. \quad (3.17)
\end{aligned}$$

De forma semelhante, as somas sobre spins de diferentes sub-redes podem ser desacopladas a partir da introdução das variáveis,

$$m_A^\alpha = \sum_i \frac{S_i^\alpha}{N}, \quad m_B^\alpha = \sum_i \frac{\sigma_i^\alpha}{N},$$

tal que a equação <sup>1</sup>

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} dm_A^\alpha \int_{-i\infty}^{i\infty} \frac{N}{2\pi i} d\lambda_A^\alpha \exp \left[ -N \lambda_A^\alpha \left( m_A^\alpha - \frac{1}{N} \sum_i S_i^\alpha \right) \right], \quad (3.18)$$

e uma equação similar, obtida da substituição  $A \leftrightarrow B$ ,  $S \leftrightarrow \sigma$  em (3.18), levam à seguinte expressão para  $\langle Z^n \rangle_J$ ,

$$\begin{aligned}
\langle Z^n \rangle_J &= \prod_{I \in \{A, B\}} \left[ \int_{\mathbf{q} > 0} \prod_{\alpha < \beta} dq_I^{\alpha\beta} \int_{-i\infty}^{i\infty} \prod_{\alpha < \beta} \left( \frac{N}{2\pi i} d\lambda_I^{\alpha\beta} \right) \int_{-i\infty}^{i\infty} \prod_{\alpha} \left( \frac{d\lambda_I^{\alpha\alpha}}{4\pi i} \right) \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{\alpha} dm_I^\alpha \right. \\
&\times \left. \int_{-i\infty}^{i\infty} \frac{N}{2\pi i} \prod_{\alpha} d\lambda_I^\alpha \right] \exp \left\{ \sum_{\alpha, \beta} \frac{\beta^2 J^2 N}{2} (q_A^{\alpha\beta})^r (q_B^{\alpha\beta})^r - \frac{N}{2} \sum_{\alpha, \beta} (\lambda_A^{\alpha\beta} q_A^{\alpha\beta} + \lambda_B^{\alpha\beta} q_B^{\alpha\beta}) \right. \\
&\left. - \sum_{\alpha} \left[ \beta J_0 N m_A^\alpha m_B^\alpha - \beta H N (m_A^\alpha + m_B^\alpha) + N (\lambda_A^\alpha m_A^\alpha + \lambda_B^\alpha m_B^\alpha) \right] \right\} \\
&\times \prod_i \left( \prod_{\alpha} \int dS_i^\alpha \int d\sigma_i^\alpha \right) \times \exp \left[ \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta} \left( \lambda_A^{\alpha\beta} \sum_i S_i^\alpha S_i^\beta + \lambda_B^{\alpha\beta} \sum_i \sigma_i^\alpha \sigma_i^\beta \right) \right. \\
&\left. + \sum_{\alpha} \left( \lambda_A^\alpha \sum_i S_i^\alpha + \lambda_B^\alpha \sum_i \sigma_i^\alpha \right) \right]. \quad (3.19)
\end{aligned}$$

O número crescente de variáveis e a “aridez” das últimas expressões não devem ser motivos para desencorajamento. De fato, (3.19) é mais simples que (3.14), devido ao

<sup>1</sup>As variáveis  $\lambda^\alpha$  e  $\lambda^{\alpha\beta}$  devem ser distingüidas cuidadosamente. Ambas estão relacionadas a representação complexa da função delta de Dirac mas a primeira é conjugada a  $m^\alpha$  e a segunda a  $q^{\alpha\beta}$ .

potencial de métodos de integração assintótica como o método do ponto de sela e o método de Laplace e ao largo alcance de aplicabilidade de integrações gaussianas em física teórica. Uma vez estando as somas sobre os sítios desacopladas, é possível escrever as integrais sobre os valores de spin na seguinte forma,

$$\begin{aligned} & \prod_i \left[ \left( \prod_{\alpha} \int dS_i^{\alpha} d\sigma_i^{\alpha} \right) \exp \left( \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta} \lambda_A^{\alpha\beta} S_i^{\alpha} S_i^{\beta} + \sum_{\alpha} \lambda_A^{\alpha} S_i^{\alpha} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta} \lambda_B^{\alpha\beta} \sigma_i^{\alpha} \sigma_i^{\beta} + \sum_{\alpha} \lambda_B^{\alpha} \sigma_i^{\alpha} \right) \right] \\ &= \left\{ \prod_{I \in \{A, B\}} \left[ \left( \prod_{\alpha} \int dx^{\alpha} \right) \exp \left( \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta} \lambda_I^{\alpha\beta} x^{\alpha} x^{\beta} + \sum_{\alpha} \lambda_I^{\alpha} x^{\alpha} \right) \right] \right\}^N. \end{aligned} \quad (3.20)$$

A integral entre colchetes na última linha da equação (3.20) é gaussiana e pode ser facilmente resolvida diagonalizando a forma quadrática presente no argumento da exponencial, através da seguinte transformação unitária:

$$y^{\alpha} = \sum_{\beta} U^{\alpha\beta} x^{\beta},$$

de forma que é possível escrever,

$$\sum_{\alpha, \beta} \lambda_I^{\alpha\beta} x^{\alpha} x^{\beta} = \sum_{\alpha} (\Lambda_I)_{\alpha} (y^{\alpha})^2, \quad \sum_{\alpha} \lambda_I^{\alpha} x^{\alpha} = \sum_{\alpha} C^{\alpha} y^{\alpha},$$

onde,

$$C^{\alpha} = \sum_{\beta} \lambda_I^{\beta} (\mathbf{U}^{\dagger})^{\beta\alpha},$$

e denotamos por  $(\Lambda_I)_{\alpha}$  os autovalores da matriz definida pelos elementos  $\lambda_I^{\alpha\beta}$ . O jacobiano é invariante por uma transformação unitária, sendo possível escrever, após algumas manipulações algébricas,

$$\begin{aligned} & \left[ \prod_{\alpha} \left( \int dx^{\alpha} \right) \right] \exp \left( \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta} \lambda_I^{\alpha\beta} x^{\alpha} x^{\beta} + \sum_{\alpha} \lambda_I^{\alpha} x^{\alpha} \right) \\ &= \prod_{\alpha} \left\{ \int dy^{\alpha} \exp \left[ -\frac{(-\Lambda_I)_{\alpha}}{2} (y^{\alpha})^2 + C^{\alpha} y^{\alpha} \right] \right\} = \prod_{\alpha} \left\{ \exp \left[ \frac{C_{\alpha}^2}{2(-\Lambda_I)_{\alpha}} \right] \sqrt{\frac{2\pi}{(-\Lambda_I)_{\alpha}}} \right\} \\ &= \frac{(2\pi)^{n/2}}{\sqrt{\det(-\Lambda_I)}} \exp \left[ -\frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta} \lambda_I^{\alpha} \lambda_I^{\beta} (\Lambda_I^{-1})^{\alpha\beta} \right], \end{aligned} \quad (3.21)$$

e portanto,

$$\begin{aligned} \langle Z^n \rangle_J &= \prod_{I \in \{A, B\}} \left[ \int_{\mathbf{q} > 0} \prod_{\alpha < \beta} dq_I^{\alpha\beta} \int_{-i\infty}^{i\infty} \prod_{\alpha < \beta} \left( \frac{N}{2\pi i} d\lambda_I^{\alpha\beta} \right) \int_{-i\infty}^{i\infty} \prod_{\alpha} \left( \frac{d\lambda_I^{\alpha\alpha}}{4\pi i} \right) \right. \\ &\quad \left. \times \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{\alpha} dm_I^{\alpha} \int_{-i\infty}^{i\infty} \frac{N}{2\pi i} \prod_{\alpha} d\lambda_I^{\alpha} \right] \exp \left[ -NG \left( m_I^{\alpha}, q_I^{\alpha\beta}, \lambda_I^{\alpha}, \lambda_I^{\alpha\beta} \right) \right], \end{aligned} \quad (3.22)$$

onde,

$$\begin{aligned}
G\left(m_I^\alpha, q_I^{\alpha\beta}, \lambda_I^\alpha, \lambda_I^{\alpha\beta}\right) &= -\sum_{\alpha,\beta} \frac{\beta^2 J^2}{2} \left(q_A^{\alpha\beta}\right)^r \left(q_B^{\alpha\beta}\right)^r + \frac{1}{2} \sum_{\alpha,\beta} \left(\lambda_A^{\alpha\beta} q_A^{\alpha\beta} + \lambda_B^{\alpha\beta} q_B^{\alpha\beta}\right) \\
&+ \sum_{\alpha} \left[ \beta J_0 m_A^\alpha m_B^\alpha - \beta H (m_A^\alpha + m_B^\alpha) + (\lambda_A^\alpha m_A^\alpha + \lambda_B^\alpha m_B^\alpha) \right] \\
&+ \sum_{I \in \{A,B\}} \left[ \frac{1}{2} \ln \det (-\Lambda_I) + \frac{1}{2} \sum_{\alpha,\beta} \lambda_I^\alpha \lambda_I^\beta (\Lambda_I^{-1})^{\alpha\beta} - \frac{n}{2} \ln 2\pi \right]. \tag{3.23}
\end{aligned}$$

Haja vista o limite termodinâmico  $N \rightarrow \infty$ , as integrais em (3.22) podem ser calculadas através de aplicações sucessivas dos métodos de ponto de sela e de Laplace. O termo relevante de (3.23) na integração em  $\lambda_I^{\alpha\beta}$  é,

$$\tilde{G}_I = \frac{1}{2} \ln \det (-\Lambda_I) + \frac{1}{2} \sum_{\alpha,\beta} \lambda_I^\alpha \lambda_I^\beta (\Lambda_I^{-1})^{\alpha\beta} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha,\beta} \lambda_I^{\alpha\beta} q_I^{\alpha\beta}, \tag{3.24}$$

onde lembramos que  $\Lambda_I$  é a matriz definida pelos elementos  $\lambda_I^{\alpha\beta}$ . Definindo uma matriz  $\Lambda'_I$ , tal que,

$$(\Lambda'_I)^{\alpha\beta} = \lambda_I^\alpha \lambda_I^\beta,$$

é possível ainda escrever,

$$\begin{aligned}
\ln \det (-\Lambda_I - \Lambda'_I) &= \ln \det (-\Lambda_I) + \ln \det (\mathbb{I} + \Lambda_I^{-1} \Lambda'_I) \\
&= \ln \det (-\Lambda_I) + \text{Tr} (\Lambda_I^{-1} \Lambda'_I) + \text{O}(n^2) \\
&= \ln \det (-\Lambda_I) + \sum_{\alpha,\beta} \lambda_I^\alpha \lambda_I^\beta (\Lambda_I^{-1})^{\alpha\beta} + \text{O}(n^2), \tag{3.25}
\end{aligned}$$

e portanto,

$$2\tilde{G}_I = \ln \det (-\Lambda_I - \Lambda'_I) + \sum_{\alpha,\beta} \lambda_I^{\alpha\beta} q_I^{\alpha\beta}, \tag{3.26}$$

desprezando-se termos de ordem  $n^2$ . As condições de ponto estacionário para  $\lambda_I^{\alpha\beta}$  implicam,

$$q_I^{\alpha\beta} + \frac{\partial}{\partial \lambda_I^{\alpha\beta}} \ln \det (-\Lambda_I - \Lambda'_I) = 0, \tag{3.27}$$

ou ainda,

$$\lambda_I^{\alpha\beta} + \lambda_I^\alpha \lambda_I^\beta + (\mathbf{q}_I^{-1})^{\alpha\beta} = 0, \tag{3.28}$$

onde foi usada a relação,

$$\frac{\partial}{\partial A^{\alpha\beta}} \ln \det A^{\alpha\beta} = (A^{-1})^{\alpha\beta},$$

que é válida em geral. Inserindo (3.28) em (3.26), obtemos enfim,

$$2\tilde{G}_I = - \sum_{\alpha,\beta} \lambda_I^\alpha \lambda_I^\beta q_I^{\alpha\beta} + \ln \det (\mathbf{q}_I^{-1}). \quad (3.29)$$

A integração em  $\lambda_I^\alpha$  pode ser realizada de maneira semelhante. Inserindo (3.29) de volta em (3.23), o termo relevante na integração em  $\lambda_I^\alpha$  é

$$2\hat{G}_I = - \sum_{\alpha,\beta} \lambda_I^\alpha \lambda_I^\beta q_I^{\alpha\beta} + 2 \sum_{\alpha} \lambda_I^\alpha m_I^\alpha, \quad (3.30)$$

de forma que a equação de ponto de sela resulta,

$$\lambda_I^\alpha = \sum_{\beta} (\mathbf{q}_I^{-1})^{\alpha\beta} m_I^\beta. \quad (3.31)$$

Inserindo (3.31) de volta em (3.30), obtemos,

$$2\hat{G}_I = \sum_{\alpha,\beta} (\mathbf{q}_I^{-1})^{\alpha\beta} m_I^\alpha m_I^\beta, \quad (3.32)$$

e portanto, para  $\langle Z^n \rangle_J$ ,

$$\langle Z^n \rangle_J = \prod_{I \in \{A,B\}} \left[ \int_{\mathbf{q}_I > 0} \prod_{\alpha < \beta} dq_I^{\alpha\beta} \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{\alpha} dm_I^\alpha \right] \exp \left[ -NG_0 \left( m_I^\alpha, q_I^{\alpha\beta} \right) \right], \quad (3.33)$$

onde,

$$\begin{aligned} G_0 \left( m_I^\alpha, q_I^{\alpha\beta} \right) &= -\frac{\beta^2 J^2}{2} \sum_{\alpha,\beta} \left( q_A^{\alpha\beta} \right)^r \left( q_B^{\alpha\beta} \right)^r + \beta J_0 \sum_{\alpha} m_A^\alpha m_B^\alpha \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{I \in \{A,B\}} \left[ \sum_{\alpha,\beta} (\mathbf{q}_I^{-1})^{\alpha\beta} m_I^\alpha m_I^\beta - 2\beta H \sum_{\alpha} m_I^\alpha - \ln \det \mathbf{q}_I - n \ln 2\pi \right]. \end{aligned} \quad (3.34)$$

As integrais assintóticas em (3.33) podem ser resolvidas através da aplicação do método de Laplace. De fato, correções de ordem  $N^{-1}$  podem ser desprezadas e a integração pode ser substituída pelo integrando em seu valor máximo. A energia livre fica dada então por,

$$\beta f = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{G_0}{n}, \quad (3.35)$$

onde,

$$\begin{aligned} 2G_0 &= \sum_{I \in \{A,B\}} \left[ \sum_{\alpha,\beta} (\mathbf{q}_I^{-1})^{\alpha\beta} m_I^\alpha m_I^\beta - 2\beta H \sum_{\alpha} m_I^\alpha - \ln \det \mathbf{q}_I - n \ln 2\pi \right] \\ &\quad - \beta^2 J^2 \sum_{\alpha,\beta} \left( q_A^{\alpha\beta} \right)^r \left( q_B^{\alpha\beta} \right)^r + 2\beta J_0 \sum_{\alpha} m_A^\alpha m_B^\alpha, \end{aligned} \quad (3.36)$$

com  $m_I^\alpha$  e  $q_I^{\alpha\beta}$  obedecendo às condições de extremo,

$$\sum_{\beta} (\mathbf{q}_A^{-1})^{\alpha\beta} m_A^\beta - \beta H + \beta J_0 m_B^\alpha = 0, \quad (3.37)$$

$$(\mathbf{q}'_A)^{\alpha\beta} + \beta^2 J^2 r \left( q_A^{\alpha\beta} \right)^{r-1} \left( q_B^{\alpha\beta} \right)^r = 0, \quad (3.38)$$

e a equações similares válidas para a substituição  $A \leftrightarrow B$ .  $\mathbf{q}'_I$  é definida por,

$$(\mathbf{q}'_I)^{\alpha\beta} = q_I^{\alpha\beta} - m_I^\alpha m_I^{\alpha\beta}. \quad (3.39)$$

### 3.4 Solução Réplica Simétrica

Espera-se que a solução réplica simétrica seja válida nas regiões de campos e temperaturas elevados, de forma que é razoável considerar,

$$q_I^{\alpha\beta} = (1 - q_I) \delta^{\alpha\beta} + q_I, \quad m_I^\alpha = m_I, \quad (3.40)$$

o que resulta na seguinte expressão para a energia livre,

$$\begin{aligned} \beta f = & -\frac{\beta^2 J^2}{2} (1 - q_A^r q_B^r) + \beta J_0 m_A m_B \\ & + \frac{1}{2} \sum_{I \in \{A, B\}} \left[ \frac{m_I^2}{1 - q_I} - 2\beta H m_I - \ln(1 - q_I) - \frac{q_I}{1 - q_I} - n \ln 2\pi \right], \end{aligned} \quad (3.41)$$

com  $m_I$  e  $q_I$  obedecendo às condições de extremo,

$$\frac{m_A}{1 - q_A} - \beta H + \beta J_0 m_B = 0, \quad (3.42)$$

$$\frac{m_A^2 - q_A}{(1 - q_A)^2} + \beta^2 J^2 r q_A^{r-1} q_B^r = 0, \quad (3.43)$$

com equações similares válidas para a substituição  $A \leftrightarrow B$ .

### 3.5 Solução de Parisi com uma Etapa de Quebra de Simetria entre Réplicas

A solução de Parisi com uma etapa de quebra de simetria entre réplicas consiste em considerar o seguinte *Ansatz* sobre a estrutura de  $\mathbf{q}$ ,

$$q_I^{\alpha\beta} = (1 - q_{1I}) \delta^{\alpha\beta} + (q_{1I} - q_{0I}) \epsilon^{\alpha\beta} + q_{0I}, \quad m_I^\alpha = m_I, \quad (3.44)$$



onde,

$$\epsilon^{\alpha\beta} = \begin{cases} 1, & \text{se } \alpha \text{ e } \beta \text{ pertencem a um bloco diagonal,} \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases}$$

As condições de extremo são dadas então por,

$$\frac{m_A}{1 - \bar{q}_A} - \beta H + \beta J_0 m_B = 0, \quad (3.45)$$

$$\beta^2 J^2 r (q_{1A})^{r-1} (q_{1B})^r + B'_A + D'_A = 0, \quad (3.46)$$

$$\beta^2 J^2 r (q_{0A})^{r-1} (q_{0B})^r + D'_A = 0, \quad (3.47)$$

onde,

$$B'_A = \frac{(q_{0A} - q_{1A})}{(1 - q_{1A})(1 - \bar{q}_A)}, \quad D'_A = -\frac{(q_{0A} - m_A^2)}{(1 - \bar{q}_A)^2}, \quad (3.48)$$

com

$$\bar{q}_I^p = x q_{0I}^p + (1 - x) q_{1I}^p, \quad (3.49)$$

e equações similares são válidas para a substituição  $A \leftrightarrow B$ . Além das equações acima, é necessário considerar a equação proveniente da maximização de  $G_0$  em função da dimensão dos blocos diagonais  $x$ , a saber,

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \sum_{I \in \{A, B\}} & \left[ \frac{(m_I^2 - q_{0I})}{(1 - \bar{q}_I)^2} (q_{0I} - q_{1I}) + \frac{1}{x^2} \ln \frac{(1 - \bar{q}_I)}{(1 - q_{1I})} + \frac{1}{x} \frac{(q_{0I} - q_{1I})}{(1 - \bar{q}_I)} \right] \\ & + \frac{\beta^2 J^2}{2} \left( q_{0A}^r q_{0B}^r - q_{1A}^r q_{1B}^r \right) = 0. \end{aligned} \quad (3.50)$$

Note que a mesma dimensão de blocos diagonais  $x$  é usada para ambas as sub-redes  $A$  e  $B$ , mesmo não havendo motivo *a priori* para descartar as soluções com  $x_A \neq x_B$ . De fato, é possível demonstrar que a solução com  $x_A \neq x_B$  levaria, no mínimo <sup>2</sup>, à solução réplica simétrica, cujo comportamento é conhecido (*vide* equações (3.41)-(3.43)), possibilitando-nos desconsiderá-la por completo. Considere por exemplo a condição de extremo (3.38),

$$\left( \mathbf{q}'_A \right)^{\alpha\beta} + \beta^2 J^2 r \left( q_A^{\alpha\beta} \right)^{r-1} \left( q_B^{\alpha\beta} \right)^r = 0. \quad (3.51)$$

<sup>2</sup>A colocação “no mínimo” deve-se à possibilidade, não verificada pelo autor, da solução com  $x_A \neq x_B$  levar a equações incompatíveis.

É fácil verificar que, segundo a solução 1RSB,

$$(\mathbf{q}'^{-1})^{\alpha\beta} = A'_A \delta^{\alpha\beta} + B'_A \epsilon^{\alpha\beta} + D'_A, \quad (3.52)$$

onde  $B'_A$  e  $D'_A$  são dados por (3.48), e  $A'_A$  é dado por,

$$A'_A = \frac{1}{1 - q_{1A}}. \quad (3.53)$$

Se  $x_A$  for igual a  $x_B$ , escolhendo  $\alpha$  e  $\beta$  tal que o elemento está fora dos blocos diagonais, a equação resultante é a (3.47). Entretanto, supondo  $x_A < x_B$ , é possível obter duas expressões para (3.38) considerando um elemento fora do bloco diagonal definido por  $x_A$ . A primeira escolhendo  $\alpha$  e  $\beta$  tal que o elemento está dentro do bloco diagonal definido por  $x_B$ , levando portanto à equação,

$$\beta^2 J^2 r (q_{0A})^{r-1} (q_{1B})^r + D'_A = 0, \quad (3.54)$$

e a segunda considerando  $\alpha$  e  $\beta$  tal que o elemento está fora do bloco diagonal definido por  $x_B$ , levando à outra equação,

$$\beta^2 J^2 r (q_{0A})^{r-1} (q_{0B})^r + D'_A = 0, \quad (3.55)$$

de forma que (3.54) e (3.55) levam à solução réplica simétrica, justificando assim a nossa escolha  $x_A = x_B$ .

### 3.6 Diagrama de fases

A facilidade geralmente encontrada em diversos modelos na construção de diagramas de fase consistentes com a solução réplica simétrica não ocorre aqui. O fato é que as linhas de transição obtidas são insuficientes, e pouca atenção foi dada às soluções numéricas das equações (3.42) e (3.43), haja vista a factibilidade da análise do diagrama completo, com sua solução mais geral (1RSB). Na Figura 3.6 é apresentado o diagrama de fases a campo nulo (incompleto) do modelo para  $r = 3$ , considerando apenas a solução réplica simétrica.

A linha de transição entre as fases antiferromagnética e paramagnética é obtida ao considerarmos o seguinte *Ansatz*:  $m \equiv m_A = -m_B$  e  $q \equiv q_A = q_B$ , de forma que, se  $m \neq 0$ , temos, segundo a equação (3.42),

$$q = 1 - \frac{T}{J_0},$$

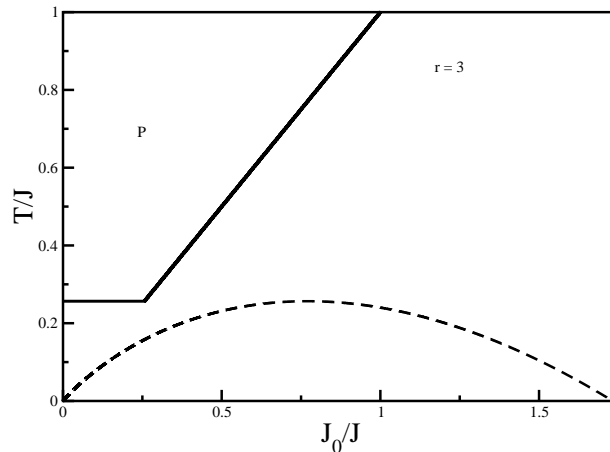


Figura 3.6: Diagrama de fases a campo nulo do modelo de vidro de spin esférico antiferromagnético segundo a solução réplica simétrica. A letra P indica a região onde a fase é paramagnética.

e a reta  $T/J \times J_0/J^3$  é obtida no limite  $q \rightarrow 0$ , que corresponde a  $m_A = m_B = 0$ . Além disto, segundo (3.43), a condição  $m^2 \geq 0$  implica que  $q \geq r q^{2r-1} (1-q)^2 / T^2$ , condição satisfeita apenas na região abaixo da linha tracejada na Figura 3.6. A linha de transição entre as fases vidro de spin e paramagnética pode ser obtida fazendo  $m_A = m_B = 0$  em (3.42) e (3.43), e verificando a temperatura em que a equação (3.43) admite solução  $q$  diferente de zero. A linha de transição entre as fases vidro de spin e antiferromagnética não foi identificada.

Apesar da relativa facilidade no tratamento das equações da solução réplica simétrica, os resultados sobre o diagrama de fases obtidos considerando-se apenas este *Ansatz* sobre a estrutura de  $\mathbf{q}$  são inconclusivos, devido principalmente à possibilidade da existência de estados meta-estáveis caracterizados por esta solução. O fato é que espera-se que existam regiões no diagrama de fase onde a solução réplica simétrica seja estável, porém com energia livre menor que a da solução 1RSB, também estável. Isto de fato ocorre no modelo de vidro de spin esférico com interação de multi-spins em uma sub-rede (Crisanti e Sommers, 1992), fazendo-se necessário portanto a análise da solução mais geral, com uma etapa de quebra de simetria entre réplicas.

O diagrama de fases (completo) a campo nulo para  $r = 3$  é apresentado na Figura

<sup>3</sup>Por conveniência, consideramos nesta seção  $k = 1$ .

3.7. Os eixos são  $J_0/J$  e  $T/J$ . Quatro fases são obtidas no diagrama: Paramagnética (P), vidro de spin (SG), antiferromagnética (A) e antiferromagnética com quebra de simetria ou fase mista (MX). As fases paramagnética e antiferromagnética são descritas pela solução réplica simétrica, com  $m_A = m_B$  para a fase paramagnética e  $m_A \neq m_B$  para a fase antiferromagnética. A solução de Parisi com uma etapa de quebra de simetria entre réplicas descreve as fases vidro de spin e mista, com  $m_A = m_B$  na fase vidro de spin e  $m_A \neq m_B$  na fase mista.

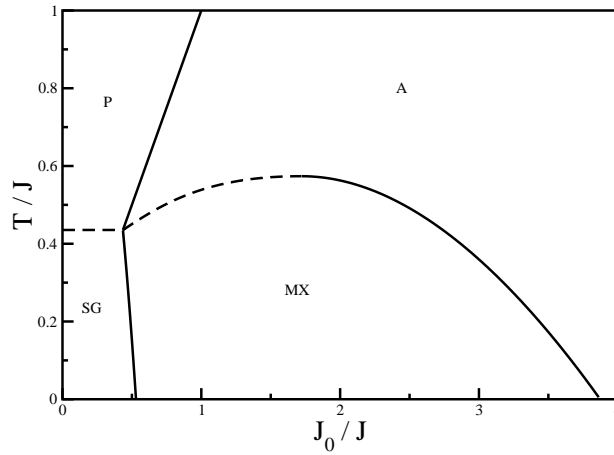


Figura 3.7: Diagrama de fases a campo nulo do modelo de vidro de spin esférico antiferromagnético. A, P, SG e MX denotam as fases antiferromagnética, paramagnética, vidro de spin e mista respectivamente.

A linha de transição entre as fases antiferromagnética e paramagnética é obtida considerando-se a região à direita da linha, na fase antiferromagnética, de forma que o *Ansatz*  $m \equiv m_A = -m_B$  e  $q \equiv q_A = q_B$ , resulta, no limite  $q \rightarrow 0$ , da equação (3.45),

$$T/J = J_0/J. \quad (3.56)$$

Fazendo  $m = 0$  e mantendo o *Ansatz*  $q \equiv q_A = q_B$ , obtemos um conjunto de equações idênticas a (2.122) e (2.123) com  $H = 0$  e  $p = 2r$ , sendo possível então obter a temperatura para a qual existe solução  $q_1 \neq 0$  de forma similar à apresentada no Capítulo 2, e portanto a linha de transição entre as fases vidro de spin e paramagnética.

É possível ainda estabelecer contato com o modelo em uma sub-rede combinando as

equações (3.47) e (3.46) para escrever,

$$\frac{\beta^2 J^2 (2r)}{2} \left( q_1^{(2r)-1} - q_0^{(2r)-1} \right) = - \frac{(q_0 - q_1)}{(1 - q_1)(1 - \bar{q})} \quad (3.57)$$

e ainda, substituindo (3.47) em (3.50),

$$\frac{\beta^2 J^2}{2} \left( q_1^{(2r)} - q_0^{(2r)} \right) - \frac{\beta^2 J^2 (2r)}{2} q_0^{(2r)-1} (q_1 - q_0) = - \frac{q_1 - q_0}{x(1 - \bar{q})} - \frac{1}{x^2} \ln \left( \frac{1 - q_1}{1 - \bar{q}} \right), \quad (3.58)$$

de forma que (3.57) e (3.58) são idênticas às equações (2.123) e (2.128) para  $p = 2r$ , e portanto a obtenção das linhas de transição entre as fases vidro de spin e mista e entre as fases mista e antiferromagnética pode ser realizada de maneira semelhante à apresentada no Capítulo 2. A transição entre as fases mista e antiferromagnética é contínua (C1RSB) à direita do máximo e descontínua (D1RSB) à esquerda do máximo. A linha de transição entre as fases paramagnética e vidro de spin é descontínua e as transições entre as fases vidro de spin e mista e entre as fases paramagnética e antiferromagnética são contínuas.

O diagrama de fases apresentado na Figura 3.7 é idêntico ao diagrama de fases do modelo em uma sub-rede (*vide* Figura 2.6), ao menos qualitativamente, substituindo a fase ferromagnética pela fase antiferromagnética. Isto sugere a possibilidade da existência de um mapeamento da versão em duas sub-redes a campo nulo no modelo em uma sub-rede, como ocorre entre o modelo proposto por Korenblit e Shender (Korenblit e Shender, 1985) e o modelo SK. Este mapeamento ainda não foi verificado pelo autor.

Quando comparado o diagrama apresentado na Figura 3.7 a outros diagramas de fases provenientes de modelos propostos para explicar o comportamento vidro de spin em materiais antiferromagnéticos, o que observa-se é apenas uma pequena diferença qualitativa. A versão em duas sub-redes do REM (Almeida, 1998) e do modelo SK (Korenblit e Shender, 1985), assim como o modelo de vidro de spin esférico antiferromagnético apresentado neste capítulo, apresentam quatro fases no diagrama de fases a campo nulo, a saber, antiferromagnética, paramagnética, vidro de spin e mista. Entretanto, no diagrama obtido por Almeida (*vide* Figura 3.5), há ocorrência da fase mista a temperatura finita mesmo para valores elevados de  $J_0$ , enquanto no diagrama obtido por Korenblit e Shender (*vide* Figura 3.4), a fase mista é possível apenas para  $T \rightarrow 0$ , quando  $J_0 \gg 1$ , comportamentos suavemente diferentes dos observados na Figura 3.7. A diferença entre estes três modelos é óbvia e estranho seria obter comportamentos quantitativos idênticos em todos os casos.

O diagrama campo magnético versus temperatura é apresentado na Figura 3.8 para  $r = 3$  e  $J_0 = 1,5$ . Novamente, A, P, SG e MX denotam as fases antiferromagnética, paramagnética, vidro de spin e mista respectivamente, sendo que as linhas contínuas representam transições de fase contínuas e as linhas tracejadas transições descontínuas.

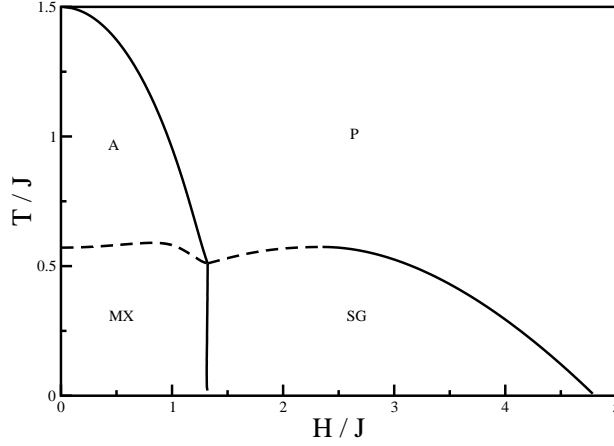


Figura 3.8: Diagrama de fases campo versus temperatura do modelo de vidro de spin esférico antiferromagnético. A, P, SG e MX denotam as fases antiferromagnética, paramagnética, vidro de spin e mista respectivamente.

A linha de transição entre as fases antiferromagnética e paramagnética pode ser obtida deslocando-se infinitesimalmente as soluções  $q_A$  e  $q_B$  da solução paramagnética  $q \equiv q_A = q_B$ <sup>4</sup>, isto é,

$$q_A = q + \epsilon_A, \quad q_B = q + \epsilon_B,$$

de forma que é possível expandir as equações (3.42) e (3.43) em primeira ordem em  $\epsilon$  para obter, após algumas manipulações algébricas,

$$\left\{ \frac{G}{G^2 - \beta^2 J_0^2} + \frac{1}{2G^2 (q - \beta^2 F)} \left[ 1 + \beta^2 F \left( 2G + \frac{1-r}{q} \right) \right] \right\} \epsilon_A - \left\{ \frac{\beta J_0}{G^2 - \beta^2 J_0^2} + \frac{1}{2G^2 (q - \beta^2 F)} \beta^2 F \left( \frac{r}{q} \right) \right\} \epsilon_B = 0, \quad (3.59)$$

$$- \left\{ \frac{\beta J_0}{G^2 - \beta^2 J_0^2} + \frac{1}{2G^2 (q - \beta^2 F)} \beta^2 F \left( \frac{r}{q} \right) \right\} \epsilon_A + \left\{ \frac{G}{G^2 - \beta^2 J_0^2} + \frac{1}{2G^2 (q - \beta^2 F)} \left[ 1 + \beta^2 F \left( 2G + \frac{1-r}{q} \right) \right] \right\} \epsilon_B = 0, \quad (3.60)$$

<sup>4</sup>Note que a presença de um campo magnético não nulo inibe a utilização do *Ansatz*  $q_A = q_B$ ,  $m_A = -m_B$ , razoável para  $H = 0$ .

onde,

$$G = \frac{1}{1-q}, \quad F = J^2 r q^{2r-1} (1-q)^2,$$

e portanto, para a solução não trivial,

$$\beta = \frac{1}{J_0} \left[ G + \frac{2G^2 (q - \beta^2 F)}{1 + \beta^2 F G \frac{(1+q)}{q}} \right]. \quad (3.61)$$

A linha de transição é obtida resolvendo-se a equação (3.61) em conjunto com a equação correspondente à solução paramagnética,

$$\beta H = \sqrt{q - \beta^2 J^2 r q^{2r-1} (1-q)^2} \left( \frac{1}{1-q} + \beta J_0 \right), \quad (3.62)$$

ambas parametrizadas por  $q$ . É evidente que esta linha de transição é válida apenas enquanto a solução réplica simétrica for válida.

As transições contínua (C1RSB) e descontínua (D1RSB) entre as fases vidro de spin e paramagnética podem ser obtidas de modo semelhante ao aplicado ao diagrama de fases a campo nulo, uma vez que (3.57) e (3.58) também são válidas nestas regiões, e as linhas de transição entre as fases mista e vidro de spin e entre as fases mista e antiferromagnética podem ser obtidas através de soluções numéricas das condições de ponto estacionário da solução 1RSB (3.45)-(3.50). De fato, da fase mista, a transição para a fase vidro de spin é obtida quando as sub-redes coincidem, isto é,  $m_A = m_B$  e  $q_A = q_B$ , e a transição para a fase antiferromagnética ocorre quando  $x = 1$ , de forma semelhante à transição do modelo em uma sub-rede.

O comportamento dos parâmetros de ordem do modelo no diagrama de fases da Figura 3.8 é bem ilustrado na Figura 3.9, onde são apresentadas as curvas  $q_{0A}$ ,  $q_{0B}$ ,  $q_{1A}$ ,  $q_{1B}$ ,  $m_A$  e  $m_B$  em função do campo magnético  $H$ , para  $T = 0,5$ ,  $J_0 = 1,5$  e  $r = 3$ . Note que para  $H = 0$ , temos  $m_A = -m_B$ ,  $q_{0A} = q_{0B}$  e  $q_{1A} = q_{1B}$ , justificando *a posteriori* o *Ansatz* adotado na construção do diagrama de fases ( $J_0 \times T$ ) a campo nulo. As magnetizações nas sub-redes  $A$  e  $B$  igualam-se para  $H \approx 1,34$  (assim como  $q_0$  e  $q_1$ ), indicando uma transição de uma fase mista para uma fase vidro de spin, pois para  $H > 0$ ,  $q_0$  e  $q_1$  permanecem diferentes até  $H \approx 3,2$ , onde ocorre a transição para a fase paramagnética.

Enquanto no modelo de vidro de spin esférico em uma sub-rede a presença de um campo

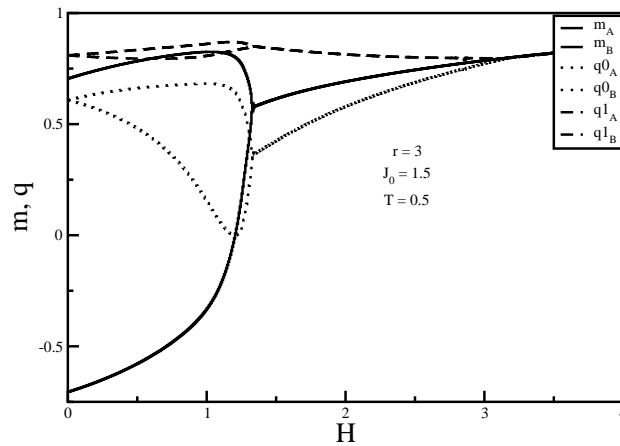


Figura 3.9: Parâmetros de ordem versus temperatura para  $T = 0,5$ ,  $J_0 = 1,5$  e  $r = 3$ .

magnético aplicado destrói a transição entre as fases ferromagnética e paramagnética, o modelo de vidro de spin esférico antiferromagnético apresenta um comportamento muito mais rico e interessante. Como vimos, quatro fases estão presentes no diagrama de fases, antiferromagnética, vidro de spin, paramagnética e mista. Este comportamento tem sido amplamente descrito experimentalmente (Yoshizawa et al., 1987, 1994; Wong et al., 1982, 1985; Bertrand et al., 1982) e teoricamente (Almeida, 1998, 1999; Fyodorov et al., 1987b, 1987a; Korenblit e Shender, 1985; Takayama, 1988; Vieira et al., 2000). Os resultados aqui obtidos são semelhantes, ao menos qualitativamente, aos obtidos em trabalhos anteriores para as versões em duas sub-redes do modelo SK (*vide* Figura 3.4) e do REM (*vide* Figura 3.5). Note que ambas as fases, antiferromagnética e vidro de spin, são destruídas para campos magnéticos elevados.



## Capítulo 4

# Considerações Finais

Neste trabalho, estudamos as propriedades estáticas de um modelo de vidro de spin esférico antiferromagnético, através da aplicação do método de réplicas. O modelo, com interações de alcance infinito, pode ser resolvido exatamente, sendo que espera-se que sua solução mais geral seja a solução de Parisi com uma etapa de quebra de simetria entre réplicas. Quatro fases são observadas nos diagramas a campo nulo, no plano  $(J_0, T)$ , e na presença de campo magnético, no plano  $(H, T)$ , a saber, as fases paramagnética, antiferromagnética, vidro de spin e mista (ou antiferromagnética com quebra de simetria). Transições contínuas e descontínuas são obtidas entre estas fases.

A presença de um comportamento característico de uma fase vidro de spin, assim como de coexistência entre ordenamentos vidro de spin e antiferromagnético, observadas nesta dissertação, têm sido amplamente descritas em trabalhos anteriores, tanto experimentais (Yoshizawa et al., 1987, 1994; Wong et al., 1982, 1985; Bertrand et al., 1982) quanto teóricos (Almeida, 1998, 1999; Fyodorov et al., 1987b, 1987a; Korenblit e Shender, 1985; Takayama, 1988; Vieira et al., 2000). Os resultados aqui obtidos concordam bem, ao menos qualitativamente, com modelos semelhantes propostos em duas sub-redes, como o modelo de Korenblit e Shender (Korenblit e Shender, 1985), e a versão em duas sub-redes do modelo de energias aleatórias, proposta por Almeida (Almeida, 1998, 1999).

As fases vidro de spin e mista são caracterizadas pela solução de Parisi com uma etapa de quebra de simetria entre réplicas, haja vista a energia livre desta solução é maior do que

a energia livre da solução réplica simétrica <sup>1</sup>. Espera-se que, como ocorre no modelo em uma sub-rede, a solução com quebra de simetria seja estável em todo o diagrama de fases, e que existam regiões onde a solução réplica simétrica é estável mas possui uma energia livre menor do que a solução 1RSB, caracterizando um comportamento meta-estável. A análise da estabilidade destas soluções ainda está em andamento. É interessante ainda verificar se a solução mais geral com quebra de simetria é de fato a solução de Parisi com uma etapa de quebra de simetria entre réplicas. Este é o caso em toda a região onde não há ordenamento antiferromagnético, pois a energia livre obtida é a mesma do modelo em uma sub-rede.

É possível também analisar versões mais sofisticadas do modelo, incluindo interações do tipo vidro de spin e ferromagnética dentro de cada sub-rede. A hamiltoniana seria dada por,

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_A + \mathcal{H}_B + \mathcal{H}_{AB},$$

onde

$$\mathcal{H}_A = - \sum_{(i_1, \dots, i_p) \in A} J'_{i_1 \dots i_p} S_{i_1} \dots S_{i_p} - \frac{J'_0}{N} \sum_{(i,j) \in A} S_i S_j - H \sum_{i \in A} S_i,$$

$$\mathcal{H}_B = - \sum_{(i_1, \dots, i_p) \in B} J'_{i_1 \dots i_p} S_{i_1} \dots S_{i_p} - \frac{J'_0}{N} \sum_{(i,j) \in B} S_i S_j - H \sum_{i \in B} S_i,$$

descrevem as interações dentro de cada uma das sub-redes, e

$$\mathcal{H}_{AB} = - \sum_{\substack{i_1, \dots, i_r \in A \\ j_1, \dots, j_r \in B}} J_{i_1 \dots i_r j_1 \dots j_r} S_{i_1} \dots S_{i_r} S_{j_1} \dots S_{j_r} + \frac{J_0}{N} \sum_{\substack{i \in A \\ j \in B}} S_i S_j,$$

representa a interação entre as sub-redes.  $H$  é o campo magnético aplicado,  $J_0$  representa a interação antiferromagnética entre as sub-redes, e  $J'_0$  a interação ferromagnética dentro de cada uma das sub-redes.  $J_{i_1 \dots i_r j_1 \dots j_r}$  representa a interação de conjuntos de  $r$  spins entre diferentes sub-redes e  $J_{i_1 \dots i_p}$  a interação de conjunto de  $p$  spins numa mesma sub-rede. Essas interações são variáveis aleatórias gaussianas independentes e identicamente distribuídas com média zero e variâncias

$$\langle J_{i_1 \dots i_r j_1 \dots j_r}^2 \rangle = \frac{J^2 (r!)^2}{N^{2r-1}}, \quad \langle J_{i_1 \dots i_p}^2 \rangle = \frac{J'^2 p!}{2N^{p-1}},$$

<sup>1</sup>A análise da estabilidade da solução réplica simétrica não é suficiente para definir os limites destas fases.

---

onde a dependência em  $N$  foi escolhida de tal modo que a energia livre seja extensiva. Como perspectivas para trabalhos futuros, planeja-se ainda estudar o comportamento dinâmico do mesmo modelo.



# Referências Bibliográficas

- Almeida, J. R. L. de. (1998). “Magnetic properties of the antiferromagnetic random energy model”. *Physica Status Solidi B-Basic Research*, **209**(1), 153-159.
- Almeida, J. R. L. de. (1999). “Susceptibilities of the antiferromagnet random energy model”. *European Phys. J. B*, **8**(2), 269-273.
- Almeida, J. R. L. de, e Thouless, D. J. (1978). “Stability of the Sherrington-Kirkpatrick solution of a spin glass model”. *J. Phys. A: Math. Gen.*, **11**(5), 983-990.
- Berlin, T. H., e Kac, M. (1952). “The spherical model of a ferromagnet”. *Phys. Review*, **86**(6), 821-835.
- Bertrand, D., Fert, A. R., Schmidt, M. C., Bensamka, F., e Legrand, S. (1982). “Observation of a spin glass-like behaviour in dilute system  $\text{Fe}_{1-x}\text{Mg}_x\text{Cl}_2$ ”. *J. Phys. C: Solid State Phys.*, **15**, L883-L888.
- Binder, K., e Young, A. P. (1986). “Spin glasses: Experimental facts, theoretical concepts, and open questions”. *Reviews of Modern Physics*, **58**(4), 801-976.
- Blandin, A., Gabay, M., e Garel, T. (1980). “On the mean-field theory of spin glasses”. *J. Phys. C: Solid State Phys.*, **13**, 403-418.
- Bray, A. J., e Moore, M. A. (1978). “Replica-symmetry breaking in spin-glass theories”. *Phys. Rev. Lett.*, **41**, 1068-1072.
- Brout, R. (1959). “Statistical mechanical theory of a random ferromagnetic system”. *Physical Review*, **115**, 824-835.
- Bruijn, N. G. (1981). *Asymptotic methods in analysis*. Dover, New York.

- Canella, V., e Mydosh, J. A. (1972). “Magnetic ordering in gold-iron alloys”. *Phys. Rev. B*, **6**, 4220-4237.
- Crisanti, A., Horner, H., e Sommers, H. J. (1993). “The spherical  $p$ -spin interaction spin glass model: the dynamics”. *Zeitschrift für Physik B*, **92**, 257-271.
- Crisanti, A., e Sommers, H. J. (1992). “The spherical  $p$ -spin interaction spin glass model: the statics”. *Zeitschrift für Physik B*, **87**, 341-354.
- Derrida, B. (1980). “Random-energy model - limit of a family of disordered models”. *Phys. Review Letters*, **45**(2), 79-82.
- Edwards, S. F., e Anderson, P. W. (1975). “Theory of spin glasses”. *Journal of Physics F-Metal Physics*, **5**(5), 965-974.
- Falk, H. (1970). “Inequalities of J. W. Gibbs”. *American Journal of Physics*, **38**, 858-869.
- Fischer, K. H., e Hertz, J. A. (1991). *Spin glasses*. Cambridge University Press, Cambridge.
- Fyodorov, Y. V., Korenblit, I. Y., e Shender, E. F. (1987a). “Antiferromagnetic Ising spin glass”. *J. Phys. C: Solid State Phys.*, **20**, 1835-1839.
- Fyodorov, Y. V., Korenblit, I. Y., e Shender, E. F. (1987b). “Phase transitions in frustrated metamagnets”. *Europhys. Lett.*, **4**(7), 827-832.
- Gross, D. J., e Mezard, M. (1984). “The simplest spin-glass”. *Nuclear Phys. B*, **240**(4), 431-452.
- Hemmen, J. L. van, e Palmer, R. G. (1979). “The replica method and a solvable spin glass model”. *J. Phys. A: Math. Gen.*, **12**(4), 563-580.
- Hertz, J. A., Sherrington, D., e Nieuwenhuizen, T. M. (1999). “Competition between glassiness and order in a multispin glass”. *Phys. Review E*, **60**(3), 2460-2463.
- Kirkpatrick, S., e Sherrington, D. (1978). “Infinite-ranged models of spin-glasses”. *Physical Review B*, **17**(11), 4384-4403.

- Korenblit, I. Y., e Shender, E. F. (1985). “Spin glass in an Ising two-sublattice magnet”. *Sov. Phys. JETP*, **62**(5), 1785-1795.
- Kosterlitz, J. M., Thouless, D. J., e Jones, R. C. (1976). “Spherical model of a spin-glass”. *Phys. Review Letters*, **36**(20), 1217-1220.
- Mezard, M., Parisi, G., e Virasoro, M. A. (1987). *Spin glass theory and beyond*. World Scientific, Singapore.
- Nishimori, H. (2001). *Statistical physics of spin glasses and information processing*. Oxford University Press, Oxford.
- Parisi, G. (1979). “Toward a mean field theory for spin glasses”. *Physics Letters*, **73A**(3), 203-205.
- Parisi, G. (1980a). “Magnetic properties of spin glasses in a new mean field theory”. *J. Phys. A: Math. Gen.*, **13**, 1887-1895.
- Parisi, G. (1980b). “The order parameter for spin glasses: A function on the interval 0-1”. *J. Phys. A: Math. Gen.*, **13**, 1101-1112.
- Parisi, G. (1980c). “A sequence of approximated solutions to the s-k model for spin glasses”. *J. Phys. A: Math Gen.*, **13**, L115-L121.
- Salinas, S. R. A. (1997). *Introdução à física estatística* (second ed.). Edusp.
- Sherrington, D., e Kirkpatrick, S. (1975). “Solvable model of a spin-glass”. *Physical Review Letters*, **35**(26), 1792-1796.
- Sherrington, D., e Southern, B. W. (1975). “Spin glass versus ferromagnet”. *Journal of Physics F-Metal Physics*, **5**, L49-L53.
- Stanley, H. G. (1971). *Phase transition and critical phenomena*. Oxford University Press, Oxford.
- Takayama, H. (1988). “An extended mean field model for spin glasses: Antiferromagnetic-spin glass systems”. *Progress of Theoretical Physics*, **80**(5), 827-839.

- Vieira, S. R., Nobre, F. D., e Yokoi, C. S. O. (2000). “Effects of random fields in an antiferromagnetic Ising spin glass”. *Phys. Rev. E*, **61**(5), 4760-4768.
- Wong, P., Molnar, S. von, Palstra, T. T. M., Mydosh, J. A., Yoshizawa, H., Shapiro, S. M., e Ito, A. (1985). “Coexistence of spin-glass and antiferromagnetic orders in the Ising system  $\text{Fe}_{0.55}\text{Mg}_{0.45}\text{Cl}_2$ ”. *Physical Review Letters*, **55**(19), 2043-2046.
- Wong, P.-Z., Molnar, S. von, e Dimon, P. (1982). “Random-field effects in  $\text{Fe}_{1-x}\text{Mg}_x\text{Cl}_2$ ”. *J. Appl. Phys.*, **53**(11), 7954-7956.
- Yoshizawa, H., Mitsuda, S., Aruga, H., e Ito, A. (1987). “Mixed phase of spin-glass ordering and antiferromagnetism in an Ising system,  $\text{Fe}_x\text{Mn}_{1-x}\text{TiO}_3$ ”. *Physical Review Letters*, **59**(20), 2364-2367.
- Yoshizawa, H., Mori, H., Kawano, H., Aruga-Katori, H., Mitsuda, S., e Ito, A. (1994). “Phase diagram of a reentrant Ising spin glass  $\text{Fe}_{0.6}\text{Mn}_{0.4}\text{TiO}_3$  on the magnetic field-temperature plane”. *J. Phys. Soc. Japan*, **63**(8), 3145-3157.