

08

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO NORTE
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E DA TERRA
DEPARTAMENTO DE FÍSICA TEÓRICA E EXPERIMENTAL

Efeitos de Acoplamentos Biquadráticos e Campos Aleatórios em Vidros de Spins

João Medeiros de Araújo

Orientador: Prof. Dr. Francisco Alexandre da Costa

Tese apresentada ao Departamento de Física
Téorica e Experimental da Universidade Federal
do Rio Grande do Norte como requisito parcial
para a obtenção do grau de Doutor em Física.

Natal, janeiro de 2000



MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO E DO DESPORTO
UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO NORTE
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E DA TERRA
DEPARTAMENTO DE FÍSICA TEÓRICA E EXPERIMENTAL
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA
Campus Universitário, 59072-970 Natal-RN - Tel (084 215-3791)

DECLARAÇÃO

Declaramos, para todos os fins, que o aluno **JOÃO MEDEIROS DE ARAÚJO** defendeu sua Tese de Doutorado intitulada "**Efeitos de acoplamentos biquadráticos e campos aleatórios em vidros de spins**", em 14 de janeiro de 2000, no Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal do Rio Grande do Norte, tendo obtido conceito "**.....**".

Natal, 14 de janeiro de 2000.

Francisco Alexandre da Costa

Prof. Dr. Francisco Alexandre da Costa - Orientador/UFRN

Carlos Seihiti Orii Yokoi

Prof. Dr. Carlos Seihiti Orii Yokoi - Examinador Externo/IF-USP

Jairo Rolim Lopes de Almeida

Prof. Dr. Jairo Rolim Lopes de Almeida - Examinador Externo/UFPE

Ananias Monteiro Mariz

Prof. Dr. Ananias Monteiro Mariz - Examinador Interno/UFRN

Fernando Dantas Nobre

Prof. Dr. Fernando Dantas Nobre - Examinador Interno/UFRN

VISTO

Nilson Sena de Almeida
Prof. Dr. Nilson Sena de Almeida
Coordenador do PPGF

Conteúdo

Agradecimentos	iv
Lista de abreviaturas	v
Resumo	vi
Abstract	vii
1 Introdução	1
2 Efeitos de acoplamentos biquadráticos aleatórios em um vidro de spins com $S = 1$	10
2.1 Introdução	10
2.2 O modelo e as equações básicas	12
2.3 Solução com simetria entre réplicas	16
2.4 Fronteira da fase paramagnética	18
2.5 Análise de estabilidade da solução com simetria entre réplicas	19
2.5.1 Autovalores do tipo I	22
2.5.2 Autovalores do tipo II	23
2.5.3 Autovalores do tipo III	25
2.6 Diagrama de fases na solução com simetria entre réplicas	27
2.7 Conclusões	34

3	Um modelo aleatório de spin 1 com interações de p-spins	36
3.1	Introdução	36
3.2	O modelo e as equações básicas	39
3.3	Solução com simetria entre réplicas.	43
3.3.1	Limite de $p \rightarrow \infty$	44
3.4	Análise de estabilidade de Almeida-Thouless da solução com simetria entre réplicas	48
3.4.1	Autovalores longitudinais // transversais	49
3.5	Solução com um passo de quebra de simetria entre réplicas	50
3.5.1	Limite $p \rightarrow \infty$	54
3.5.2	Diagrama de fases no limite $p \rightarrow \infty$, considerando um passo de quebra de simetria	56
3.6	Conclusões	61
4	O modelo Sherrington-Kirkpatrick na presença de um campo magnético aleatório trimodal	64
4.1	Introdução	64
4.2	O modelo e as equações básicas	66
4.3	Solução com simetria entre réplicas	69
4.4	Diagramas de fases na solução com simetria entre réplicas	71
4.5	Diagrama de fases para $T = 0$	80
4.6	Conclusões	87
5	Conclusões	91
A	Cálculo da energia livre por spin na solução com réplicas simétricas para o modelo de vidro de spins com interação quadrupolar aleatória	94
B	Cálculos assintóticos para valores grandes de K na solução paramagnética	97

C	Elementos da matriz de estabilidade para o modelo de vidro de spins com interação quadrupolar aleatória	101
D	Cálculo da distribuição de probabilidades de energias para o vidro de spins com interações entre p spins	105
E	Elementos da matriz de estabilidade para o modelo de vidro de spins com interação entre p spins	110
F	Expansão em séries de potências da equação da magnetização (4.18)	113
G	Equivalência das condições para fronteiras críticas na expansão de Landau e na expansão da equação da magnetização	123

Agradecimentos

Ao Prof. **Francisco Alexandre da Costa**, por sua orientação durante este período. Também quero agradecer a sua confiança depositada em meu trabalho e sua hospitalidade nas minhas passagens pelo Rio.

Ao Prof. **Fernando Dantas Nobre**, por suas sugestões e acompanhamento durante todo o trabalho.

A Todos os Professores do DFTE/UFRN, que colaboraram para minha formação.

A Todos os Professores do Curso de Física da URRN, especialmente, **Ana Lúcia**, **Carlos Ruiz**, **Idalmir**, **Manoel**, **Piolho**, **Valdomiro** e **Vamberto**, pelo apoio na reta final deste trabalho.

A Todos os Colegas do curso de Física. Em particular, a **Ana Lúcia**, **Claudionor**, **Dory Hélio**, **Manoel**, **Raimundo** e **Selma**.

A Minha Família, pela confiança e tolerância à minha ausência, principalmente **Lucy**, **Raphael**, **Gabriel** e **Lucas**.

A **Nalva**, por sua direta colaboração.

A **URRN**, pelo apoio financeiro.

A todos que direta ou indiretamente contribuíram para este trabalho.

Lista de abreviaturas

AT – Almeida e Thouless

BEG – Blume, Emery e Griffiths

ISG – Ising Spin Glass

REM – Random-energy model

RFIM – Random-field Ising model

RKKY – Ruderman, Kittel, Kasuya e Yosida

SK – Sherrington e Kirkpatrick

TAP – Thouless, Anderson e Palmer

Resumo

Nesse trabalho estudamos os efeitos de acoplamentos biquadráticos e campos aleatórios em vidros de spins utilizando o método das réplicas.

O efeito do acoplamento biquadrático aleatório é estudado em um vidro de spins com spin 1 em duas situações diferentes: no caso onde as interações são entre pares de spins e no caso onde a interação ocorre entre p spins no limite $p \rightarrow \infty$. Ambos os acoplamentos (vidro de spins e biquadrático) têm distribuição de probabilidades gaussianas com média zero. Para interações entre pares de spins a solução com simetria entre réplicas fornece as fases paramagnética e vidro de spins separadas por uma linha de transições contínuas. A análise de estabilidade da solução com simetria entre réplicas fornece, além da instabilidade usual associada com o ordenamento vidro de spins, uma nova fase devido ao acoplamento biquadrático entre os spins. Para o caso $p = \infty$, a solução com simetria entre réplicas fornece apenas duas fases, marginalmente estáveis com relação à análise de estabilidade de Almeida e Thouless. Entretanto, uma dessas fases apresenta entropia negativa a baixas temperaturas. Implementamos também um passo de quebra de simetria nos parâmetros vidros de spins e vidro quadrupolar e obtivemos o diagrama de fases correto, incluindo a fase vidro de spins. Nesse caso, todas as transições são de primeira ordem e as três fases coexistem em um ponto triplo.

Os efeitos de campos aleatórios são estudados no modelo de Sherrington-Kirkpatrick, onde consideramos um campo aleatório com distribuição de probabilidades trimodal ($P(h_i) = p_+ \delta(h_i - h_0) + p_0 \delta(h_0) + p_- \delta(h_i + h_0)$). Mostramos que para valores convenientes de p_0 e h_0 , a fronteira ferromagnética pode apresentar transições de primeira ordem e pontos tricríticos a temperaturas finitas. Verificamos que as transições de primeira ordem estão diretamente relacionadas com a diluição do campo: as extensões dessas transições são reduzidas quando aumentamos o valor de p_0 . De fato, o valor p_0^* acima do qual todas as transições são contínuas é calculado analiticamente. Fizemos também a análise de estabilidade da solução com simetria entre réplicas e determinamos as regiões de validade desta solução.

Abstract

In this work we have studied the effects of random biquadratic and random fields in spin-glass models using the replica method.

The effect of a random biquadratic coupling was studied in two spin-1 spin-glass models: in one case the interactions occur between pairs of spins, whereas in the second one the interactions occur between p spins and the limit $p \rightarrow \infty$ is considered. Both couplings (spin glass and biquadratic) have zero-mean Gaussian probability distributions. In the first model, the replica-symmetric assumption reveals that the system presents two phases, namely, paramagnetic and spin-glass, separated by a continuous transition line. The stability analysis of the replica-symmetric solution yields, besides the usual instability associated with the spin-glass ordering, a new phase due to the random biquadratic couplings between the spins. For the case $p \rightarrow \infty$, the replica-symmetric assumption yields again only two phases, namely, paramagnetic and quadrupolar. In both these phases the spin-glass parameter is zero. Besides, it is shown that they are stable under the Almeida-Thouless stability analysis. One of them presents negative entropy at low temperatures. We developed one step of replica symmetry breaking and noticed that a new phase, the biquadratic glass phase, emerge. In this way we have obtained the correct phase diagram, with three first-order transition lines. These lines merges in a common triple point.

The effects of random fields were studied in the Sherrington-Kirkpatrick model considered in the presence of an external random magnetic field following a trimodal distribution ($P(h_i) = p_+ \delta(h_i - h_0) + p_0 \delta(h_i) + p_- \delta(h_i + h_0)$). It is shown that the border of the ferromagnetic phase may present, for conveniently chosen values of p_0 and h_0 , first-order phase transitions, as well as tricritical points at finite temperatures. It is verified that the first-order phase transitions are directly related to the dilution in the fields: the extensions of these transitions are reduced for increasing values of p_0 . In fact, the threshold value p_0^* , above which all phase transitions are continuous, is calculated analytically. The stability analysis of the replica-symmetric solution is performed and the regions of validity of such a solution are identified.

Capítulo 1

Introdução

O estudo de sistemas desordenados tem recebido considerável atenção nas últimas décadas. Em particular, os chamados vidros de spins têm sido muito estudados tanto do ponto de vista experimental quanto teórico. Porém, um entendimento satisfatório dos fenômenos presentes nos vidros de spins ainda não foi conseguido. A razão física para sua complexidade é que a energia livre a baixas temperaturas apresenta uma enorme quantidade de estados metaestáveis (mínimos e máximos) e as técnicas convencionais da mecânica estatística falham.

Os vidros de spins convencionais são misturas magnéticas onde impurezas magnéticas estão diluídas em um metal nobre e se comportam de maneira diferente dos sistemas magnéticos usuais, como os ferromagnetos, antiferromagnetos, metamagnetos, helimagnetos, etc¹. Os momentos magnéticos (spins) colocados na matriz metálica polarizam os elétrons de condução dos metais, os quais influenciam os outros momentos magnéticos e induzem um acoplamento efetivo, a interação RKKY (Ruderman e Kittel², Kasuya³ e Yosida⁴), entre os spins. A interação RKKY decai com r^{-3} e oscila com período comparável ao espaçamento da rede, podendo ser ora positiva (ferro) ou negativa (antiferromagnética). As amostras são normalmente preparadas resfriando-se rapidamente a partir de uma temperatura elevada, de forma que as impurezas ocupam posições aleatórias na rede. Assim, as interações entre as impurezas variam em magnitude e sinal. Dessa forma temos uma situação onde estão presentes os dois ingredientes necessários para obtermos o comportamento típico de vidros de spins: a desordem e frustração^{1,5-9}. A desordem

provém do fato dos spins magnéticos ficarem em posições aleatórias na rede e a frustração é devido ao fato dos spins interagirem entre si via a interação RKKY, a qual pode ser ora positiva ora negativa, ocasionando uma competição entre as interações. Os vidros de spins passaram a receber maior atenção a partir do trabalho pioneiro de Cannella e Mydosh¹⁰, no início da década de 70, onde eles observaram uma cúspide acentuada na susceptibilidade magnética em ligas metálicas do tipo AuFe e CuMn a uma temperatura T_c que seria supostamente a temperatura de transição entre uma fase desordenada para uma fase ordenada. O subsequente desenvolvimento teórico e experimental dos vidros de spins estão bem descritos em vários artigos de revisão^{1,5,6} e livros⁷⁻⁹.

As peculiaridades do comportamento magnético dos vidros de spins são melhor apreciadas fazendo uma comparação com os ferromagnetos usuais. Um ferromagneto a altas temperaturas apresenta uma magnetização quando submetido a um campo magnético. Porém, se o campo for desligado a magnetização cairá para zero rapidamente. Repetindo a experiência a baixas temperaturas, quando desligamos o campo a magnetização relaxa para um valor finito. A região de altas e baixas temperaturas é separada por uma temperatura crítica T_c , abaixo da qual a magnetização é diferente de zero quando desligamos o campo; esta é uma das características da fase ferromagnética. A transição é associada a um número considerável de efeitos, chamados fenômenos críticos. Por exemplo, na vizinhança de T_c podemos observar um forte aumento nas flutuações e várias quantidades físicas, como o calor específico e susceptibilidade, tomam valores extremamente altos. Entre estas grandezas, a susceptibilidade é de particular interesse aqui. Definida por $\chi = \partial M / \partial h$ (onde M é a magnetização e h o campo magnético), a susceptibilidade é uma medida da sensibilidade do sistema a variações do campo magnético. Quando nos aproximamos de T_c , qualquer variação no campo magnético produz grandes variações na susceptibilidade e, no limite $T \rightarrow T_c$, esta grandeza física diverge. Na prática, evidentemente, não observamos valores infinitos em qualquer quantidade física. Porém, o aumento da susceptibilidade em uma região estreita de temperaturas em torno de T_c sugere a idéia de uma singularidade matemática. No caso dos vidros de spins, a altas temperaturas eles se comportam como ferromagnetos usuais: desligando o campo a magnetização desapa-

rece. A baixas temperaturas, no entanto, tudo parece depender do tempo de observação e da história da amostra. Por exemplo, se colocarmos a amostra em um campo h a altas temperaturas e resfriarmos a mesma até uma temperatura abaixo da temperatura de transição T_f mantendo o campo fixo, iremos obter uma magnetização (M_{fc}). Por outro lado, se esfriarmos a amostra a campo nulo, a partir da mesma temperatura, e então aplicarmos um campo h , iremos obter uma magnetização (M_{zf}) diferente (maior) que a obtida quando esfriamos a amostra na presença do campo. Além disso, no resfriamento a campo nulo a magnetização, após o salto para M_{zf} quando ligamos o campo, irá aumentar de valor muito lentamente enquanto o campo estiver ligado. Quando o campo é desligado, a magnetização relaxa rapidamente para um certo valor diferente de zero e passa a cair muito lentamente. Obviamente quando ligamos o campo abaixo de T_f colocamos o sistema fora de equilíbrio, em um estado metaestável que em princípio tem longa duração. Por algum tempo acreditava-se que era possível equilibrar o sistema mantendo o campo magnético ligado, porém nenhum experimento foi capaz de mostrar esse equilíbrio. A presença de tempos de relaxação extraordinariamente longos é uma das características de sistemas desordenados em geral. Essa característica é também a principal fonte de dificuldades e incertezas em trabalhos experimentais e simulações em vidros de spins.

Do ponto de vista teórico, o modelo de Edwards e Anderson¹¹ é o arquétipo para os modelos de vidros de spins (pelo menos o que dá melhores resultados comparados com os experimentos). Nesse modelo a diluição dos momentos magnéticos e a aleatoriedade nas posições dos spins foram substituídos pela aleatoriedade nas interações dos spins. Em outras palavras, eles consideram uma rede regular onde todos os sítios são ocupados por spins e esse spins interagem entre si via uma interação de curto alcance (interações entre primeiros vizinhos) aleatória. O primeiro problema que encontramos é como calcular médias sobre a desordem quando estamos tratando com observáveis. Isso ocorre, porque os vidros de spins são sistemas temperados ("quencheds") – sistemas preparados a partir de um rápido resfriamento – e, nesse caso, temos que calcular médias sobre as várias possibilidades de configurações para em seguida calcularmos médias térmicas; o que corresponde a calcularmos médias sobre o \log da função de partição (média temperada).

No caso de sistemas recozidos (“annealeds”), que são resfriados lentamente, as médias térmicas podem ser calculadas diretamente na função de partição (média recozida), pois nesse caso o resfriamento lento permite que o sistema busque a condição de menor energia. Para tentar resolver o problema da média sobre a desordem foi utilizado uma ferramenta conhecida como método das réplicas, o qual consiste em calcular a média temperada da energia livre $\overline{\ln Z}$ (onde a barra indica média sobre as configurações das interações aleatórias) por uma média sobre n réplicas e tomar o limite $n \rightarrow 0$,

$$\overline{\ln Z} = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{Z^n - 1}{n}, \quad (1.1)$$

de forma que a média pode ser facilmente calculada. Seguindo esse procedimento e considerando que as interações entre os spins obedeciam a uma distribuição de probabilidades gaussianas com todos os spins interagindo entre si (spins de Ising ± 1), Sherrington e Kirkpatrick¹² estudaram a versão de campo médio (modelo SK) para o modelo de Edwards e Anderson. Eles obtiveram uma boa descrição qualitativa das possíveis fases dos sistema considerando uma solução com simetria entre réplicas. Porém a baixas temperaturas a fase vidro de spins apresenta uma entropia negativa. Mais tarde, de Almeida e Thouless¹³ mostraram que a fase vidro de spins é instável com relação à análise de estabilidade das flutuações gaussianas em torno da solução com simetria entre réplicas. Uma solução fisicamente aceitável para o modelo SK foi proposta por Parisi^{14,15}, onde ele adota um esquema de quebra infinita da simetria entre as réplicas.

Há um consenso geral de que o modelo SK pode ser resolvido pelo método das réplicas, desde que se considere quebra de simetria entre réplicas. A observação básica, devido a Parisi¹⁶, é que a quebra de simetria está fisicamente relacionada à quebra de ergodicidade na fase vidro de spins. Parisi propôs um esquema específico para essa quebra de simetria^{14,15} que produz uma solução de campo médio estável. Esses resultados dão uma descrição consistente da teoria de campo médio para vidro de spins. Contudo, baseiam-se em um esquema particular de quebra de simetria. Não está claro, a princípio, qual é o mecanismo físico responsável por esse padrão específico. A melhor evidência da validade do esquema de Parisi é a sua estabilidade¹⁷ e o fato de que está de acordo com experimentos

numéricos¹⁸.

Parisi¹⁶ recorreu a outra proposta de solução do modelo SK para interpretar fisicamente sua solução: a formulação TAP apresentada por Thouless, Anderson e Palmer¹⁹ em 1977. Heuristicamente é simples entender a solução TAP. Para um ferromagneto, a solução de campo médio é obtida supondo que cada spin está submetido a um campo magnético efetivo oriundo da interação com os demais spins. Em 1936 Onsager²⁰ mostrou que a primeira correção para esta solução está relacionada a um novo campo efetivo, associado a susceptibilidade do sistema, conhecido como campo de reação de Onsager. No ferromagneto usual esse campo não tem importância sobre as propriedades termodinâmicas do sistema pois se torna nulo no limite termodinâmico. Porém, nos vidros de spins ele se torna proporcional à largura da distribuição das constantes de acoplamentos e tem que ser levado em conta. Em trabalhos independentes, de Dominicis e colaboradores²¹, Bray e Moore²² e Tanaka e Edwards²³, descobriram que as equações TAP possuem muitas soluções, correspondentes a mínimos locais da energia livre do modelo SK, e que a quantidade dessas soluções cresce exponencialmente com N . Parisi sugeriu que a quebra de simetria, a qual caracteriza a fase vidro de spins, está relacionada a existência dos muitos estados puros (os quais estão associados às muitas soluções das equações TAP), ou seja, a função parâmetro de ordem $q(x)$ ($0 \leq x \leq 1$) obtida do Ansatz de quebra de simetria de Parisi está relacionada à distribuição da superposição entre esses estados puros, pois os momentos desta distribuição são iguais aos momentos correspondentes de dx/dq . Mézard e colaboradores^{24,25} estenderam essa interpretação e verificaram que esses estados puros constituem um espaço ultramétrico: dados três estados puros, se dois deles possuem a mesma superposição comum com o terceiro, então a superposição entre eles não pode ser maior que a superposição comum, e dessa forma apresentam uma estrutura hierárquica no espaço de fases. Uma exposição clara de ultrametricidade e suas aplicações à Física foi descrita por Rammal, Toulouse e Virasoro²⁶.

Ainda não está comprovado se toda essa complexidade persiste em vidros de spins reais, ou mesmo no modelo de Edwards-Anderson. Um grave problema com a solução de Parisi é que ela parece ser válida apenas para dimensões maiores ou igual a seis²⁷, o que

dificulta qualquer extrapolação para sistemas em três dimensões. Na verdade Newman e Stein²⁸ argumentam que as principais características da solução de Parisi para o modelo SK, quando aplicada à modelos mais realistas, não são válidas em nenhuma dimensão e temperatura. Ainda assim, as idéias surgidas na busca do entendimento do modelo SK e dos vidros de spins em geral se revelaram surpreendentemente interessantes, fazendo surgir novos conceitos físicos, além de novas ferramentas matemáticas e computacionais. Como consequência disso, vários outros problemas puderam ser tratados e melhor entendidos, alguns deles com origens em diversos campos do conhecimento. Para citar alguns exemplos, o desenvolvimento de algoritmos para partição de grafos^{7,29,30}, de interesse para matemática aplicada, pesquisa operacional e ciências da computação; a nova formulação para a compreensão do funcionamento de um sistema de neurônios³¹, procurando entender alguns dos processos físicos que ocorrem em cérebros humanos ou de animais, um problema central da neurociência, além de imediata aplicabilidade a problemas de computação; resolução de problemas de otimização⁷, com ampla aplicação em todos os ramos de ciência e tecnologia; mais recentemente temos visto surgir teorias, usando as ferramentas de vidros de spins, para tentar explicar o enovelamento de proteínas³².

A teoria rival à de Parisi, conhecida como o modelo da gota³³⁻³⁵, é baseado em argumentos do grupo de renormalização aplicados à paredes de domínios em vidros de spins. De acordo com o modelo da gota, a fase de baixas temperaturas para qualquer modelo de vidro de spins de curto alcance em dimensão finita deve ser descrita em termos de um estado termodinâmico simples (juntamente, é claro, com a contrapartida reverso-temporal), ou seja, essencialmente uma solução do tipo réplica simétrica. Obviamente, o modelo da gota torna-se questionável quando aumentamos a dimensionalidade do sistema, pois esperamos que exista uma dimensão crítica superior (no caso do vidro de spins acredita-se que seja seis²⁷) acima da qual deve valer a solução de campo médio. Análises recentes do vidro de spins de Ising de curto alcance em redes hierárquicas do tipo diamante (na qual o grupo de renormalização de Migdal-Kadanoff é exato) mostraram evidências das características do modelo da gota³⁶⁻³⁸; contudo a aplicabilidade destas redes para o vidro de spins de Ising em redes de Bravais é duvidosa^{18,39,40}. É difícil obter resultados conclu-

sivos em simulações numéricas do vidro de spins de Ising em uma rede cúbica devido aos longos tempos de termalização¹⁸. Contudo, em quatro dimensões a temperatura crítica é bem maior, tornando a termalização mais fácil; neste caso, muitos trabalhos afirmam terem observado alguns comportamentos de campo médio⁴¹⁻⁴⁵.

Até agora discutimos apenas modelos para os vidros de spins. Um outro modelo muito estudado é o modelo de Ising ferromagnético na presença de um campo aleatório (random-field Ising model - RFIM), introduzido por Imry e Ma em 1975⁴⁶. Na verdade, podemos obter o comportamento para os vidros de spins e o RFIM a partir do modelo de Ising descrito pelo hamiltoniano

$$\mathcal{H} = - \sum_{ij} J_{ij} S_i S_j - \sum_i h_i S_i \quad , \quad (1.2)$$

onde $S_i = \pm 1$; para o caso ferromagnético os acoplamentos J_{ij} são normalmente considerados constantes (invariantes translacionais), assim como os campos magnéticos h_i . Mesmo com essas simplificações, o modelo de Ising exibe uma complexidade notável. Por exemplo, só apresenta solução analítica não-trivial em duas dimensões e, mesmo assim, na ausência de campo. Quando são consideradas interações competitivas, pode apresentar um grande número de fases comensuráveis e incomensuráveis de magnetização modulada⁴⁷. Na realidade os sistemas físicos nunca são completamente invariantes translacionais; desordens composicionais, impurezas, vacâncias, deslocamentos de rede, etc, levam a modificações no hamiltoniano, as quais em muitos casos podem ser representadas por variações do tipo $J_{ij} = J + \delta J_{ij}$ ou $h_i \rightarrow h + \delta h_i$. δJ_{ij} e δh_i geralmente não são invariantes translacionais e sim quantidades aleatórias caracterizadas por distribuições de probabilidades. Dentre as várias possibilidades de combinações, podemos ter o caso $\delta h_i = 0$ e $\delta J_{ij} \ll J_{ij}$, que é basicamente o modelo de Ising puro. Se $\delta J_{ij} \gg J_{ij}$ a ordem ferromagnética em geral é destruída e temos o comportamento típico de vidros de spins em baixas temperaturas. Quando $\delta J_{ij} = 0$ e $\delta h_i \neq 0$ obtemos o RFIM. A realização experimental do RFIM mais estudada é o antiferromagneto diluído na presença de um campo magnético externo uniforme, onde a combinação da diluição e um campo externo leva a um efeito de campo aleatório^{48,49}. Um exemplo de antiferromagneto diluído é o $\text{Fe}_x\text{Zn}_{1-x}\text{F}_2$ ⁵⁰⁻⁵⁵ que exibe,

dentro de certos intervalos de concentrações, comportamento de vidro de spins, campo aleatório ou ambos. Provavelmente tais propriedades somente serão explicadas se considerarmos modelos que levem em conta os ingredientes de vidros de spins e campos aleatórios juntos; esse problema será tratado no Capítulo 4.

Além dos estudos de modelos com spin $1/2$ para vidros de spins, muitos esforços têm sido efetuados para o entendimento dos vidros de spins com spin 1 ⁵⁶⁻⁶⁴. Como exemplo podemos mencionar a versão vidro de spins para o modelo BEG introduzida para descrever gases de redes magnéticos desordenados⁵⁵⁻⁶⁹, e alguns modelos que apresentam características essenciais dos chamados vidros orientacionais (sistemas moleculares diluídos, representando uma mistura de quadrupolos interagentes)^{56,57,62,63,70-73}. Estes últimos podem ser mapeados em modelos com spin 1 , onde a interação presente é a interação quadrupolar aleatória. Praticamente todos os modelos acima mencionados foram estudados utilizando o método das réplicas. No entanto, há outros trabalhos onde o vidro de spins de Ising para spin 1 foi estudado por métodos diferentes. Este é o caso do modelo com interações aleatórias entre p spins estudado por Mottishaw⁷⁴ e um vidro de spins quadrupolar com interações entre p spins estudado por Walasek⁷⁵. O modelo com interações entre p spins tem dois limites bem definidos: o caso $p = 2$ corresponde aos modelos de spins usuais com interações entre pares de spins, enquanto o limite $p \rightarrow \infty$ corresponde ao modelo de energias aleatórias REM (Random-Energy Model), introduzido por Derrida em 1980^{76,77}. O modelo REM descreve um sistema cujos níveis de energia são variáveis aleatórias independentes; com esse modelo Derrida foi capaz de determinar a solução de um modelo de vidros de spins sem o uso das réplicas. Contudo, até onde sabemos, a competição entre os acoplamentos bilineares e biquadráticos aleatórios não foi considerada em detalhes.

Nessa tese, pretendemos investigar os efeitos de acoplamentos biquadráticos aleatórios e de campos aleatórios em modelos para vidros de spins. Iremos utilizar o método das réplicas para determinar os diagramas de fases dos sistemas, levando em conta a análise de estabilidade da solução com simetria entre réplicas. Este trabalho está dividido da seguinte forma: no Capítulo 2 estudaremos um modelo com spin 1 para vidro de spins

onde incluímos interações aleatórias bilineares e biquadráticas. No Capítulo 3 estudamos novamente a competição entre as interações bilineares e biquadráticas, sendo que agora consideramos o modelo com interações entre p spins e tomamos o limite $p \rightarrow \infty$. No Capítulo 4 estudamos o modelo SK na presença de um campo magnético aleatório trimodal (uma distribuição de três picos). Finalmente, no Capítulo 5 apresentamos nossas conclusões finais.

Capítulo 2

Efeitos de acoplamentos biquadráticos aleatórios em um vidro de spins com $S = 1$

2.1 Introdução

Recentemente, muitos esforços têm sido dedicados ao entendimento do comportamento de vidro de spins com spin $S = 1$ ⁵⁶⁻⁶⁴, como modelos promissores para descrever sistemas reais. Podemos mencionar, por exemplo, a versão vidro de spins para o modelo BEG introduzida para descrever gases de redes magnéticos desordenados⁵⁵⁻⁶⁹. Além disso, alguns dos trabalhos acima citados⁵⁶⁻⁶⁴, foram voltados para descrever modelos que apresentam algumas características essenciais dos chamados vidros quadrupolares ou orientacionais^{78,79}. Basicamente os vidros orientacionais consistem de sistemas moleculares diluídos, representando uma mistura de quadrupolos interagentes. O comportamento do tipo vidro de spins resulta da desordem e frustração decorrentes do congelamento das orientações moleculares. Fisicamente a orientação molecular está associada a um dipolo ou um momento de quadrupolo elétrico. Exemplos de vidros de spins quadrupolares são misturas de cristais cianídricos alcalinos $KBr_{1-x}(CN)_x$, $Na_{1-x}K_xCN$, $Na(Cl)_{1-x}(CN)_x$, onde os eixos quadrupolares do íons CN^{-1} congelam em direções aleatórias. Outros exemplos são misturas sólidas de orto e para-hidrogênio⁸⁰ nos quais as moléculas orto (orientáveis) estão diluídas nas moléculas para (esfericamente simétricas); para certas concentrações de orto-hidrogênio é observada uma fase, a baixas temperaturas, na qual as orientações mo-

leculares congelam formando um estado semelhante ao dos vidros de spins. Esses sistemas são descritos de forma mais precisa por rotores quânticos, de tal maneira que é necessário introduzir uma matriz densidade⁸¹ tornando o problema difícil de ser tratado. Assim, é interessante estudar sistemas mais simples, como os análogos clássicos. Muitos modelos de spins clássicos foram propostos para descrever fases de vidros orientacionais^{62,79,82,83}. Apesar desses modelos não caracterizarem vidros de spins orientacionais reais, eles exibem muitas propriedades comuns com tais sistemas. Por exemplo, muitos deles não apresentam uma transição de fases entre estados ordenados e desordenados do tipo vidro de spins, implicando que o sistema está sempre em um estado vítreo, independente da temperatura. Contudo, se estão presentes interações dipolares, como é o caso de vidros de prótons^{84,85}, podemos observar a transição de uma fase desordenada a altas temperaturas, para uma fase ordenada a baixas temperaturas. Esses modelos clássicos são, em última análise, equivalentes a um modelo de spin 1 do tipo Ising, com acoplamento quadrupolar aleatório^{62,63,73,86,87} conforme mostraremos adiante. A experiência com sistemas puros (onde não existe nenhum tipo de desordem) nos tem mostrado uma enorme riqueza para modelos magnéticos com spin 1 no que diz respeito aos fenômenos críticos apresentados por estes sistemas^{88,89}, exibindo uma grande variedade de comportamentos multicríticos. Há também alguns trabalhos onde ocorre a inclusão da interação de troca e do termo quadrupolar aleatório⁶⁷⁻⁶⁹. Em dois desses trabalhos^{67,68}, um modelo de gás de rede magnético desordenado foi estudado pelo método da função de distribuição⁶⁵, enquanto no outro⁶⁹ um sistema descrito pelo mesmo tipo de hamiltoniano foi estudado em uma árvore de Cayley no limite de coordenação infinita. Neste caso, os resultados reproduziram o que já havia sido obtido através do método da função de distribuição. A função de distribuição de probabilidades dos campos locais em um vidro de spins quadrupolares aleatória foi estudado por Kopec⁷¹ levando em conta as interações de troca e quadrupolar aleatórias usando o formalismo das réplicas. Contudo, a competição entre esses dois termos não foi considerada em detalhes. O objetivo desse capítulo é investigar as possíveis fases que surgem devido à competição entre as interações dipolares e quadrupolares em um modelo de spin 1. A motivação acima sugere que tal modelo merece atenção; apesar

de não ter intenção de representar nenhum vidro de spin orientacional em particular, ele pode exibir algumas características encontradas em sistemas reais. Para determinarmos a energia livre por spin e as equações de estado correspondentes iremos usar a aproximação de campo médio usual para vidros de spins com a hipótese de réplicas simétricas.

2.2 O modelo e as equações básicas

Vamos considerar o efeito de interações biquadráticas aleatórias em um modelo para vidros de spins. Trata-se de uma generalização do modelo de Sherrington-Kirkpatrick para vidros de spins com interações de alcance infinito. Consideramos a possibilidade de cada spin poder ocupar três estados, representado por uma variável de spin $S = -1, 0, +1$. Assim, o termo de interação quadrupolar entre dois spins é representado no hamiltoniano por $K_{ij}S_i^2S_j^2$, onde K_{ij} é uma variável aleatória temperada com média zero e variância K/\sqrt{N} .

Consideremos então um modelo vidro de spin de alcance infinito, descrito pelo hamiltoniano⁹⁰

$$\mathcal{H} = - \sum_{(ij)} J_{ij} S_i S_j - \sum_{(ij)} K_{ij} S_i^2 S_j^2 \quad , \quad (2.1)$$

onde os N spins S_i podem tomar os valores $0, \pm 1$; a soma (ij) é sobre todos os pares distintos; J_{ij} , K_{ij} são variáveis aleatórias com densidade de probabilidade do tipo

$$P(X_{ij}) = \left(\frac{N}{2\pi X^2} \right)^{1/2} \exp \left(\frac{-NX_{ij}^2}{2X^2} \right) \quad , \quad (2.2)$$

onde X pode ser substituído por J ou K .

No caso $J_{ij} = 0$, o hamiltoniano (2.1) é equivalente ao dos modelos para vidros quadrupolares clássicos^{56,57,62,63,70-73,86,87}, geralmente dados por

$$\mathcal{H}_c = - \sum_{ij} J'_{ij} Q_{zi} Q_{zj} \quad , \quad (2.3)$$

onde $Q_{zi} = 3J_{zi}^2 - 2$ e J_{zi} denotam as componentes z do momento quadrupolar e do momento angular orbital ($J = 1$) respectivamente. É fácil ver que o hamiltoniano acima

no caso clássico $J_{zi} = \pm 1, 0$ se reduz ao da Eq. (2.1) com $J_{ij} = 0$. Considerando $J_{zi} = S_i$ o hamiltoniano (2.3) fica

$$\mathcal{H}_c = -9 \sum_{ij} J'_{ij} S_i^2 S_j^2 + 6 \sum_{ij} J'_{ij} S_i^2 + 6 \sum_{ij} J'_{ij} S_j^2 - 4 \sum_{ij} J'_{ij} \quad . \quad (2.4)$$

O segundo, terceiro e quarto termo do lado direito da equação acima são iguais a zero, já que estamos considerando que a matriz J'_{ij} tem média nula e a soma sobre uma linha ou coluna também é nula no limite termodinâmico ($N \rightarrow \infty$). Então a equação acima pode ser escrita como

$$\mathcal{H}_c = -18 \sum_{(ij)} J'_{ij} S_i^2 S_j^2 \quad (2.5)$$

o que nos leva a $K_{ij} = 18J'_{ij}$. Vemos então que os dois hamiltonianos são idênticos quando consideramos $J_{ij} = 0$ em (2.1).

A energia livre por spin f para este sistema deve ser calculada usando

$$\beta f = - \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \overline{\ln Z} \quad , \quad (2.6)$$

onde a barra indica a média sobre as configurações. Para calcular $\overline{\ln Z}$, vamos usar a indentidade (método das réplicas)

$$\ln Z = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{Z^n - 1}{n} \quad , \quad (2.7)$$

onde interpretamos Z^n como a função de partição de n sistemas idênticos (n réplicas).

A função de partição para um único sistema é

$$Z = \text{Tr}_{\{S\}} \exp \left[\beta \sum_{(ij)} J_{ij} S_i S_j + \beta \sum_{(ij)} K_{ij} S_i^2 S_j^2 \right] \quad . \quad (2.8)$$

Assim, temos

$$Z^n = \text{Tr}_{\{S^\alpha\}} \exp \left[\beta \sum_{(ij)} J_{ij} \sum_{\alpha=1}^n S_i^\alpha S_j^\alpha + \beta \sum_{(ij)} K_{ij} \sum_{\alpha=1}^n (S_i^\alpha)^2 (S_j^\alpha)^2 \right] \quad , \quad (2.9)$$

onde α é o índice de réplicas.

Usando a equação (2.2) podemos calcular a média de Z^n ,

$$\overline{Z^n} = \text{Tr}_{\{S^\alpha\}} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{(ij)} \left[\sqrt{\frac{N}{2\pi J^2}} \sqrt{\frac{N}{2\pi K^2}} dJ_{ij} dK_{ij} \right] \exp \left\{ -\frac{N}{2} \sum_{(ij)} \left(\frac{J_{ij}^2}{J^2} + \frac{K_{ij}^2}{K^2} \right) + \sum_{(ij), \alpha} \beta \left[J_{ij} S_i^\alpha S_j^\alpha + K_{ij} (S_i^\alpha)^2 (S_j^\alpha)^2 \right] \right\} . \quad (2.10)$$

As integrais gaussianas são facilmente calculadas completando-se os quadrados dos argumentos das exponenciais. Obtemos, então,

$$\overline{Z^n} = \text{Tr}_{\{S^\alpha\}} \exp \left[\frac{(\beta J)^2}{2N} \sum_{\alpha\beta} \sum_{(ij)} S_i^\alpha S_j^\alpha S_i^\beta S_j^\beta + \frac{(\beta K)^2}{2N} \sum_{\alpha\beta} \sum_{(ij)} (S_i^\alpha)^2 (S_j^\alpha)^2 (S_i^\beta)^2 (S_j^\beta)^2 \right] , \quad (2.11)$$

onde os índices α e β vão de 1 até n . Escrevendo as somas como

$$S_1 = \sum_{\alpha\beta} \sum_{(ij)} S_i^\alpha S_j^\alpha S_i^\beta S_j^\beta = \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} \left[\sum_{ij} S_i^\alpha S_j^\alpha S_i^\beta S_j^\beta - \sum_i (S_i^\alpha)^2 (S_i^\beta)^2 \right] , \quad (2.12)$$

vemos que o segundo termo do lado direito pode ser desprezado no limite termodinâmico. Separando os termos com $\alpha = \beta$, temos

$$S_1 = \sum_{(\alpha\beta)} \left(\sum_i S_i^\alpha S_i^\beta \right)^2 + \frac{1}{2} \sum_\alpha \left(\sum_i (S_i^\alpha)^2 \right)^2 , \quad (2.13)$$

onde $(\alpha\beta)$ denota pares distintos de índices de réplicas. O segundo somatório em (2.11) pode ser escrito de forma análoga,

$$S_2 = \sum_{(\alpha\beta)} \left(\sum_i (S_i^\alpha)^2 (S_i^\beta)^2 \right)^2 + \frac{1}{2} \sum_\alpha \left(\sum_i (S_i^\alpha)^4 \right)^2 . \quad (2.14)$$

Neste ponto convém ressaltar que o formalismo é válido para qualquer spin inteiro S , isto é, cada spin S_i pode estar nos estados $0, \pm 1, \dots, \pm S$. Mais adiante particularizaremos para o caso em estudo em que $S = 1$.

Usando a identidade gaussiana

$$\exp \left(\frac{1}{2} A^2 \right) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{\sqrt{2\pi}} \exp \left(-\frac{x^2}{2} + Ax \right) , \quad (2.15)$$

para linearizar os termos quadráticos, podemos escrever

$$\overline{Z}^n = \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{(\alpha\beta)} \prod_{\alpha} dq_{\alpha\beta} dp_{\alpha} dQ_{\alpha\beta} dP_{\alpha} \exp \left[- \sum_{(\alpha\beta)} \left(\frac{N\beta^2 J^2}{2} q_{\alpha\beta}^2 + \frac{N\beta^2 K^2}{2} Q_{\alpha\beta}^2 \right) - \sum_{\alpha} \left(\frac{N\beta^2 J^2}{4} p_{\alpha}^2 + \frac{N\beta^2 K^2}{4} P_{\alpha}^2 \right) + N \ln \text{Tr} \exp(\mathcal{H}_{ef}) \right] , \quad (2.16)$$

onde desconsideramos um fator multiplicativo que não contribui no limite termodinâmico. Isto porque o argumento da exponencial na expressão anterior é proporcional a N , permitindo que as integrais sejam resolvidas pelo método do ponto de sela. O hamiltoniano efetivo (\mathcal{H}_{ef}) é dado por

$$\mathcal{H}_{ef} = (\beta J)^2 \sum_{(\alpha\beta)} q_{\alpha\beta} S^{\alpha} S^{\beta} + (\beta K)^2 \sum_{(\alpha\beta)} Q_{\alpha\beta} (S^{\alpha})^2 (S^{\beta})^2 + \frac{(\beta J)^2}{2} \sum_{\alpha} p_{\alpha} (S^{\alpha})^2 + \frac{(\beta K)^2}{2} \sum_{\alpha} P_{\alpha} (S^{\alpha})^4 \quad (2.17)$$

Quando os limites $N \rightarrow \infty$ e $n \rightarrow 0$ puderem ser trocados, \overline{Z}^n será dominado por um ponto de sela. Vamos supor que isto acontece no presente caso. Assim, a energia livre pode ser escrita como

$$\beta f = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{n} \min g(q_{\alpha\beta}, p_{\alpha}, Q_{\alpha\beta}, P_{\alpha}) , \quad (2.18)$$

onde

$$g(q_{\alpha\beta}, p_{\alpha}, Q_{\alpha\beta}, P_{\alpha}) = \sum_{(\alpha\beta)} \left(\frac{\beta^2 J^2}{2} q_{\alpha\beta}^2 + \frac{\beta^2 K^2}{2} Q_{\alpha\beta}^2 \right) + \sum_{\alpha} \left(\frac{\beta^2 J^2}{4} p_{\alpha}^2 + \frac{\beta^2 K^2}{4} P_{\alpha}^2 \right) - \ln \text{Tr}_{\{S^{\alpha}\}} \exp(\mathcal{H}_{ef}) . \quad (2.19)$$

A energia livre acima deve ser minimizada com relação aos parâmetros $q_{\alpha\beta}, p_{\alpha}, Q_{\alpha\beta}, P_{\alpha}$. As condições para que $g(q_{\alpha\beta}, p_{\alpha}, Q_{\alpha\beta}, P_{\alpha})$ seja um mínimo são dadas por

$$q_{\alpha\beta} = \frac{\text{Tr} S^{\alpha} S^{\beta} \exp(\mathcal{H}_{ef})}{\text{Tr} \exp(\mathcal{H}_{ef})} = \langle S^{\alpha} S^{\beta} \rangle , \quad (2.20)$$

$$Q_{\alpha\beta} = \langle (S^{\alpha})^2 (S^{\beta})^2 \rangle , \quad (2.21)$$

$$p_{\alpha} = \langle (S^{\alpha})^2 \rangle , \quad (2.22)$$

e

$$P_\alpha = \langle (S^\alpha)^4 \rangle , \quad (2.23)$$

onde $\langle \dots \rangle$ indica a média térmica com respeito ao hamiltoniano de réplicas (2.17).

Das equações acima podemos ver que o parâmetro $q_{\alpha\beta}$ é o parâmetro de vidro de spins, p_α representa o parâmetro quadrupolar a exemplo do que ocorre no modelo onde a interação quadrupolar é uniforme⁵⁸. Além disso temos o parâmetro biquadrupolar P_α e o parâmetro $Q_{\alpha\beta}$ que é um parâmetro de vidro de quadrupolos. O conjunto de equações acima representa um conjunto de equações autoconsistentes que devem ser resolvidas. Para um n fixo inteiro tais equações podem ser resolvidas diretamente⁹¹, mas no limite $n \rightarrow 0$ o problema é mais difícil requerendo uma continuação analítica. Na próxima seção adotaremos o *Ansatz* da solução com simetria entre réplicas onde podemos obter facilmente expressões analíticas para o funcional energia livre por spin e, conseqüentemente, para as equações de estado. Estas expressões não podem ser resolvidas por métodos puramente analíticos, mas são bem adequadas para uma análise numérica.

2.3 Solução com simetria entre réplicas

A solução com simetria de réplicas considera soluções da forma

$$\begin{aligned} q_{\alpha\beta} &= q \quad \forall(\alpha\beta) , \\ p_\alpha &= p \quad \forall\alpha , \\ Q_{\alpha\beta} &= Q \quad \forall(\alpha\beta) , \\ P_\alpha &= P \quad \forall\alpha . \end{aligned}$$

A partir de agora vamos considerar o caso $S = 1$, o que implica que os parâmetros p e P são iguais, pois $S^4 = S^2$. Neste caso, vamos estudar um sistema com três parâmetros (p, q, Q) . No que se segue vamos tomar a temperatura em unidades de $1/k_B$ e considerar $J = 1$ - se quisermos recuperar o caso $J \neq 1$ bastará substituir T por T/J e K por K/J .

No Apêndice A mostramos que a equação da energia livre para esta solução é dada por

$$f = \frac{p^2 - q^2}{4T} + \frac{(p^2 - Q^2)K^2}{4T} - T \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx dy}{2\pi} \exp\left(-\frac{x^2 + y^2}{2}\right) \ln z(x, y) , \quad (2.24)$$

onde

$$z(x, y) = 1 + 2 \exp\left(-\frac{\sqrt{q}}{T} x^*\right) \cosh\left(\frac{\sqrt{q}}{T} x\right) \quad (2.25)$$

e

$$x^* = -\frac{1}{\sqrt{q}} \left[\frac{p-q}{2T} + \frac{(p-Q)}{2T} K^2 + K\sqrt{Q}y \right] \quad (2.26)$$

Os parâmetros p, q, Q são calculados mais facilmente a partir das Eqs. (2.20- 2.23) usando o mesmo procedimento do Apêndice A. Assim, obtemos

$$p = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx dy}{2\pi} \exp\left(-\frac{x^2 + y^2}{2}\right) \varphi_2(x, y) \quad (2.27)$$

$$q = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx dy}{2\pi} \exp\left(-\frac{x^2 + y^2}{2}\right) [\varphi_1(x, y)]^2 \quad (2.28)$$

e

$$Q = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx dy}{2\pi} \exp\left(-\frac{x^2 + y^2}{2}\right) [\varphi_2(x, y)]^2 \quad (2.29)$$

onde

$$\varphi_1(x, y) = \frac{2e^{-\sqrt{q}x^*/T}}{z(x, y)} \sinh\left(\frac{\sqrt{q}}{T} x\right) \quad (2.30)$$

e

$$\varphi_2(x, y) = \frac{2e^{-\sqrt{q}x^*/T}}{z(x, y)} \cosh\left(\frac{\sqrt{q}}{T} x\right) \quad (2.31)$$

Com isso temos um sistema de três equações para resolver a fim de podermos determinar o diagrama de fases do sistema. Uma análise rápida mostra que os parâmetros p e Q não podem ser nulos, enquanto o parâmetro q tem solução trivial. Assim, o diagrama de fases terá a princípio pelo menos duas fases:

1. Fase paramagnética (P), onde $q = 0$
2. Fase vidro de spins (VS), onde $q \neq 0$

É importante mencionar que apesar de termos um parâmetro de réplicas (Q) não nulo, estamos identificando as fases com $K \neq 0$ como extensões das fases paramagnética e vidro de spins existente no eixo $K = 0$ baseados no seguinte argumento: a energia livre por spin, bem como os parâmetros p e Q , podem ser expandidos como uma série de potências inteiras de K . Dessa forma, não podemos obter nenhum comportamento anômalo nas

funções termodinâmicas quando fazemos $K \rightarrow 0$. A seguir, vamos determinar a linha de transição entre essas fases.

2.4 Fronteira da fase paramagnética

Para determinar a fronteira entre as fases paramagnética e vidro de spins, expandimos a Eq. (2.28) para valores pequenos de q . Antes disso, lembremos que os parâmetros p e Q não se anulam, de forma que não faremos nenhuma aproximação para eles.

Consideremos inicialmente a expansão de φ_1 em potências do parâmetro q :

$$\varphi_1 = \frac{2A}{(1+2A)T} xq^{1/2} + O(q) \quad (2.32)$$

onde

$$A = \exp\left[\frac{p}{2T^2} + \frac{(p-Q)K^2}{2T^2} + \frac{K\sqrt{Q}y}{T}\right] \quad (2.33)$$

Substituindo a expansão acima na equação de q obtemos

$$q = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx dy}{2\pi} \exp\left(-\frac{x^2 + y^2}{2}\right) \frac{4A^2 x^2}{(1+2A)^2 T^2} q + O(q^2) \quad , \quad (2.34)$$

onde a integral em x pode ser resolvida imediatamente. A temperatura crítica é determinada quando o termo linear do lado direito da equação acima tem seu coeficiente igual a 1. Assim, obtemos

$$1 = \frac{4}{T^2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dy}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{y^2}{2}} \frac{A^2}{(1+2A)^2} \quad (2.35)$$

As outras equações que temos que resolver (após fazermos $q = 0$) são

$$p = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dy}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{y^2}{2}} \varphi_2(y) \quad (2.36)$$

e

$$Q = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dy}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{y^2}{2}} [\varphi_2(y)]^2 \quad (2.37)$$

onde

$$\varphi_2(y) = \frac{2A}{1+2A} \quad (2.38)$$

Comparando as equações (2.35) e (2.37) vemos que a fronteira crítica é determinada pela condição

$$T^2 = Q \quad (2.39)$$

quando $q = 0$. Assim, a linha de transição é obtida resolvendo por métodos numéricos as equações (2.35) e (2.36) simultaneamente. O diagrama de fases obtido através do estudo numérico dessas equações é apresentado na Figura 2.1. O coeficiente de ordem q^2 na Eq. (2.34) tem sinal positivo definido, de modo que as fases P e VS são separadas por uma linha de transições contínuas.

É fácil ver que para $K = 0$ o parâmetro de ordem vidro quadrupolar não aparece na energia livre (2.24). Dessa forma, ao longo da linha $K = 0$, Q não representa um parâmetro de ordem genuíno e sim um parâmetro induzido, não estando associado com qualquer propriedade termodinâmica relevante. Assim, ao longo dessa linha encontramos uma transição da fase paramagnética para a fase vidro de spins em

$$T = \left(\frac{1}{1 + \frac{1}{2}e^{-\frac{1}{2R}}} \right) , \quad (2.40)$$

ou $T = 0.790166\dots$ que é o mesmo resultado obtido por vários autores^{58,59,64,92-94}. Para valores grandes de K não há mudanças apreciáveis na linha de transição. Para essa região fizemos uma expansão (Apêndice B) e verificamos que assintoticamente a fronteira aproxima-se do limite $T = 0.7876\dots$, com $p \approx Q = 0.6204\dots$. Na próxima seção faremos a análise de estabilidade destas soluções onde veremos que a fase paramagnética apresenta uma região de instabilidade, e a fase vidro de spins é toda ela instável.

2.5 Análise de estabilidade da solução com simetria entre réplicas

As condições de estabilidade para a solução com simetria entre réplicas serão determinadas seguindo o procedimento introduzido por de Almeida e Thouless¹³. Consideremos a energia livre dada pela equação (2.18), onde os parâmetros de ordem são vistos como pequenas perturbações da solução com simetria entre réplicas, dados por

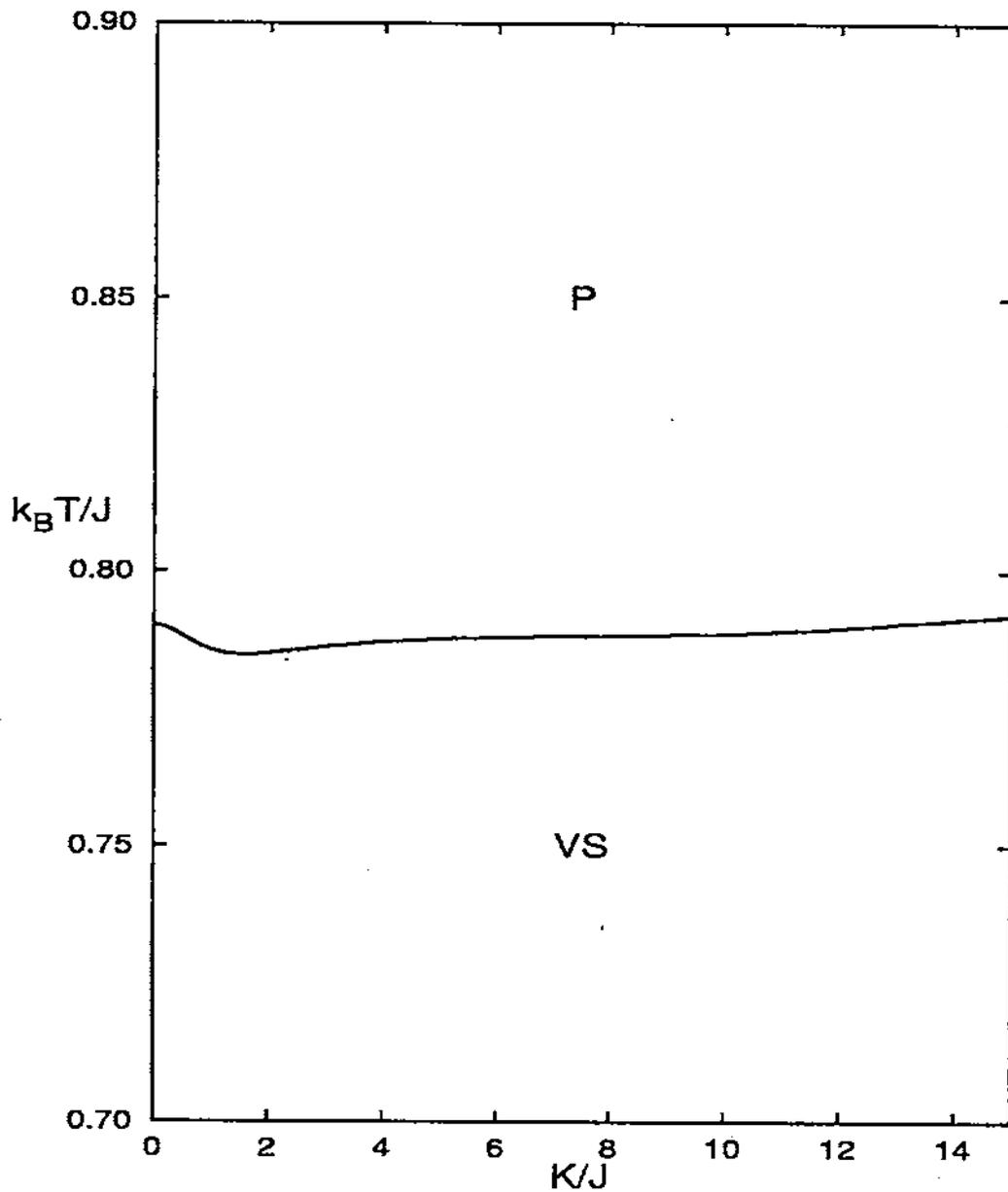


Figura 2.1: Diagrama de fases mostrando as fases paramagnética (P) e vidro de spins (VS) obtido considerando a solução com simetria entre réplicas. A transição contínua entre essas duas fases sinaliza o ordenamento vidro de spins.

$$\begin{aligned}
q_{\alpha\beta} &= q + \eta_{\alpha\beta} \quad , \\
p_{\alpha} &= p + \epsilon_{\alpha} \quad , \\
Q_{\alpha\beta} &= Q + \xi_{\alpha\beta} \quad ,
\end{aligned}
\tag{2.41}$$

onde $\eta_{\alpha\beta}$, ϵ_{α} e $\xi_{\alpha\beta}$ são parâmetros pequenos. Substituir as equações acima na equação da energia livre e expandir a mesma até segunda ordem nos parâmetros pequenos, é equivalente a calcular as segundas derivadas da equação (2.18) com relação aos parâmetros $q_{\alpha\beta}$, p_{α} , $Q_{\alpha\beta}$. As segundas derivadas podem ser escritas como uma matriz de dimensão $n^2 \times n^2$ (chamada de matriz de estabilidade) com nove tipos de elementos,

$$\tilde{G} = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 g}{\partial p_{\alpha} \partial p_{\beta}} & \frac{\partial^2 g}{\partial p_{\alpha} \partial q_{\nu\gamma}} & \frac{\partial^2 g}{\partial p_{\alpha} \partial Q_{\nu\gamma}} \\ \frac{\partial^2 g}{\partial q_{\nu\gamma} \partial p_{\alpha}} & \frac{\partial^2 g}{\partial q_{\alpha\beta} \partial q_{\nu\gamma}} & \frac{\partial^2 g}{\partial q_{\alpha\beta} \partial Q_{\nu\gamma}} \\ \frac{\partial^2 g}{\partial p_{\alpha} \partial Q_{\nu\gamma}} & \frac{\partial^2 g}{\partial q_{\alpha\beta} \partial Q_{\nu\gamma}} & \frac{\partial^2 g}{\partial Q_{\alpha\beta} \partial Q_{\nu\gamma}} \end{pmatrix}
\tag{2.42}$$

Cada derivada na matriz acima representa um bloco da matriz que pode ser considerado como uma sub-matriz. No Apêndice C calculamos os diversos tipos de elementos de cada bloco. Podemos observar de imediato que a matriz \tilde{G} é simétrica, de modo que precisaremos calcular apenas seis tipos de blocos. A condição de estabilidade impõe que os autovalores da matriz \tilde{G} sejam positivos, essa condição vem do fato que estamos minimizando a energia livre e dessa forma a segunda derivada da mesma deve ser positiva (no presente caso, onde temos uma função com mais de uma variável, o que deve ser positivo são os autovalores). O problema agora é determinar esses autovalores. Basicamente existem três tipos de autovalores para a matriz de estabilidade, os quais vamos estudar em seguida considerando a solução com simetria entre réplicas.

2.5.1 Autovalores do tipo I

Para determinar os autovalores do tipo I, consideramos um autovetor \vec{u} dado por

$$\vec{u} = \left(\underbrace{a, \dots, a}_{n \text{ termos}}, \underbrace{b, \dots, b}_{n(n-1)/2 \text{ termos}}, \underbrace{c, \dots, c}_{n(n-1)/2 \text{ termos}} \right) . \quad (2.43)$$

A equação de autovalores

$$\tilde{G}\vec{u} = \lambda\vec{u} , \quad (2.44)$$

nos deixa com três equações

$$\begin{aligned} Aa + (n-1)Ba + (n-1)Cb + \frac{1}{2}(n-2)(n-1)Db + (n-1)Ec + \frac{1}{2}(n-2)(n-1)Fc &= \lambda a, \\ 2Ca + (n-2)Da + Gb + 2(n-2)Hb + \frac{(n-2)(n-3)}{2}Ib + Jc + 2(n-2)Kc + \frac{(n-2)(n-3)}{2}Lc &= \lambda b, \\ 2Ea + (n-2)Fa + Jb + 2(n-2)Kb + \frac{(n-2)(n-3)}{2}Lb + Mc + 2(n-2)Nc + \frac{(n-2)(n-3)}{2}Oc &= \lambda c, \end{aligned} \quad (2.45)$$

onde A, B, \dots são definidos no Apêndice C. Após tomarmos o limite $n \rightarrow 0$, os autovalores do tipo I (longitudinais) serão dados por

$$\begin{vmatrix} A - B - \lambda & D - C & F - E \\ 2(C - D) & G - 4H + 3I - \lambda & J - 4K + 3L \\ 2(E - F) & J - 4K + 3L & M - 4N + 3O - \lambda \end{vmatrix} = 0 . \quad (2.46)$$

É interessante analisar de imediato a solução com $q = 0$. Neste caso os elementos de matriz C, D, H, I, J, K, L são nulos. Além disso o elemento G será dado por

$$G = \frac{1}{T^2} - \frac{Q}{T^4} , \quad (2.47)$$

e o determinante que fornece os autovalores se torna

$$\begin{vmatrix} A - B - \lambda & 0 & F - E \\ 0 & G - \lambda & 0 \\ 2(E - F) & 0 & M - 4N + 3O - \lambda \end{vmatrix} = 0 . \quad (2.48)$$

Ficamos, então, com uma equação de terceiro grau a resolver

$$\left[(A - B - \lambda)(M - 4N + 3O - \lambda) + 2(E - F)^2 \right] (G - \lambda) = 0 , \quad (2.49)$$

de maneira que um dos autovalores será

$$\lambda_{L1} = G = \frac{1}{T^2} - \frac{Q}{T^4} . \quad (2.50)$$

Assim a condição de que o autovalor seja positivo nos dá a mesma condição para a linha de transição obtida quando fizemos a expansão em torno de $q = 0$, eq. (2.39). Em outras palavras, um dos autovalores nos dá a linha de transição, a exemplo do que ocorre com o modelo SK. Os outros dois autovalores são dados por

$$\lambda_{L2,L3} = \frac{[(A - B) + (M - 4N + 3O)] \pm \sqrt{[(A - B) - (M - 4N + 3O)]^2 - 8(E - F)^2}}{2} . \quad (2.51)$$

2.5.2 Autovalores do tipo II

Vamos agora considerar vetores \vec{u} na forma

$$\vec{u} = (\{\epsilon^\alpha\}, \{\eta^{\alpha\beta}\}, \{\xi^{\alpha\beta}\}) \quad (2.52)$$

onde

$$\begin{cases} \epsilon^\alpha = a_1 & \text{para } \alpha = \theta , \\ \epsilon^\alpha = b_1 & \text{para } \alpha \neq \theta , \end{cases} \quad (2.53)$$

$$\begin{cases} \eta^{\alpha\beta} = c_1 & \text{para } \alpha \text{ ou } \beta = \theta , \\ \eta^{\alpha\beta} = d_1 & \text{para } \alpha, \beta \neq \theta , \end{cases} \quad (2.54)$$

$$\begin{cases} \xi^{\alpha\beta} = e_1 & \text{para } \alpha \text{ ou } \beta = \theta , \\ \xi^{\alpha\beta} = f_1 & \text{para } \alpha, \beta \neq \theta . \end{cases} \quad (2.55)$$

Considerando $\theta = 1$, sem perda de generalidade, podemos escrever

$$\vec{u} = (\underbrace{a_1, b_1, \dots, b_1}_{n \text{ termos}}; \underbrace{c_1, \dots, c_1}_{(n-1) \text{ termos}}, \underbrace{d_1, \dots, d_1}_{(n-1)(n-2)/2 \text{ termos}}; \underbrace{e_1, \dots, e_1}_{(n-1) \text{ termos}}, \underbrace{f_1, \dots, f_1}_{(n-1)(n-2)/2 \text{ termos}}) . \quad (2.56)$$

Novamente, a equação de autovalores

$$\vec{G}\vec{u} = \lambda\vec{u} \quad (2.57)$$

nos deixa com três equações

$$\begin{aligned}
 & Aa_1 + (n-1)Bb_1 + (n-1)Cc_1 + \frac{1}{2}(n-2)(n-1)Db_1 \\
 & \quad + (n-1)Ee_1 + \frac{1}{2}(n-2)(n-1)Ff_1 = \lambda a_1 \quad , \\
 & Ca_1 + Cb_1 + (n-2)Db_1 + Gc_1 + (n-2)Hc_1 + (n-2)Hd_1 \\
 & + \frac{(n-2)(n-3)}{2}Id_1 + Je_1 + (n-2)Ke_1 + (n-2)Kf_1 + \frac{(n-2)(n-3)}{2}Lf_1 = \lambda c_1 \quad , \\
 & Ea_1 + Eb_1 + (n-2)Fb_1 + Jc_1 + (n-2)Kc_1 + (n-2)Kd_1 \\
 & + \frac{(n-2)(n-3)}{2}Ld_1 + Me_1 + (n-2)Ne_1 + (n-2)Nf_1 + \frac{(n-2)(n-3)}{2}Of_1 = \lambda e_1 \quad . \\
 & \hspace{20em} (2.58)
 \end{aligned}$$

Além disso, a ortogonalidade entre os autovetores dos tipos I e II, expressa na forma do produto escalar

$$(a, a, \dots, a; b, \dots, b, b, \dots, b; c, \dots, c, c, \dots, c) \cdot \begin{pmatrix} a_1 \\ b_1 \\ \vdots \\ b_1 \\ c_1 \\ \vdots \\ c_1 \\ d_1 \\ \vdots \\ d_1 \\ e_1 \\ \vdots \\ e_1 \\ f_1 \\ \vdots \\ f_1 \end{pmatrix} = 0 \quad , \quad (2.59)$$

nos dá

$$[a_1 + (n-1)b_1]a + [(n-1)c_1 + \frac{1}{2}(n-1)(n-2)d_1]b + [(n-1)e_1 + \frac{1}{2}(n-1)(n-2)f_1]c = 0 \quad , \quad (2.60)$$

o que implica

$$\begin{cases} b_1 = -\frac{1}{n-1}a_1 \quad , \\ d_1 = -\frac{2}{n-2}c_1 \quad , \\ f_1 = -\frac{2}{n-2}e_1 \quad . \end{cases} \quad (2.61)$$

Usando as equações acima, as eqs. (2.58) se tornam

$$\begin{aligned} (A - \lambda - B)a_1 + [(n-1)C - (n-1)D]c_1 + [(n-1)E - (n-1)F]e_1 &= 0 \quad , \\ \left[C - \frac{C}{n-1} - \frac{n-2}{n-1}D \right] a_1 + [G - \lambda + (n-2)H - 2H - (n-3)I] c_1 \\ &+ [J + (n-2)K - 2K - (n-3)L] e_1 = 0 \quad , \quad (2.62) \\ \left[E - \frac{E}{n-1} - \frac{n-2}{n-1}F \right] a_1 + [J + (n-2)K - 2K - (n-3)L] c_1 \\ &[M + (n-2)N - 2N - (n-3)O - \lambda] e_1 = 0 \quad . \end{aligned}$$

Tomando o limite $n \rightarrow 0$ e escrevendo as equações acima na forma matricial obtemos

$$\begin{pmatrix} A - B - \lambda & D - C & F - E \\ 2(C - D) & G - 4H + 3I - \lambda & J - 4K + 3L \\ 2(E - F) & J - 4K + 3L & M - 4N + 3O - \lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ b_1 \\ c_1 \end{pmatrix} = 0 \quad , \quad (2.63)$$

que nos dá as mesmas equações obtidas quando consideramos os autovetores do tipo I.

2.5.3 Autovalores do tipo III

Vamos agora considerar vetores \vec{u} na forma

$$\vec{u} = (\{\epsilon^\alpha\}, \{\eta^{\alpha\beta}\}, \{\xi^{\alpha\beta}\}) \quad (2.64)$$

onde

$$\begin{cases} \epsilon^\alpha = a_2 \quad \text{para} \quad \alpha = \theta \text{ ou } \nu \\ \epsilon^\alpha = b_2 \quad \text{para} \quad \alpha \neq \theta, \nu \end{cases} \quad (2.65)$$

$$\begin{cases} \eta^{\alpha\beta} = c_2 & \text{para } \alpha \text{ ou } \beta = \theta \text{ ou } \nu \\ \eta^{\theta\alpha} = \eta^{\nu\alpha} = d_2 & \text{para } \alpha \neq \theta, \nu \\ \eta^{\alpha\beta} = e_2 & \text{para } \alpha, \beta \neq \theta, \nu \end{cases} \quad (2.66)$$

$$\begin{cases} \xi^{\alpha\beta} = f_2 & \text{para } \alpha \text{ ou } \beta = \theta \text{ ou } \nu \\ \xi^{\theta\alpha} = \xi^{\nu\alpha} = g_2 & \text{para } \alpha \neq \theta, \nu \\ \xi^{\alpha\beta} = h_2 & \text{para } \alpha, \beta \neq \theta, \nu \end{cases} \quad (2.67)$$

Tomando $\theta = 1$ e $\nu = 2$, novamente sem perda de generalidade, podemos escrever

$$\vec{u} = (a_2, a_2, b_2, \dots, b_2; c_2, d_2, \dots, d_2, e_2, \dots, e_2; f_2, g_2, \dots, g_2, h_2, \dots, h_2) \quad (2.68)$$

Considerando a equação de autovalores e a ortogonalidade entre estes novos autovetores e os autovetores dos tipo I e II obtemos, após tomar o limite $n \rightarrow 0$, a seguinte equação matricial

$$\begin{pmatrix} G - 2H + I - \lambda & J - 2K + L \\ J - 2K + L & M - 2N + O - \lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_2 \\ f_2 \end{pmatrix} = 0 \quad (2.69)$$

Todas as demais entradas deste autovetor são ou nulas, ou proporcionais a c_2 e f_2 . Os autovalores, neste caso, são dados por

$$\lambda = \frac{G - 2H + I + M - 2N + O \pm \sqrt{[G - 2H + I - M + 2N - O]^2 - 4[J - 2K + L]^2}}{2} \quad (2.70)$$

Na fase paramagnética ($C = D = H = I = J = K = L = 0$) os autovalores são dados por

$$\begin{aligned} \lambda_{T1} &= G \quad , \\ \lambda_{T2} &= M - 2N + O \quad . \end{aligned} \quad (2.71)$$

Dos resultados anteriores, podemos observar que $\lambda_{T1} = \lambda_{L1}$.

De posse das equações dos parâmetros de ordem e autovalores, fizemos a análise numérica do comportamento dos autovalores a fim de determinar a estabilidade das fases e, por conseguinte, o diagrama de fases. Resolvemos numericamente as equações (2.35) e (2.36) para vários valores de temperatura e do parâmetro K , representando a variância do termo de interação quadrupolar. Em seguida calculamos os cinco diferentes autovalores

associados com as respectivas soluções : paramagnética e vidro de spins. A linha de transição entre as fases **P** e **VS** é dada pela condição $\lambda_{T1} = \lambda_{L1} = 0$. Na fase **P** todos os três autovalores longitudinais são positivos; por outro lado, um dos autovalores transversais (λ_{T2}) torna-se negativo para valores grandes de K (linha L_2 na Figura 2.2). Isso sugere uma irreversibilidade na fase **P** e a existência de uma nova fase, possivelmente associada com uma quebra de ergodicidade. Abaixo dessa linha deve valer uma solução baseada no *Ansatz* de Parisi⁷.

Na fase **VS** um dos autovalores transversal (λ_{T1}) é negativo em toda a fase, enquanto o outro autovalor transversal é negativo abaixo da linha L_2 na Figura 2.2. Isso implica que devemos também considerar uma solução com quebra de simetria entre réplicas nessa fase.

2.6 Diagrama de fases na solução com simetria entre réplicas

Além da análise de estabilidade da seção anterior, fizemos também uma análise numérica, para vários valores de T/J e K/J , das equações (2.27-2.29) para verificar o comportamento dos parâmetros de ordem e também da susceptibilidade. A susceptibilidade nesse caso pode ser obtida usando um teorema fundamental da mecânica estatística clássica (teorema da flutuação-dissipação), que relaciona as flutuações de equilíbrio de qualquer variável termodinâmica com o valor médio dessa variável⁸, ou seja

$$\chi = \frac{1}{NT} \sum_i \langle (S_i - \langle S_i \rangle)^2 \rangle = \frac{1}{NT} \sum_i (\langle S_i^2 \rangle - \langle S_i \rangle^2) \quad , \quad (2.72)$$

que nos dá

$$\chi = \frac{(p - q)}{T} \quad . \quad (2.73)$$

Os gráficos dos parâmetros de ordem e da susceptibilidade para diferentes valores de K/J são qualitativamente semelhantes. Escolhemos dois valores de K/J para apresentar os gráficos, $K/J = 0.8$ e $K/J = 14$, de forma que vemos os comportamentos dos parâmetros na região onde temos apenas as fases **P** e **VS** ($K/J = 0.8$) e na região onde

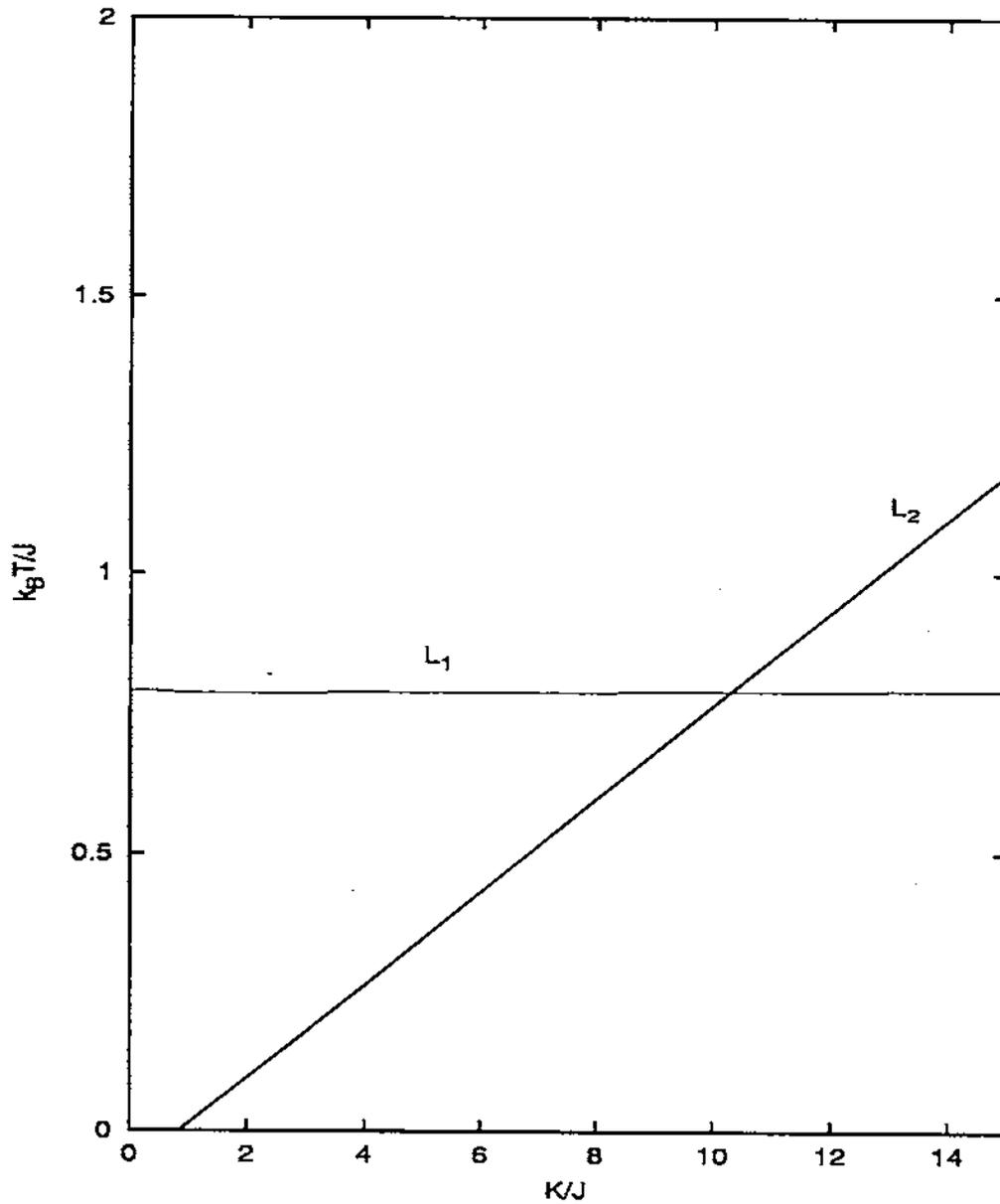


Figura 2.2: Comportamento dos autovalores transversais na solução com simetria entre réplicas. Abaixo da linha L_1 o autovalor λ_{T1} é negativo, abaixo da linha L_2 o autovalor λ_{T2} é negativo. Acima das linhas L_1 e L_2 os autovalores correspondentes são positivos.

temos as fases P, VS e VSB ($K/J = 14$). Nas figuras 2.3 e 2.4 mostramos o comportamento dos parâmetros de ordem em função da temperatura para os dois valores de K/J . Podemos observar que o parâmetro q vai continuamente a zero em $T/J \approx 0.79$ nos dois casos, indicando que temos uma transição contínua. Vemos também que os parâmetros Q e p não se anulam. Na Figura 2.5 mostramos o comportamento da susceptibilidade em função da temperatura para $K/J = 0.8$ e $K/J = 14$. Como podemos observar ela apresenta uma cúspide próximo da temperatura de transição, de maneira similar ao que ocorre em outros modelos para vidros de spins. Além disso, para valores de T/J a partir de 4, as susceptibilidades tornam-se praticamente iguais, independente do valor de K/J , indicando que o parâmetro p fica também independente de K/J para altas temperaturas.

Devemos mencionar que a análise numérica para baixas temperaturas apresenta algumas dificuldades devido a problemas de precisão numérica, principalmente para valores altos de K/J . Devido a este fato, mostramos resultados apenas para $T/J > 0.08$ no caso $K/J = 14$. Porém, isso não compromete nossa análise já que estamos interessados na região próximo a $T/J \approx 0.79$ e, nesse caso, os resultados numéricos são confiáveis.

O diagrama de fases obtido como resultado da análise de estabilidade da solução com simetria entre réplicas está apresentado na Figura 2.6, em função da temperatura (T/J) e do parâmetro K/J . Todas as transições termodinâmicas são contínuas. Os parâmetros p e Q são diferentes de zero em todo o diagrama.

Como resultado da presente análise, basicamente temos três fases:

1. Fase paramagnética (P), onde $q = 0$, que é estável na solução com simetria entre réplicas.
2. Fase vidro de spins biquadrática (VSB), onde $q = 0$, mas é instável na solução com simetria entre réplicas.
3. Fase vidro de spins (VS), onde $q \neq 0$, que é instável na solução com simetria entre réplicas.

Nas fases instáveis deve ser válida a solução proposta por Parisi. Quando passamos da fase P para a fase VSB, o parâmetro de ordem p não muda de estrutura. Todavia,

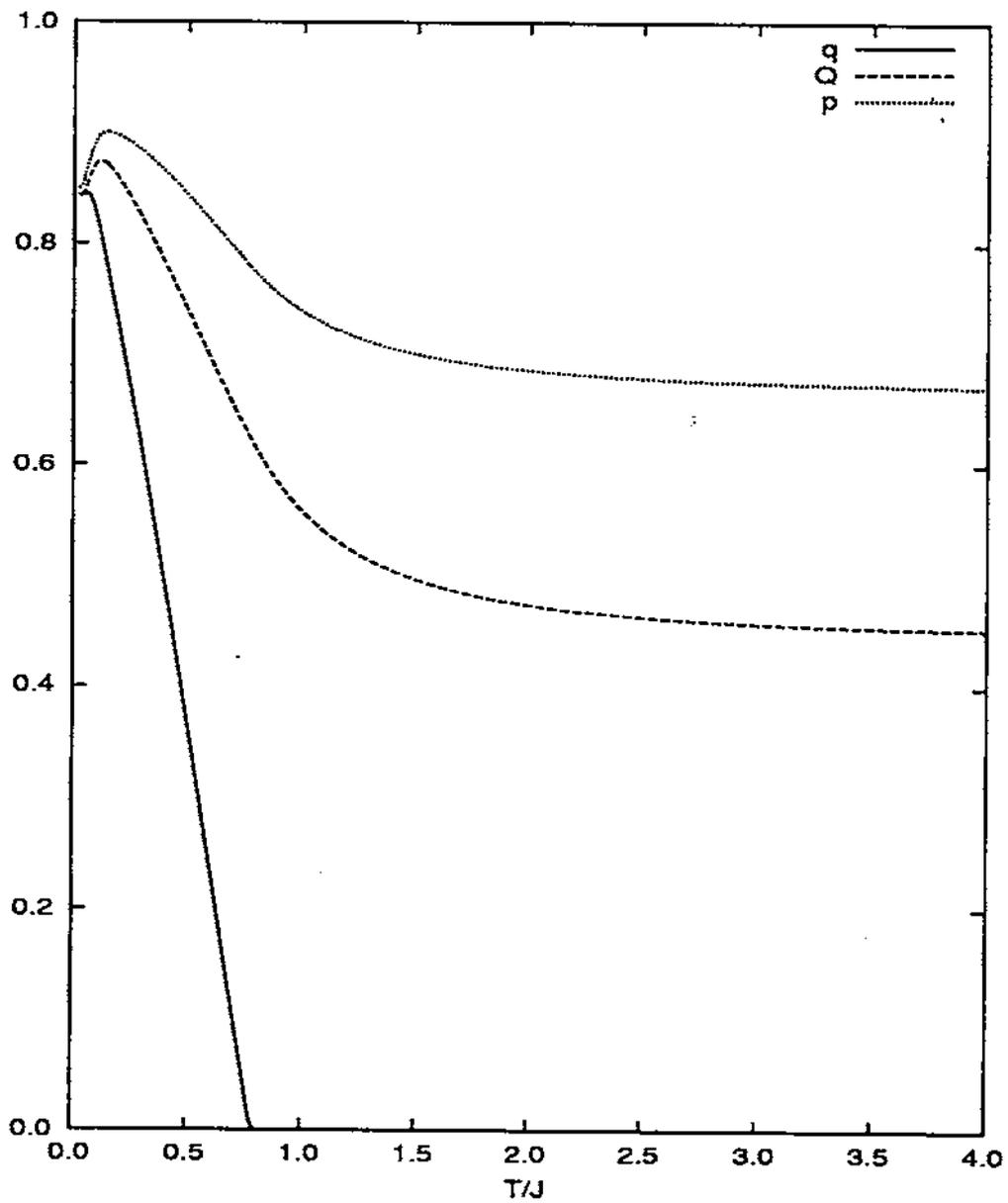


Figura 2.3: Comportamento dos parâmetros de ordem q , Q e p em função da temperatura para $K/J = 0.8$.

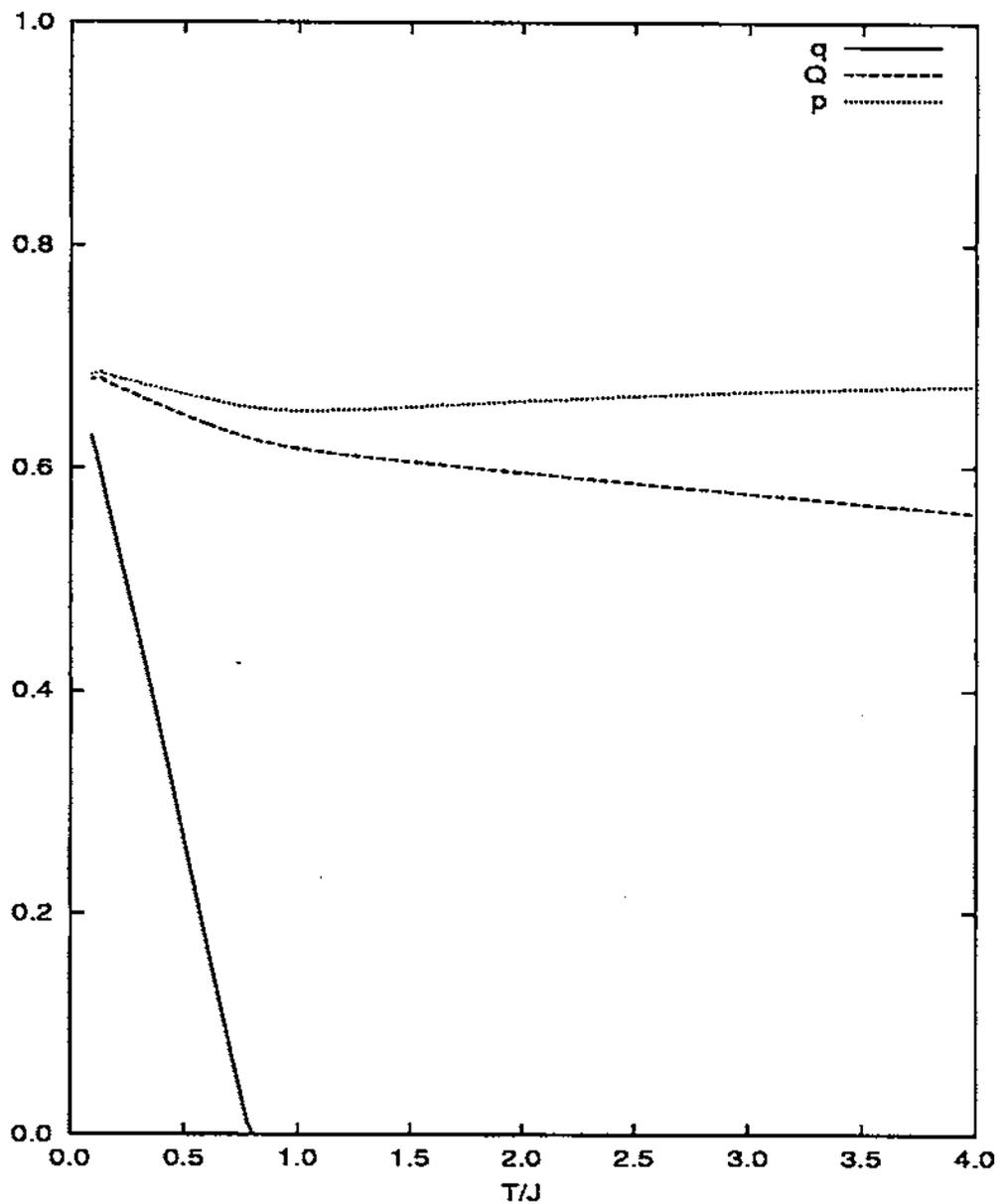


Figura 2.4: Comportamento dos parâmetros de ordem q , Q e p em função da temperatura para $K/J = 14$.

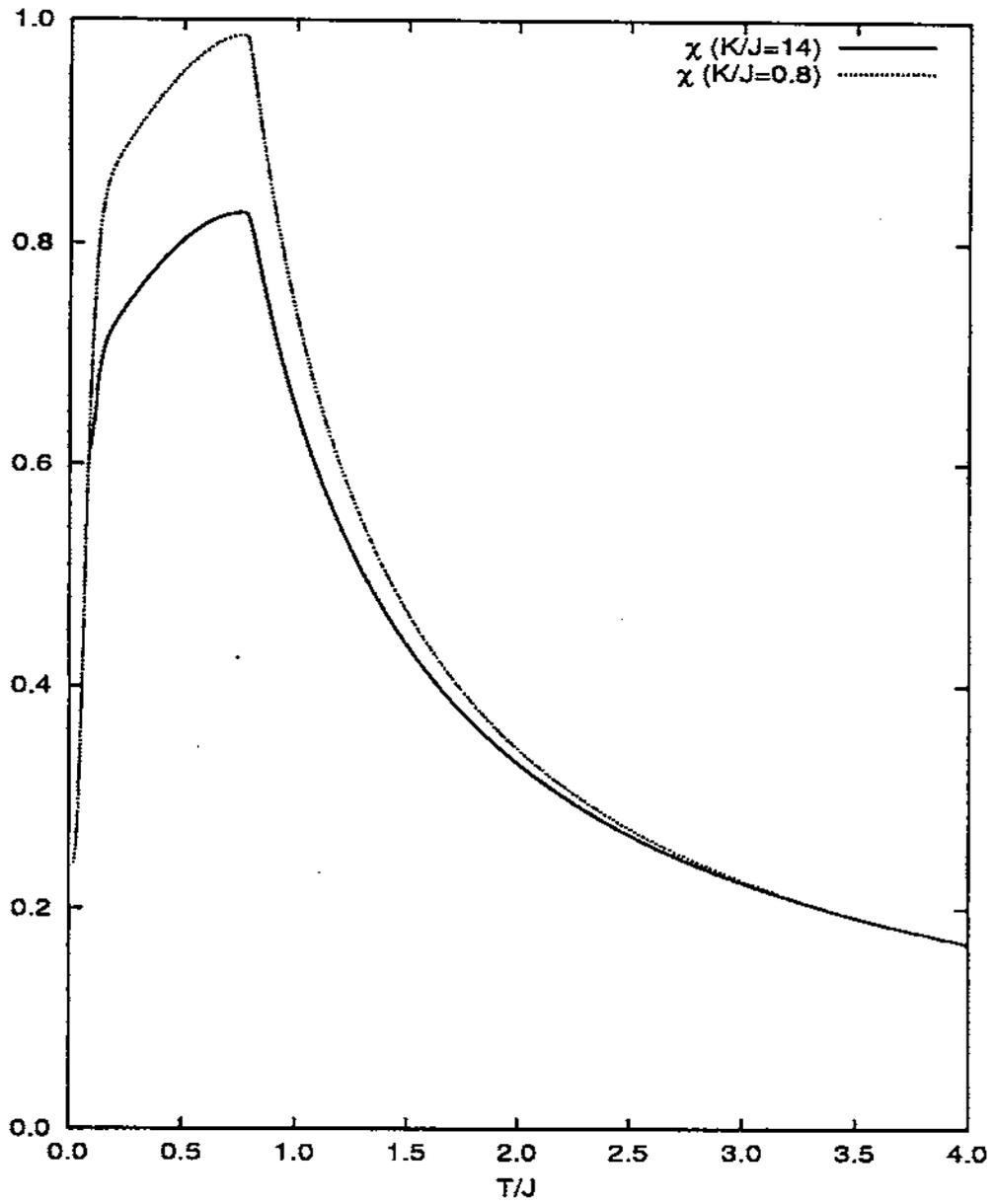


Figura 2.5: Comportamento da susceptibilidade (χ) em função da temperatura para $K/J = 0.8$ e $K/J = 14$.

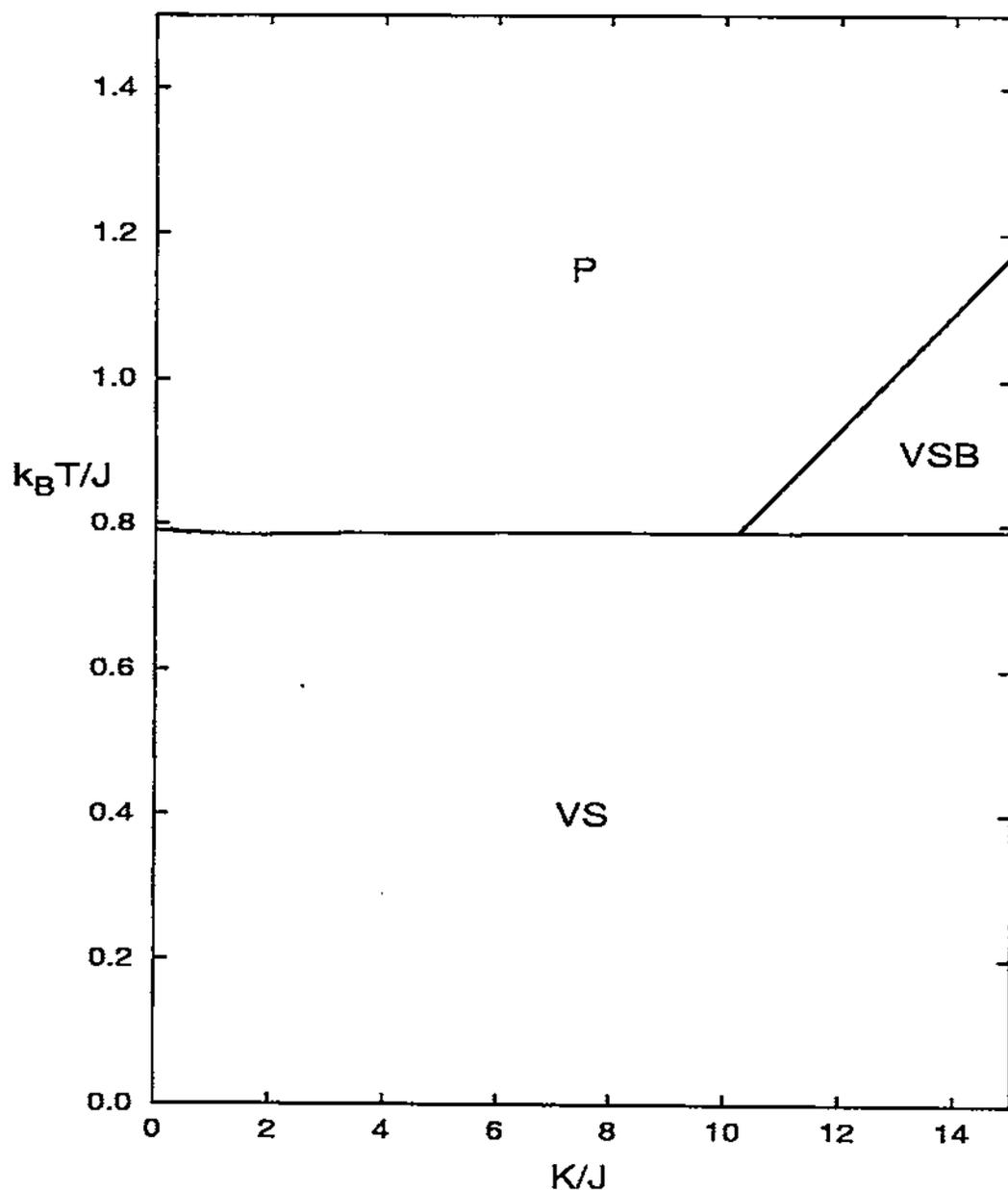


Figura 2.6: Diagrama de fases na solução com réplicas simétricas, após análise de estabilidade das fases. A solução com simetria entre réplicas é estável apenas na fase P. A fase VSB, para valores suficientemente altos de K , é caracterizada por uma instabilidade na solução com simetria entre réplicas; a instabilidade persiste para valores altos da temperatura.

nesta transição o parâmetro Q deixa de ser um escalar para se tornar uma função de Parisi $Q(x)$. Isso indica que para valores grandes de K temos um sistema que apresenta uma transição diferente da transição usual. Nesta transição o comportamento da energia livre, que tem um mínimo na fase paramagnética, passa a ser mais rico, apresentando uma estrutura de muitos mínimos na fase de vidro de spins biquadrática. A linha de transição entre as fases **P** e **VS** é uma reta ao longo de $k_B T/K \approx 0.077$, o que está em excelente acordo com o resultado numérico encontrado por Kopec⁸⁶.

Se pensarmos no eixo K como o eixo que mede a competição entre os dois tipos de acoplamentos (bilinear e biquadrático), podemos ver que o efeito da inclusão do acoplamento biquadrático aleatório com média zero é o de induzir o aparecimento da fase vidro de spins biquadrática ocupando uma região do diagrama de fases inicialmente vista como uma região paramagnética. Na fase **VS** ocorre uma mudança no comportamento do sistema no sentido de que ele passa a apresentar um comportamento típico de vidros de spins, visto que sua energia livre apresenta uma estrutura de muitos mínimos.

A linha de transição que separa as fases **P** e **VS** e também a linha de transição que separa as fases **P** e **VS** não devem se alterar se fizermos o tratamento de Parisi. Contudo, é possível que a fronteira entre as fases **VS** e **VS** mude se fizermos quebra de simetria em ambas as matrizes Q e q . Essa fronteira, que foi obtida supondo simetria entre réplicas, deve ser vista de forma esquemática, apesar de não haver razões físicas para uma mudança substancial.

2.7 Conclusões

Neste capítulo estudamos um modelo solúvel de spin 1, onde incluímos interações aleatórias bilineares e biquadráticas com médias zero e variâncias J e K respectivamente. Resolvemos o modelo usando o formalismo das réplicas. Três tipos de parâmetros de ordem foram introduzidos para descrever o sistema no espaço das réplicas: a densidade (p_α), que mede a fração de spins nos estados $S^\alpha = \pm 1$ e duas matrizes, definidas respectivamente pelos parâmetros vidro de spins ($q_{\alpha\beta}$) e vidro de spins biquadrático ($Q_{\alpha\beta}$).

O modelo apresenta muitos aspectos comuns a outros modelos introduzidos para descrever vidros orientacionais^{56,57,62,63}, sendo equivalente a alguns deles em certos limites. Por exemplo, esses modelos exibem usualmente um ordenamento quadrupolar em todas as temperaturas, similar ao que foi encontrado na presente investigação.

A solução com simetria entre réplicas leva a uma transição contínua (segunda ordem) da fase paramagnética para a fase vidro de spins, sinalizada pelo aparecimento do parâmetro de ordem de vidro de spin. A fronteira crítica correspondente é praticamente independente da temperatura, especialmente para grandes valores da variância K .

Analisamos, também, os autovalores da matriz de estabilidade associada com as flutuações em torno da solução com simetria entre réplicas. Verificamos numericamente que um dos autovalores é sempre negativo na fase vidro de spins (VS), implicando uma instabilidade na solução com simetria entre réplicas. Notamos também que a fase paramagnética apresenta uma região de instabilidade (denominada fase vidro de spins biquadrática) para valores da variância K suficientemente altos. Tais instabilidades podem estar relacionadas ao surgimento de efeitos de irreversibilidades, quando as funções respostas passam a depender da história do sistema (por exemplo: medidas da susceptibilidade em amostras que foram resfriadas na ausência de campo magnético (com campo aplicado após o resfriamento) e medidas feitas em amostras resfriadas na presença de um campo magnético podem levar a diferentes resultados)^{1,8}. Com base nos nossos resultados, muitos deles numéricos, concluímos que o sistema apresenta três fases distintas, duas das quais devem ser descritas corretamente considerando uma solução com quebra de simetria entre réplicas. Em particular, a região com quebra de simetria da fase P deve persistir mesmo para altas temperaturas, se K for suficientemente grande.

A fronteira separando as fases VSB e VS requer uma investigação mais profunda. Não é claro se a solução completa de Parisi irá mudar substancialmente sua localização. Contudo, esperamos que em torno dessa linha a dinâmica do sistema apresenta tempos de relaxação muito grandes, como ocorre em alguns sistemas reais de vidro quadrupolares^{78,79,82}. Esperamos voltar a esse problema em um trabalho futuro, onde iremos considerar o procedimento de quebra de simetria entre réplicas de Parisi.

Capítulo 3

Um modelo aleatório de spin 1 com interações de p -spins

3.1 Introdução

Podemos distinguir duas classes de modelos de campo médio para vidros de spins em função do caráter de suas transições de fases: em alguns modelos, como o modelo SK¹², existe uma transição de ordem contínua onde a susceptibilidade apresenta uma cúspide. Atualmente é aceito que esse modelo é descrito, a baixas temperaturas, pelo esquema completo (infinitos passos) de quebra de simetria entre réplicas proposto por Parisi^{14,15}. Em outros modelos, cujo protótipo é o "Random Energy Model" (REM)^{76,77}, a transição é de primeira ordem. Outros exemplos de modelos com este tipo de comportamento são os modelos de alcance infinito com interações entre p spins, com $p > 2$. Nesse modelos, em geral, não há necessidade de um esquema de quebra de simetria completo para obtermos soluções aceitáveis a baixas temperaturas. Há um consenso de que a primeira classe de modelos acima é apropriada para descrever vidros de spins reais, enquanto a segunda classe é apropriada para descrever a física dos vidros estruturais^{95,96} e, dessa forma, têm sido alvo de uma investigação teórica profunda nos últimos anos.

O modelo REM foi introduzido em 1980 por Derrida^{76,77}, para descrever um sistema cujos níveis de energia são variáveis aleatórias independentes. Muitas de suas propriedades são similares às do modelo SK. Por exemplo, qualitativamente tem o mesmo diagrama de fases e mesma energia livre a altas temperaturas. O REM é o limite de uma família

de modelos com interações aleatórias que generaliza o modelo SK. Essa família pode ser descrita por um sistema de N spins onde há interações aleatórias de longo alcance entre p spins. Quando as interações ocorrem somente entre dois spins ($p = 2$) recuperamos o modelo SK, enquanto o REM é obtido no limite $p \rightarrow \infty$. Derrida resolveu o problema do REM exatamente, obtendo uma expressão analítica fechada para a densidade da energia livre sem o uso das réplicas. Posteriormente, Gross e Mézard⁹⁷ estudaram o modelo SK generalizado com interações entre p spins com o objetivo de testar os métodos normalmente utilizados no estudo de vidros de spins; basicamente eles utilizaram o esquema de Parisi^{14,15} e as equações TAP. Usando o esquema de Parisi¹⁴, eles obtiveram a solução exata (no limite $p \rightarrow \infty$) apenas com um passo na quebra de simetria entre réplicas. O número de soluções das equações TAP é exponencialmente grande na região vidro de spins, a exemplo do que ocorre no caso $p = 2$. Derrida e Toulouse⁹⁸ mostraram que neste modelo existem grandezas que não são auto-mediantes; eles predizem as mesmas distribuições para quantidades físicas análogas obtidas anteriormente por Mézard *et al*⁹⁴ usando réplicas. Em seguida Gardner⁹⁹ estudou o mesmo problema nos limites p muito grande, mas finito, e $p \rightarrow 2$ usando o método das réplicas e mostrou que existem duas transições de fases. A uma temperatura T_1 existe um salto no parâmetro de ordem, mas sem calor latente. A uma temperatura menor T_2 , esta fase torna-se instável e há uma segunda mudança de fase, onde o parâmetro de ordem varia suavemente.

Uma característica importante, já mencionada, dos modelos com interações entre p spins é a conexão especialmente com as teorias dinâmicas de transições vidro estruturais^{95,96}. A origem dessa conexão é a natureza descontínua das transições nesses modelos. Em particular, é conhecido que esses modelos tem uma transição dinâmica a uma temperatura T_d , a qual é maior que a temperatura T_s , onde ocorre uma transição estática^{95,96,100}. Isso indica que em T_d a transição é puramente dinâmica; o tempo de relaxação diverge mas todas as quantidades termodinâmicas não apresentam nenhum tipo de singularidade. O que é observado em vidros reais é similar, no sentido de que a transição vítrea é puramente um efeito dinâmico^{95,96}. A temperatura vítrea T_g é definida como a temperatura na qual o tempo de relaxação tem valores muito maiores que os tempos

de observações usuais. A vantagem do modelo com p interações, é que as propriedades estáticas e dinâmicas podem ser facilmente estudadas. Na verdade, essa facilidade permite usarmos o modelo com p interações como ponto de partida para um maior entendimento da dinâmica de vidro de spins¹⁰¹.

O modelo com interações entre p spins, introduzido por Derrida, também pode ser implementado para casos com spins diferentes de $1/2$. Por exemplo, o caso com spin 1 foi estudado por Mottishaw⁷⁴. Uma motivação para isso é que modelos com spin 1, onde existem transições de primeira ordem, o método das réplicas torna-se problemático⁷⁴. Em tais casos, a energia livre obtida pelo método das réplicas precisa ser minimizada em relação aos parâmetros de ordem convencionais, mas precisa ser maximizada em relação ao parâmetro de ordem vidro de spins. Quando duas soluções localmente estáveis coexistem, como é o caso de transições de primeira ordem, a condição de estabilidade não faz distinção entre essas soluções. Procurando elucidar este problema, Mottishaw⁷⁴ estudou um modelo de spin 1 com interações entre p spins, no limite $p \rightarrow \infty$, sem o uso das réplicas. Mais recentemente Walasek⁷⁵ estudou um modelo de vidro de spins quadrupolar nos limites $p \rightarrow \infty$ e p muito grande, mas finito. Neste trabalho ele mostrou que o parâmetro de ordem vidro de spin é uma função degrau.

Existem ainda vários trabalhos que consideram modelos para vidros de spins com interações entre p spins^{75,102,103}. As principais motivações para estudarmos um modelo de certo modo artificial são as seguintes: i) apesar de pouco realista, veremos que ele apresenta comportamento qualitativamente similar a sistemas reais; ii) permite obter soluções exatas (no limite $p \rightarrow \infty$); iii) pode servir como ponto de partida para o estudo de dinâmica em vidros de spins. Podemos ver o modelo com interações entre p spins como um bom laboratório para estudarmos os aspectos cruciais que são inacessíveis em modelos mais realistas.

Nesse capítulo vamos estudar um modelo de vidro de spins com p -interações, considerando a competição entre os acoplamentos bilinear e biquadráticos. Quando $p = 2$, recuperamos o modelo estudado no capítulo 2. No limite $p \rightarrow \infty$ mostramos que o modelo é equivalente a um modelo com energias aleatórias (Apêndice D); nesse limite podemos

estudar o problema de duas maneiras: calculando a função de partição a partir da distribuição das energias, ou utilizando o método das réplicas. Como os dois formalismos são equivalentes no limite $p \rightarrow \infty$, deveremos obter os mesmos resultados. No entanto, vamos optar por estudar o problema utilizando o método das réplicas, pois assim podemos utilizar as equações obtidas para estudar toda uma família de problemas como função do parâmetro p .

3.2 O modelo e as equações básicas

Consideremos então um modelo vidro de spins de alcance infinito, descrito pelo hamiltoniano¹⁰⁴

$$\mathcal{H} = - \sum_{1 \leq i_1 < \dots < i_p \leq N} J_{i_1, i_2, \dots, i_p} S_{i_1} S_{i_2} \dots S_{i_p} - \sum_{1 \leq i_1 < \dots < i_p \leq N} K_{i_1, i_2, \dots, i_p} S_{i_1}^2 S_{i_2}^2 \dots S_{i_p}^2, \quad (3.1)$$

onde os N spins S_{i_k} podem tomar os valores $0, \pm 1, \dots, \pm S$; J_{i_1, i_2, \dots, i_p} , K_{i_1, i_2, \dots, i_p} são variáveis aleatórias com densidades de probabilidades dadas por

$$P(X_{i_1, i_2, \dots, i_p}) = \sqrt{\frac{N^{p-1}}{\pi p! X^2}} \exp\left(-\frac{X_{i_1, i_2, \dots, i_p}^2 N^{p-1}}{p! X^2}\right), \quad (3.2)$$

onde X pode ser substituído por J ou K . Devemos mencionar que iremos tomar o limite $p \rightarrow \infty$ mais adiante, porém a condição $N \gg p$ deve ser mantida de forma que a variância da distribuição acima seja finita.

No apêndice D mostramos que no limite $p \rightarrow \infty$ as energias das configurações de spins macroscopicamente distinguíveis são descorrelacionadas. Devemos mencionar que o modelo de vidro de spins com spin-1 e p interações na presença de um campo de anisotropia D foi estudado por Mottishaw⁷⁴; tal modelo é idêntico ao do presente estudo somente no caso $D = K = 0$. Além disso, os diagramas de fases desses dois modelos apresentam algumas características em comum; por exemplo, ambos apresentam três fases distintas. Contudo, enquanto o modelo de Mottishaw exibe uma fronteira de segunda ordem e duas de primeira ordem, mostramos que o diagrama de fases para o presente modelo não apresenta transições contínuas (segunda ordem), sendo caracterizado por três fronteiras de primeira ordem que se juntam em um ponto triplo.

Usando o método das réplicas para determinar a energia livre, o primeiro passo consiste em calcular a média sobre as variáveis aleatórias da função de partição de n réplicas:

$$\begin{aligned} \langle Z^n \rangle = & \text{Tr} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{i_1, \dots, i_p} \left[\sqrt{\frac{N^{p-1}}{\pi p! J^2}} \sqrt{\frac{N^{p-1}}{\pi p! K^2}} dJ_{i_1, \dots, i_p} dK_{i_1, \dots, i_p} \right] \\ & \exp \left[-\frac{N^{p-1}}{p!} \sum_{1 \leq i_1 < \dots < i_p \leq N} \left(\frac{J_{i_1, i_2, \dots, i_p}^2}{J^2} + \frac{K_{i_1, i_2, \dots, i_p}^2}{K^2} \right) \right. \\ & \left. + \sum_{1 \leq i_1 < \dots < i_p \leq N, \alpha} \beta \left(J_{i_1, i_2, \dots, i_p} S_{i_1}^\alpha S_{i_2}^\alpha \dots S_{i_p}^\alpha + K_{i_1, i_2, \dots, i_p} (S_{i_1}^\alpha)^2 (S_{i_2}^\alpha)^2 \dots (S_{i_p}^\alpha)^2 \right) \right] , \end{aligned} \quad (3.3)$$

onde $\beta = (k_B T)^{-1}$. Usando o resultado

$$\int_{-\infty}^{\infty} \sqrt{\frac{N^{p-1}}{\pi p!}} dX \exp \left[-\frac{N^{p-1} X^2}{p!} + \beta A X \right] = \exp \left[\frac{\beta^2 A^2 p!}{4 N^{p-1}} \right] , \quad (3.4)$$

a Eq. (3.3) fica

$$\begin{aligned} \langle Z^n \rangle = & \text{Tr} \exp \left\{ \frac{\beta^2 p!}{4 N^{p-1}} \sum_{1 \leq i_1 < \dots < i_p \leq N} \left[J^2 \left(\sum_{\alpha} S_{i_1}^\alpha S_{i_2}^\alpha \dots S_{i_p}^\alpha \right)^2 \right. \right. \\ & \left. \left. + K^2 \left(\sum_{\alpha} (S_{i_1}^\alpha S_{i_2}^\alpha \dots S_{i_p}^\alpha)^2 \right) \right] \right\} . \end{aligned} \quad (3.5)$$

Para desacoplar os somatórios em α , introduzimos as variáveis

$$q_{\alpha\beta} = \frac{1}{N} \sum_i S_i^\alpha S_i^\beta , \quad (3.6)$$

$$Q_{\alpha\beta} = \frac{1}{N} \sum_i (S_i^\alpha S_i^\beta)^2 \quad (3.7)$$

e

$$R_\alpha = \frac{1}{N} \sum_i (S_i^\alpha)^2 . \quad (3.8)$$

Com isso reescrevemos o primeiro somatório na Eq. (3.5) como

$$\begin{aligned} \sum_{1 \leq i_1 < \dots < i_p \leq N} \left(\sum_{\alpha} S_{i_1}^\alpha S_{i_2}^\alpha \dots S_{i_p}^\alpha \right)^2 = & \sum_{1 \leq i_1 < \dots < i_p \leq N} \left[2 \sum_{(\alpha\beta)} S_{i_1}^\alpha \dots S_{i_p}^\alpha S_{i_1}^\beta \dots S_{i_p}^\beta \right. \\ & \left. + \sum_{\alpha} (S_{i_1}^\alpha \dots S_{i_p}^\alpha)^2 \right] , \end{aligned} \quad (3.9)$$

ou

$$\sum_{1 \leq i_1 < \dots < i_p \leq N} \left(\sum_{\alpha} S_{i_1}^{\alpha} S_{i_2}^{\alpha} \dots S_{i_p}^{\alpha} \right)^2 = \frac{1}{p!} \left\{ 2 \sum_{(\alpha\beta)} \left[\sum_{i_1=1}^N S_{i_1}^{\alpha} S_{i_1}^{\beta} \dots \sum_{i_p=1}^N S_{i_p}^{\alpha} S_{i_p}^{\beta} \right] + \sum_{\alpha} \left[\sum_{i_1=1}^N (S_{i_1}^{\alpha})^2 \dots \sum_{i_p=1}^N (S_{i_p}^{\alpha})^2 \right] \right\} + O(N^{p-1}) \quad (3.10)$$

Assim, ficamos com

$$\sum_{1 \leq i_1 < \dots < i_p \leq N} \left(\sum_{\alpha} S_{i_1}^{\alpha} S_{i_2}^{\alpha} \dots S_{i_p}^{\alpha} \right)^2 = \frac{N^p}{p!} \left\{ \sum_{(\alpha\beta)} q_{\alpha\beta}^p + \sum_{\alpha} R_{\alpha}^p \right\} + O(N^{p-1}) \quad (3.11)$$

Analogamente, o segundo somatório na Eq. (3.5) pode ser escrito como

$$\sum_{1 \leq i_1 < \dots < i_p \leq N} \left(\sum_{\alpha} (S_{i_1}^{\alpha} S_{i_2}^{\alpha} \dots S_{i_p}^{\alpha})^2 \right) = \frac{N^p}{p!} \left\{ \sum_{(\alpha\beta)} Q_{\alpha\beta}^p + \sum_{\alpha} R_{\alpha}^p \right\} O(N^{p-1}) \quad (3.12)$$

Usando as Eqs. (3.11), (3.12) e a identidade

$$1 = \left(\frac{N}{2\pi i} \right)^{n^2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-i\infty}^{i\infty} \prod_{(\alpha\beta)} d\lambda_{\alpha\beta} dq_{\alpha\beta} d\gamma_{\alpha\beta} dQ_{\alpha\beta} \prod_{\alpha} d\xi_{\alpha} dp_{\alpha} \exp \left[- \sum_{(\alpha\beta)} \lambda_{\alpha\beta} \left(Nq_{\alpha\beta} - \sum_i S_i^{\alpha} S_i^{\beta} \right) - \sum_{(\alpha\beta)} \gamma_{\alpha\beta} \left(NQ_{\alpha\beta} - \sum_i (S_i^{\alpha} S_i^{\beta})^2 \right) - \sum_{\alpha} \xi_{\alpha} \left(NR_{\alpha} - \sum_i (S_i^{\alpha})^2 \right) \right] \quad (3.13)$$

a Eq. (3.5) passa a ser escrita na forma

$$\begin{aligned} \langle Z^n \rangle &= \left(\frac{N}{2\pi i} \right)^{n^2} \text{Tr} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-i\infty}^{i\infty} \prod_{(\alpha\beta)} d\lambda_{\alpha\beta} dq_{\alpha\beta} d\gamma_{\alpha\beta} dQ_{\alpha\beta} \prod_{\alpha} d\xi_{\alpha} dp_{\alpha} \\ &\exp \left[- \sum_{(\alpha\beta)} \lambda_{\alpha\beta} \left(Nq_{\alpha\beta} - \sum_i S_i^{\alpha} S_i^{\beta} \right) - \sum_{\alpha} \xi_{\alpha} \left(NR_{\alpha} - \sum_i (S_i^{\alpha})^2 \right) \right. \\ &\left. - \sum_{(\alpha\beta)} \gamma_{\alpha\beta} \left(NQ_{\alpha\beta} - \sum_i (S_i^{\alpha} S_i^{\beta})^2 \right) \right. \\ &\left. + \frac{\beta^2}{4} \left(2 \sum_{(\alpha\beta)} (J^2 q_{\alpha\beta}^p + K^2 Q_{\alpha\beta}^p) + (J^2 + K^2) \sum_{\alpha} R_{\alpha}^p \right) \right] \quad (3.14) \end{aligned}$$

Vemos que as as integrais podem ser resolvidas pelo método do ponto de sela no limite $N \rightarrow \infty$. Assim, a energia livre por spin fica

$$-\beta f = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{n} g(q_{\alpha\beta}, \lambda_{\alpha\beta}, Q_{\alpha\beta}, \gamma_{\alpha\beta}, R_{\alpha}, \xi_{\alpha}) \quad (3.15)$$

com

$$\begin{aligned}
g(q_{\alpha\beta}, \lambda_{\alpha\beta}, Q_{\alpha\beta}, \gamma_{\alpha\beta}, R_{\alpha}, \xi_{\alpha}) &= \frac{\beta^2}{2} \sum_{(\alpha\beta)} (J^2 q_{\alpha\beta}^p + K^2 Q_{\alpha\beta}) + \frac{\beta^2}{4} (J^2 + K^2) \sum_{\alpha} R_{\alpha}^p \\
&\quad - \sum_{(\alpha\beta)} (\lambda_{\alpha\beta} q_{\alpha\beta} + \gamma_{\alpha\beta} Q_{\alpha\beta}) - \sum_{\alpha} \xi_{\alpha} R_{\alpha} \quad (3.16) \\
&\quad + \ln \text{Tr exp} \left[\sum_{(\alpha\beta)} (\lambda_{\alpha\beta} S^{\alpha} S^{\beta} + \gamma_{\alpha\beta} (S^{\alpha} S^{\beta})^2) \right. \\
&\quad \left. + \sum_{\alpha} \xi_{\alpha} (S^{\alpha})^2 \right] ,
\end{aligned}$$

onde $\alpha, \beta = 1, \dots, n$ denotam índices de réplicas. As quantidades $(\lambda_{\alpha\beta}, \gamma_{\alpha\beta}, \xi_{\alpha})$ representam multiplicadores de Lagrange, permitindo fixar o conjunto de parâmetros de ordem $(q_{\alpha\beta}, Q_{\alpha\beta}, R_{\alpha})$. A minimização de $G(q_{\alpha\beta}, \lambda_{\alpha\beta}, Q_{\alpha\beta}, \gamma_{\alpha\beta}, R_{\alpha}, \xi_{\alpha})$ com relação à $q_{\alpha\beta}, \lambda_{\alpha\beta}, Q_{\alpha\beta}, \gamma_{\alpha\beta}, R_{\alpha}$ e ξ_{α} fornece as condições de equilíbrio

$$\frac{\partial g}{\partial q_{\alpha\beta}} = 0 \Rightarrow \lambda_{\alpha\beta} = \frac{p\beta^2 J^2}{2} q_{\alpha\beta}^{p-1} , \quad (3.17)$$

$$\frac{\partial g}{\partial \lambda_{\alpha\beta}} = 0 \Rightarrow q_{\alpha\beta} = \langle S^{\alpha} S^{\beta} \rangle , \quad (3.18)$$

$$\frac{\partial g}{\partial Q_{\alpha\beta}} = 0 \Rightarrow \gamma_{\alpha\beta} = \frac{pK^2 \beta^2}{2} Q_{\alpha\beta}^{p-1} , \quad (3.19)$$

$$\frac{\partial g}{\partial \gamma_{\alpha\beta}} = 0 \Rightarrow Q_{\alpha\beta} = \langle (S^{\alpha} S^{\beta})^2 \rangle , \quad (3.20)$$

$$\frac{\partial g}{\partial R_{\alpha}} = 0 \Rightarrow \xi_{\alpha} = \frac{p\beta^2}{4} (J^2 + K^2) R_{\alpha}^{p-1} \quad (3.21)$$

e

$$\frac{\partial g}{\partial \xi_{\alpha}} = 0 \Rightarrow R_{\alpha} = \langle (S^{\alpha})^2 \rangle . \quad (3.22)$$

Estaremos interessados no limite $p \rightarrow \infty$ porque, normalmente, os modelos com $p \rightarrow \infty$ exibem o mesmo comportamento qualitativo para valores finitos de p ($p > 2$). Além disto, nesse limite temos a vantagem de obter soluções analíticas, visto que as configurações de energia distintas são descorrelacionadas^{76,74,97}. Por outro lado, os modelos com p finito requerem um esforço de cálculo numérico considerável. Na próxima seção estudamos a solução com simetria entre réplicas.

3.3 Solução com simetria entre réplicas.

Considerando a solução com simetria entre réplicas

$$\begin{aligned}
 q_{\alpha\beta} &= q \\
 Q_{\alpha\beta} &= Q \\
 R_{\alpha} &= R \\
 \lambda_{\alpha\beta} &= \lambda \\
 \gamma_{\alpha\beta} &= \gamma \\
 \xi_{\alpha} &= \xi
 \end{aligned} \tag{3.23}$$

podemos escrever

$$\lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{n} \sum_{(\alpha\beta)} (J^2 q_{\alpha\beta}^p + K^2 Q_{\alpha\beta}^2) = -(J^2 q^p + K^2 Q^p) \quad , \tag{3.24}$$

$$\lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{n} \sum_{(\alpha\beta)} (\lambda_{\alpha\beta} q_{\alpha\beta} + \gamma_{\alpha\beta} Q_{\alpha\beta}) = -(\lambda q + \gamma Q) \quad , \tag{3.25}$$

e

$$\lim_{n \rightarrow 0} -\frac{1}{n} \sum_{\alpha} \xi_{\alpha} R_{\alpha} = -\xi R \quad . \tag{3.26}$$

O cálculo do termo no interior do logaritmo da Eq. (3.16) é idêntico ao cálculo efetuado com $p = 2$. Então, a energia livre pode ser escrita como

$$\begin{aligned}
 -\beta f = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{n} g = & -\frac{\beta^2}{4} (J^2 q^p + K^2 Q^p) + \frac{\beta^2}{4} (J^2 + K^2) R^p + \frac{1}{2} (\lambda q + \gamma Q) - \xi R \\
 & + \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx dy}{2\pi} \exp\left(-\frac{x^2 + y^2}{2}\right) \ln Z \quad , \tag{3.27}
 \end{aligned}$$

onde

$$Z = 1 + 2e^B \cosh(\sqrt{\lambda}x) \tag{3.28}$$

e

$$B = -\frac{\lambda + \gamma}{2} + \xi + \sqrt{\gamma}y \quad . \tag{3.29}$$

As equações dos parâmetros de ordem ficam

$$\lambda = \frac{p\beta^2 J^2}{2} q^{p-1} \quad , \tag{3.30}$$

$$q = \langle \varphi_1^2 \rangle_{xy} , \quad (3.31)$$

$$\gamma = \frac{pK^2\beta^2}{2} Q^{p-1} , \quad (3.32)$$

$$Q = \langle \varphi_2^2 \rangle_{xy} , \quad (3.33)$$

$$\xi = \frac{p\beta^2}{4} (J^2 + K^2) R^{p-1} \quad (3.34)$$

e

$$R = \langle \varphi_2 \rangle_{xy} , \quad (3.35)$$

onde

$$\varphi_1 = \frac{2e^B \sinh(\sqrt{\lambda}x)}{Z} , \quad (3.36)$$

$$\varphi_2 = \frac{2e^B \cosh(\sqrt{\lambda}x)}{Z} \quad (3.37)$$

e

$$\langle \dots \rangle_{xy} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx dy}{2\pi} \exp\left(-\frac{x^2 + y^2}{2}\right) \dots \quad (3.38)$$

É fácil ver que os parâmetros de ordem Q e R nunca se anulam e que as Eqs. (3.30–3.35) sempre apresentam a solução trivial com $q = \lambda = 0$, para valores arbitrários de p ; identificamos essa solução como a fase paramagnética (P).

As equações acima contém como casos particulares alguns problemas estudados anteriormente. Fazendo $p = 2$ recuperamos as equações obtidas no modelo com J_{ij} e K_{ij} aleatórios estudado no último capítulo; além disso, tomando $K = 0$, recuperamos as equações obtidas por Mottishaw⁷⁴. Na próxima seção iremos estudar o caso $p \rightarrow \infty$.

3.3.1 Limite de $p \rightarrow \infty$

Vamos agora analisar as soluções das Eqs. (3.30–3.35) no limite $p \rightarrow \infty$. É importante notar que nesse limite a condição $N \gg p$ deve ser mantida para que o limite termodinâmico seja correto. Isso é claramente satisfeito, visto que o limite $N \rightarrow \infty$ é tomado quando resolvemos as integrais pelo método de ponto de sela.

No limite $p \rightarrow \infty$, não existe solução estável com $q \neq 0$, descrevendo um vidro de spins, de maneira similar ao que acontece com o modelo de spin $\frac{1}{2}$ correspondente⁹⁹; contudo, no presente caso existem duas soluções para os parâmetros Q e R que descrevemos abaixo.

Solução paramagnética (P)

Uma possível solução no limite $p \rightarrow \infty$ é

$$q = 0 \quad , \quad Q < 1 \quad , \quad R < 1 \Rightarrow \quad (3.39)$$

$$\lambda = \gamma = \xi = 0 \quad . \quad (3.40)$$

Com isso a energia livre por spin fica

$$f = -k_B T \ln 3 \quad , \quad (3.41)$$

enquanto a entropia por spin é

$$s = -\frac{\partial f}{\partial T} = k_B \ln 3 \quad . \quad (3.42)$$

A entropia dessa solução é sempre positiva.

Solução quadrupolar do tipo spin 1/2 (Q)

Outra possível solução é

$$q = 0 \quad , \quad Q = 1 \quad , \quad R = 1 \Rightarrow \quad (3.43)$$

$$\lambda = 0 \quad , \quad \gamma = \frac{K^2 \beta^2}{2} p \quad , \quad \xi = \frac{\beta^2}{4} (J^2 + K^2) p \quad . \quad (3.44)$$

Esta solução representa uma fase onde os spins estão todos congelados aleatoriamente nos estados $S = \pm 1$, enquanto o estado $S = 0$ fica completamente excluído. Desta forma, podemos dizer que existe um ordenamento quadrupolar do tipo spin 1/2, pois $R = 1$. Em consequência deste fato, o parâmetro Q também é igual a 1, mas não passa de um parâmetro induzido. Por esta razão, preferimos chamar esta fase de quadrupolar.

Seguindo adiante com nossos cálculos, temos

$$B = -\frac{\gamma}{2} + \xi + \sqrt{\gamma y} \quad , \quad (3.45)$$

ou seja, $B \gg 1$. Desta forma, $Z \approx 2e^B$. Assim, a integral na Eq. (3.27) fica

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx dy}{2\pi} \exp\left(-\frac{x^2 + y^2}{2}\right) \ln Z \approx \ln 2 + \xi - \frac{\gamma}{2} \quad . \quad (3.46)$$

A energia livre por spin para essa solução é dada, então, por

$$f = -\frac{J^2}{4k_B T} - k_B T \ln 2 \quad (3.47)$$

enquanto a entropia por spin é dada pela expressão

$$s = -\frac{\partial f}{\partial T} = k_B \left[\ln 2 - \frac{J}{4(k_B T)^2} \right] \quad (3.48)$$

A entropia torna-se negativa abaixo da temperatura

$$k_B T_c = \frac{J}{2\sqrt{\ln 2}} = 0.600561 \dots \quad (3.49)$$

de forma que essa é uma solução não física abaixo de T_c .

As duas soluções acima existem em todo o espaço de fases, de forma que deve existir uma linha de transições de primeira ordem separando as fases representadas por essas soluções. De fato esta linha existe, e é obtida igualando as energias livres das respectivas fases (Eqs. (3.41) e (3.47)). Este procedimento nos dá uma linha de transições de fases de primeira ordem independente de K

$$k_B T/J = \frac{1}{2\sqrt{\ln 3/2}} = 0.7852 \dots \quad (3.50)$$

Encontramos também outras soluções, porém todas são instáveis. Dessa forma, no limite $p \rightarrow \infty$, a solução com simetria entre réplicas nos leva ao diagrama de fases exibido na Figura 3.1, com duas fases P ($q = 0, Q = 4/9, R = 2/3$) e Q ($q = 0, Q = R = 1$) separadas por uma linha de primeira ordem. Além disso temos também uma região de instabilidade termodinâmica a baixas temperaturas.

Visto que a solução com simetria entre réplicas leva a uma entropia negativa a baixas temperaturas na fase Q, devemos proceder com o processo de quebra de simetria entre réplicas para tentar obter a solução correta. Antes disso, porém, vamos efetuar a análise de estabilidade da solução com simetria entre réplicas, para verificar a estabilidade das duas soluções acima com respeito a flutuações no espaço das réplicas.

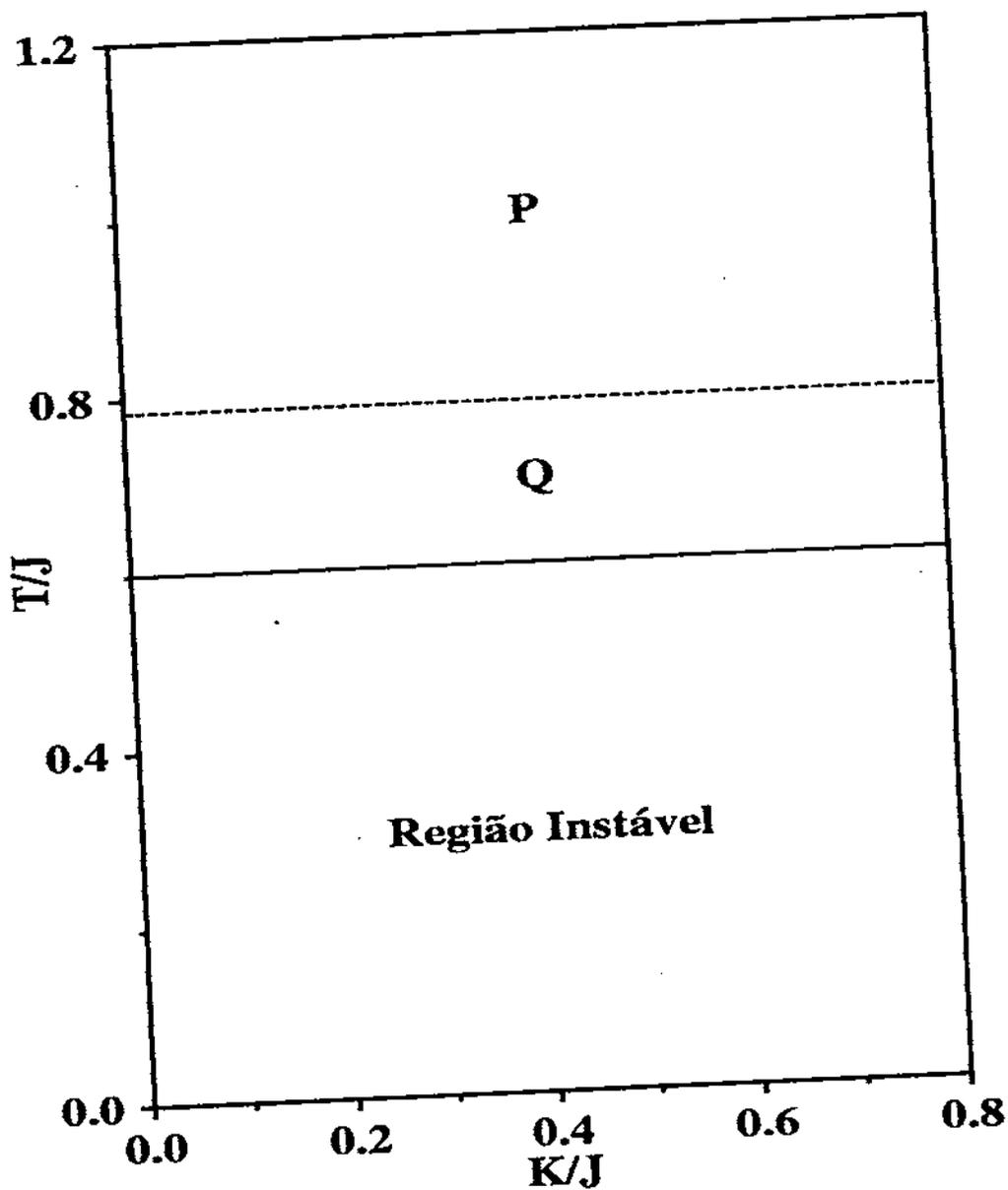


Figura 3.1: Diagrama de fases na solução com simetria entre réplicas. As fases P e Q estão separadas por uma linha de transição de primeira ordem. Na região instável a solução Q apresenta uma entropia negativa.

3.4 Análise de estabilidade de Almeida-Thouless da solução com simetria entre réplicas

Vamos verificar a estabilidade da solução com simetria entre réplicas seguindo de Almeida e Thouless¹³. Podemos reescrever a energia livre de réplicas (3.15) usando as Eqs. (3.17), (3.19) e (3.21),

$$\beta f = g = -\frac{\beta^2}{2} \sum_{(\alpha\beta)} (J^2 q_{\alpha\beta}^p + K^2 Q_{\alpha\beta}^p) - \frac{\beta^2}{4} (J^2 + K^2) \sum_{\alpha} R_{\alpha}^p + \frac{p\beta^2}{2} \sum_{(\alpha\beta)} (J^2 q_{\alpha\beta}^p + K^2 Q_{\alpha\beta}^p) + \frac{p\beta^2(J^2 + K^2)}{4} \sum_{\alpha} R_{\alpha}^p - \ln \text{Tr} \exp \left[\frac{p\beta^2}{2} \sum_{(\alpha\beta)} (J^2 q_{\alpha\beta}^{p-1} S^{\alpha} S^{\beta} + K^2 Q_{\alpha\beta}^{p-1} (S^{\alpha} S^{\beta})^2) + \frac{p\beta^2}{4} (J^2 + K^2) \sum_{\alpha} R_{\alpha}^{p-1} (S^{\alpha})^2 \right] \quad (3.51)$$

A matriz de estabilidade é dada por

$$\tilde{G} = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 g}{\partial R_{\alpha} \partial R_{\beta}} & \frac{\partial^2 g}{\partial R_{\alpha} \partial q_{\nu\gamma}} & \frac{\partial^2 g}{\partial R_{\alpha} \partial Q_{\nu\gamma}} \\ \frac{\partial^2 g}{\partial q_{\nu\gamma} \partial R_{\alpha}} & \frac{\partial^2 g}{\partial q_{\alpha\beta} \partial q_{\nu\gamma}} & \frac{\partial^2 g}{\partial q_{\alpha\beta} \partial Q_{\nu\gamma}} \\ \frac{\partial^2 g}{\partial R_{\alpha} \partial Q_{\nu\gamma}} & \frac{\partial^2 g}{\partial q_{\alpha\beta} \partial Q_{\nu\gamma}} & \frac{\partial^2 g}{\partial Q_{\alpha\beta} \partial Q_{\nu\gamma}} \end{pmatrix} \quad (3.52)$$

O cálculo dos autovalores da matriz acima é idêntico ao cálculo do caso $p = 2$. O que muda são apenas alguns detalhes na forma dos blocos da matriz. No Apêndice E mostramos a forma explícita dos vários tipos de elementos da matriz \tilde{G} . Nas próximas seções vamos determinar o comportamento dos autovalores longitudinais e transversais para as soluções com simetria entre réplicas obtidas acima considerando sempre o limite $p \rightarrow \infty$, lembrando que uma solução é instável quando algum autovalor associado a ela torna-se negativo.

3.4.1 Autovalores longitudinais // transversais

Os autovalores do tipo I (longitudinais) são dados (no limite $n \rightarrow 0$) por

$$\begin{vmatrix} A - B - \Lambda & D - C & F - E \\ 2(C - D) & G - 4H + 3I - \Lambda & J - 4K + 3L \\ 2(E - F) & J - 4K + 3L & M - 4N + 3O - \Lambda \end{vmatrix} = 0 \quad (3.53)$$

Solução P

A solução P no limite $p \rightarrow \infty$ é dada por

$$q = 0 \quad , \quad Q = 4/9 \quad , \quad R = 2/3 \Rightarrow \quad (3.54)$$

$$\lambda = \gamma = \xi = 0 \quad . \quad (3.55)$$

Com isso todos os elementos da matriz de estabilidade são nulos, de forma que os autovalores associados com essa solução também são nulos, isso indica que a fase é marginalmente estável.

Solução Q

A solução Q no limite $p \rightarrow \infty$ é dada por

$$q = 0 \quad , \quad Q = 1 \quad , \quad R = 1 \Rightarrow \quad (3.56)$$

$$\lambda = 0 \quad , \quad \gamma = \frac{K^2 \beta^2}{2} p \quad , \quad \xi = \frac{\beta^2}{4} (J^2 + K^2) p \quad . \quad (3.57)$$

Nesse caso, apenas os elementos da matriz de estabilidade A e M são diferentes de zero, de forma que os autovalores são dados por:

$$\Lambda_1 = A \quad , \quad \Lambda_2 = 0 \quad , \quad \Lambda_3 = M \quad , \quad (3.58)$$

onde

$$A = \frac{\beta^2 (J^2 + K^2) p (p - 1)}{4}$$

e

$$M = \frac{\beta^2 K^2 p (p - 1)}{2}$$

Vemos que essa solução também é marginalmente estável, visto que $\lambda_2 = 0$, enquanto os outros dois autovalores divergem no limite $p \rightarrow \infty$, mas sempre com sinal positivo.

É interessante notar, pelos resultados acima, que as duas fases são marginalmente estáveis em todo o diagrama de fases, levando em conta as flutuações dos parâmetros de ordem. Porém, a solução Q é não física para temperaturas abaixo de $T \approx 0.6$. Além disto, vimos que na solução com simetria entre réplicas não existem outras soluções aceitáveis, de forma que vamos considerar as soluções com um passo de quebra de simetria de Parisi^{14,15} com o objetivo de determinar o diagrama de fases completo.

3.5 Solução com um passo de quebra de simetria entre réplicas

Vamos considerar o primeiro passo de quebra de simetria proposta por Parisi^{14,15}, nos quatro parâmetros de réplicas: $\lambda_{\alpha\beta}, q_{\alpha\beta}, \gamma_{\alpha\beta}, Q_{\alpha\beta}$. Dividimos as matrizes em blocos de tamanho $m \times m$ de forma que as matrizes serão formadas por $(n/m)^2$ blocos. Os blocos da diagonal têm sua diagonal nula e todos os outros elementos iguais; por exemplo na matriz $q_{\alpha\beta}$ os elementos dos blocos diagonais valem q_1 , exceto as diagonais que são nulas. Todos os blocos fora das diagonais têm elementos iguais; no caso da matriz $q_{\alpha\beta}$ os elementos dos blocos fora das diagonais são iguais a q_0 ; as matrizes $\lambda_{\alpha\beta}, g_{\alpha\beta}$ e $Q_{\alpha\beta}$ são divididas de forma análoga.

Os somatórios na equação (3.17) podem ser escritos como

$$\sum_{\alpha \neq \beta} q_{\alpha\beta}^p = q_1^p n(m-1) + q_0^p n(n-m) \quad , \quad (3.59)$$

$$\sum_{\alpha \neq \beta} Q_{\alpha\beta}^p = Q_1^p n(m-1) + Q_0^p n(n-m) \quad , \quad (3.60)$$

$$\sum_{\alpha \neq \beta} \lambda_{\alpha\beta} q_{\alpha\beta} = \lambda_1 q_1 n(m-1) + \lambda_0 q_0 n(n-m) \quad (3.61)$$

e

$$\sum_{\alpha \neq \beta} \gamma_{\alpha\beta} Q_{\alpha\beta} = \gamma_1 Q_1 n(m-1) + \gamma_0 Q_0 n(n-m) \quad . \quad (3.62)$$

No argumento da exponencial na Eq. (3.17) temos as somas

$$\frac{1}{2} \sum_{\alpha \neq \beta} \lambda_{\alpha\beta} S^\alpha S^\beta = \frac{1}{2} \left[\lambda_0 \left(\sum_{\alpha=1}^n S^\alpha \right)^2 - \lambda_0 \sum_{k=1}^{n/m} \left(\sum_{c_k=1}^m S^{c_k} \right)^2 + \lambda_1 \sum_{k=1}^{n/m} \left(\sum_{c_k=1}^m S^{c_k} \right)^2 - \lambda_1 \sum_{\alpha=1}^n (S^\alpha)^2 \right] \quad (3.63)$$

e

$$\frac{1}{2} \sum_{\alpha \neq \beta} \gamma_{\alpha\beta} (S^\alpha S^\beta)^2 = \frac{1}{2} \left[\gamma_0 \left(\sum_{\alpha=1}^n (S^\alpha)^2 \right) - \gamma_0 \sum_{k=1}^{n/m} \left(\sum_{c_k=1}^m (S^{c_k})^2 \right) + \gamma_1 \sum_{k=1}^{n/m} \left(\sum_{c_k=1}^m (S^{c_k})^2 \right) - \gamma_1 \sum_{\alpha=1}^n (S^\alpha)^2 \right], \quad (3.64)$$

onde k indica o número do bloco e c_k o número da réplica dentro do bloco.

Usando as equações acima a energia, o último termo na Eq. (3.17) pode ser escrito como

$$\text{Tr} e^{\mathcal{H}_{ef}} = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx_0 dx_1}{2\pi} e^{-\frac{x_0^2 + x_1^2}{2}} \left[\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dy_0 dy_1}{2\pi} e^{-\frac{y_0^2 + y_1^2}{2}} (\text{Tr} e^B)^m \right]^{n/m}, \quad (3.65)$$

onde

$$B = \left(\sqrt{\lambda_0} x_0 + \sqrt{\lambda_1 - \lambda_0} y_0 \right) S + \left(\sqrt{\gamma_0} x_1 + \sqrt{\gamma_1 - \gamma_0} y_1 + \xi - \frac{\lambda_1}{2} - \frac{\gamma_1}{2} \right) S^2. \quad (3.66)$$

No limite $n \rightarrow 0$, podemos usar a mesma aproximação para o caso $p = 2$ e obter

$$\ln \text{Tr} e^{\mathcal{H}_{ef}} = \frac{n}{m} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx_0 dx_1}{2\pi} e^{-\frac{x_0^2 + x_1^2}{2}} \ln \left[\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dy_0 dy_1}{2\pi} e^{-\frac{y_0^2 + y_1^2}{2}} (\text{Tr} e^B)^m \right] + O(n). \quad (3.67)$$

Então a energia livre (3.17), após tomarmos o limite $n \rightarrow 0$, fica

$$\begin{aligned} -f = & \frac{\beta J^2}{4} q_1^p (m-1) - \frac{\beta J^2}{4} q_0^p m + \frac{\beta K^2}{4} Q_1^p (m-1) - \frac{\beta K^2}{4} Q_0^p m + \frac{\beta}{4} (J^2 + K^2) R^p \\ & - \frac{1}{2\beta} \lambda_1 q_1 (m-1) + \frac{1}{2\beta} \lambda_0 q_0 m - \frac{1}{2\beta} \gamma_1 Q_1 (m-1) \\ & + \frac{1}{2\beta} \gamma_0 Q_0 m - \frac{1}{\beta} \xi R + \frac{1}{\beta m} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx_0 dx_1}{2\pi} e^{-\frac{x_0^2 + x_1^2}{2}} \ln Z(x_0, x_1), \end{aligned} \quad (3.68)$$

onde

$$Z(x_0, x_1) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dy_0 dy_1}{2\pi} e^{-\frac{y_0^2 + y_1^2}{2}} (\text{Tr } e^B)^m \quad (3.69)$$

A minimização da energia livre (3.68) com relação aos parâmetros q_0, q_1, Q_0, Q_1 e R é trivial e fornece os seguintes resultados:

$$\frac{\partial f}{\partial q_0} = 0 \Rightarrow \lambda_0 = \frac{\beta^2 J^2 p}{2} q_0^{p-1} \quad (3.70)$$

$$\frac{\partial f}{\partial q_1} = 0 \Rightarrow \lambda_1 = \frac{\beta^2 J^2 p}{2} q_1^{p-1} \quad (3.71)$$

$$\frac{\partial f}{\partial Q_0} = 0 \Rightarrow \gamma_0 = \frac{\beta^2 K^2 p}{2} Q_0^{p-1} \quad (3.72)$$

$$\frac{\partial f}{\partial Q_1} = 0 \Rightarrow \gamma_1 = \frac{\beta^2 K^2 p}{2} Q_1^{p-1} \quad (3.73)$$

e

$$\frac{\partial f}{\partial R} = 0 \Rightarrow \xi = \frac{\beta^2 p}{4} (J^2 + K^2) R^{p-1} \quad (3.74)$$

A minimização com relação aos outros parâmetros fornece

$$q_0 = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx_0 dx_1}{2\pi} e^{-\frac{x_0^2 + x_1^2}{2}} \left[\frac{\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dy_0 dy_1}{2\pi} e^{-\frac{y_0^2 + y_1^2}{2}} 2(1 + 2e^D \cosh A)^{m-1} e^D \sinh A}{\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dy_0 dy_1}{2\pi} e^{-\frac{y_0^2 + y_1^2}{2}} (1 + 2e^D \cosh A)^m} \right]^2 \quad (3.75)$$

$$q_1 = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx_0 dx_1}{2\pi} e^{-\frac{x_0^2 + x_1^2}{2}} \left[\frac{\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dy_0 dy_1}{2\pi} e^{-\frac{y_0^2 + y_1^2}{2}} 4(1 + 2e^D \cosh A)^{m-2} e^{2D} (\sinh A)^2}{\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dy_0 dy_1}{2\pi} e^{-\frac{y_0^2 + y_1^2}{2}} (1 + 2e^D \cosh A)^m} \right] \quad (3.76)$$

$$Q_0 = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx_0 dx_1}{2\pi} e^{-\frac{x_0^2 + x_1^2}{2}} \left[\frac{\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dy_0 dy_1}{2\pi} e^{-\frac{y_0^2 + y_1^2}{2}} 2(1 + 2e^D \cosh A)^{m-1} e^D \cosh A}{\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dy_0 dy_1}{2\pi} e^{-\frac{y_0^2 + y_1^2}{2}} (1 + 2e^D \cosh A)^m} \right]^2, \quad (3.77)$$

$$Q_1 = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx_0 dx_1}{2\pi} e^{-\frac{x_0^2 + x_1^2}{2}} \left[\frac{\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dy_0 dy_1}{2\pi} e^{-\frac{y_0^2 + y_1^2}{2}} 4(1 + 2e^D \cosh A)^{m-2} e^{2D} (\cosh A)^2}{\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dy_0 dy_1}{2\pi} e^{-\frac{y_0^2 + y_1^2}{2}} (1 + 2e^D \cosh A)^m} \right], \quad (3.78)$$

$$R = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx_0 dx_1}{2\pi} e^{-\frac{x_0^2 + x_1^2}{2}} \left[\frac{\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dy_0 dy_1}{2\pi} e^{-\frac{y_0^2 + y_1^2}{2}} 2(1 + 2e^D \cosh A)^{m-1} e^D \cosh A}{\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dy_0 dy_1}{2\pi} e^{-\frac{y_0^2 + y_1^2}{2}} (1 + 2e^D \cosh A)^m} \right], \quad (3.79)$$

além da equação para m ,

$$\begin{aligned} \frac{\partial(-f)}{\partial m} &= \frac{\beta J^2}{4}(q_1^p - q_0^p) + \frac{\beta K^2}{4}(Q_1^p - Q_0^p) - \frac{1}{2\beta}(\lambda_1 q_1 - \lambda_0 q_0 + \gamma_1 Q_1 - \gamma_0 Q_0) \\ &\quad - \frac{1}{\beta m^2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx_0 dx_1}{2\pi} e^{-\frac{x_0^2 + x_1^2}{2}} \ln Z(x_0, x_1) \\ &\quad + \frac{1}{\beta m} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx_0 dx_1}{2\pi} e^{-\frac{x_0^2 + x_1^2}{2}} \\ &\quad \left[\frac{\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dy_0 dy_1}{2\pi} e^{-\frac{y_0^2 + y_1^2}{2}} (1 + 2e^D \cosh A)^m \ln(1 + 2e^D \cosh A)}{\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dy_0 dy_1}{2\pi} e^{-\frac{y_0^2 + y_1^2}{2}} (1 + 2e^D \cosh A)^m} \right] = 0, \end{aligned}$$

onde

$$A = \sqrt{\lambda_0 x_0} + \sqrt{\lambda_1 - \lambda_2 y_0} \quad (3.81)$$

e

$$D = \sqrt{\gamma_0 x_1} + \sqrt{\gamma_1 - \gamma_0 y_1} - \xi - \frac{\lambda_1 + \gamma_1}{2} \quad (3.82)$$

As equações acima valem para qualquer valor de $p > 1$. Em particular, tomando $p = 2$ obtemos as respectivas equações para o primeiro passo de quebra de simetria de Parisi do modelo tratado no Capítulo 2. Porém, estamos interessados aqui no caso $p \rightarrow \infty$, que estudaremos na próxima seção.

3.5.1 Limite $p \rightarrow \infty$

No limite $p \rightarrow \infty$ os parâmetros $\lambda_0, \lambda_1, \gamma_0, \gamma_1$ e ξ podem tomar os seguintes valores.

$$\lambda_0 = \begin{cases} \frac{\beta^2 p}{2} & \text{se } q_0 = 1 \\ 0 & \text{se } q_0 < 1 \end{cases}, \quad (3.83)$$

$$\lambda_1 = \begin{cases} \frac{\beta^2 p}{2} & \text{se } q_1 = 1 \\ 0 & \text{se } q_1 < 1 \end{cases}, \quad (3.84)$$

$$\gamma_0 = \begin{cases} \frac{\beta^2 K^2 p}{2} & \text{se } Q_0 = 1 \\ 0 & \text{se } Q_0 < 1 \end{cases}, \quad (3.85)$$

$$\gamma_1 = \begin{cases} \frac{\beta^2 K^2 p}{2} & \text{se } Q_1 = 1 \\ 0 & \text{se } Q_1 < 1 \end{cases} \quad (3.86)$$

e

$$\xi = \begin{cases} \frac{\beta^2 (J^2 + K^2) p}{4} & \text{se } R = 1 \\ 0 & \text{se } R < 1 \end{cases} \quad (3.87)$$

Os parâmetros q_0 e q_1 são definidos tais que $0 \leq q_0 \leq q_1 \leq 1$. Se $q_0 < 1$ temos $\lambda_0 = 0$, se tivermos também $q_1 < 1$ teremos $\lambda_1 = 0$ e recuperamos a solução com simetria entre réplicas. Para uma solução com quebra de simetria, consideremos a solução vidro de spins

quadrupolar (VSQ) dada por

$$\begin{aligned}
 q_0 < 1 &\Rightarrow \lambda_0 = 0 \quad , \\
 q_1 &= 1 \quad , \\
 Q_0 < 1 &\Rightarrow \gamma_0 = 0 \quad , \\
 Q_1 &= 1 \quad .
 \end{aligned}
 \tag{3.88}$$

Na energia livre temos que calcular a integral

$$J = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx_0 dx_1}{2\pi} e^{-\frac{x_0^2 + x_1^2}{2}} \ln \left[\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dy_0 dy_1}{2\pi} e^{-\frac{y_0^2 + y_1^2}{2}} z^m \right] \quad , \tag{3.89}$$

onde

$$\begin{aligned}
 z &= 1 + 2e^D \cosh A \quad , \\
 D &= \xi - \frac{\pi}{2} - \frac{\lambda_1}{2} + \sqrt{\gamma_1} y_1 \quad , \\
 A &= \sqrt{\lambda_1} y_0 \quad .
 \end{aligned}
 \tag{3.90}$$

Considerando a solução acima (3.88), temos $\lambda_1, \gamma_1 \approx \infty$ e a integral J fica

$$J = \ln 2 + m \left[\xi + \left(\frac{\lambda_1 + \gamma_1}{2} \right) (m - 1) \right] \quad . \tag{3.91}$$

De forma que a energia livre pode ser expressa como

$$\begin{aligned}
 -f &= \frac{\beta J^2}{4} q_1^2 (m - 1) + \frac{\beta K^2}{4} Q_1^2 (m - 1) + \frac{\beta}{4} (J^2 + K^2) R^2 \\
 &\quad - \frac{1}{2\beta} (\lambda_1 q_1 + \gamma_1 Q_1) (m - 1) + \frac{1}{\beta} \left(\xi - \frac{1}{2} (\lambda_1 + \gamma_1) \right) \\
 &\quad + \frac{m}{2\beta} (\lambda_1 + \gamma_1) + \frac{\ln 2}{m\beta} - \frac{\xi R}{\beta} \quad .
 \end{aligned}
 \tag{3.92}$$

A energia livre acima deve ser minimizada com relação aos parâmetros λ_1, γ_1, ξ e m . Isso nos dá

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial f}{\partial \lambda_1} &= 0 \Rightarrow q_1 = 1 \quad , \\
 \frac{\partial f}{\partial \gamma_1} &= 0 \Rightarrow Q_1 = 1 \quad , \\
 \frac{\partial f}{\partial \xi} &= 0 \Rightarrow R = 1 \quad , \\
 \frac{\partial f}{\partial m} &= 0 \Rightarrow m = \frac{2\sqrt{\ln 2}}{\beta\sqrt{J^2 + K^2}} \quad .
 \end{aligned}
 \tag{3.93}$$

Substituindo os resultados acima na Eq. (3.92) obtemos uma energia livre independente da temperatura e sempre negativa

$$f = -\sqrt{(J^2 + K^2) \ln 2} \quad . \quad (3.94)$$

A entropia dessa solução é nula. Essa solução corresponde à fase de baixas temperaturas, onde todas as variáveis de spin estão aleatoriamente congeladas, cada uma delas no estado $S = \pm 1$ como no vidro de spins de Ising convencional (spin 1/2).

Podemos tentar outras soluções, por exemplo,

$$\begin{aligned} \lambda_0 = \lambda_1 = q_1 = q_0 = 0 \quad , \\ \gamma_0 = \gamma_1 = \frac{\beta^2 K^2 p}{2} \quad , \\ \xi = \frac{\beta^2 (J^2 + K^2) p}{4} \quad , \\ Q_0 = Q_1 = R = 1 \quad . \end{aligned} \quad (3.95)$$

Com isso a energia livre fica

$$f = -\frac{\beta J^2}{4} - \frac{\ln 2}{\beta} \quad , \quad (3.96)$$

que é a mesma energia livre obtida para a solução Q.

Outra tentativa de solução pode ser

$$\begin{aligned} \lambda_0 = \lambda_1 = q_1 = q_0 = 0 \quad , \\ Q_0 < 1 \quad , \quad \gamma_0 = 0 \quad , \\ Q_1 = 1 \quad , \quad \gamma_1 = \frac{\beta^2 K^2 p}{2} \quad , \\ R < 1 \quad , \quad \xi = 0 \quad . \end{aligned} \quad (3.97)$$

Mas com essa solução a equação $\frac{\partial f}{\partial m} = 0$ não é satisfeita, de forma que essa solução não é possível, assim como outras soluções com $R < 1$.

3.5.2 Diagrama de fases no limite $p \rightarrow \infty$, considerando um passo de quebra de simetria

Obtivemos os diagramas de fases comparando as energias livres dos três tipos de soluções obtidas. As três energias livres, correspondentes às diversas soluções, são dadas por (estamos considerando $k_B = 1$)

1. Solução paramagnética (P) $\rightarrow f_1(T) = -\frac{T}{J} \ln 3$
2. Solução quadrupolar (Q) $\rightarrow f_2(T) = -\frac{J}{4T} - \frac{T}{J} \ln 2$
3. Solução vidro de spins quadrupolar (VSQ) $\rightarrow f_3(T) = -\sqrt{(J^2 + K^2) \ln 2}$

As fases são escolhidas entres as soluções com menor energia, desde qua a solução com menor energia seja fisicamente aceitável. Na figura 3.2 mostramos a comparação entre as energias livres em função da temperatura das três soluções acima para $K/J = 0$ (note que o eixo da temperatura começa em $T/J = 0.6$). Para $T/J < 0.600561 \dots$ a solução quadrupolar tem energia livre menor dentre as três soluções, mas apresenta uma entropia negativa. Desta forma, para esta faixa de temperatura ($0 < T/J < 0.6$) temos a fase vidro de spins quadrupolar, visto que a fase paramagnética possui energia livre maior. Observando ainda a figura 3.2, vemos que a fase quadrupolar tem energia livre menor em uma certa faixa de temperatura ($0.6 < T/J < 0.7852 \dots$) e a fase P é a que tem energia livre menor para $T/J > 0.7852 \dots$. Nas figuras 3.3 e 3.4 mostramos a mesma comparação para $K/J = 0.15$ e $K/J = 0.271$. Como podemos observar, a solução quadrupolar tem energia livre menor em uma certa faixa de temperaturas. A partir de $K/J \approx 0.27$ ela tem sempre energia livre maior que a fase paramagnética, de forma que a solução quadrupolar só existe para valores de K/J entre 0 e 0.27. Esse valor pode ser calculado analiticamente igualando as três energias livres, fornecendo

$$K/J = \frac{(2 \ln 2 - \ln 3)}{2\sqrt{\ln 2 \ln(3/2)}} \quad (3.98)$$

As fronteiras entre as diversas fases podem ser obtidas igualando as energias livres. Na figura 3.5 mostramos o diagrama de fases no plano K/J versus T/J . A linha separando as fases P e Q é dada por

$$T/J = \frac{1}{2\sqrt{\ln(3/2)}} \quad (3.99)$$

A linha entre as fases P e VSQ é dada por

$$T_1 = \frac{\sqrt{(J^2 + K^2) \ln 2}}{\ln 3} \quad (3.100)$$

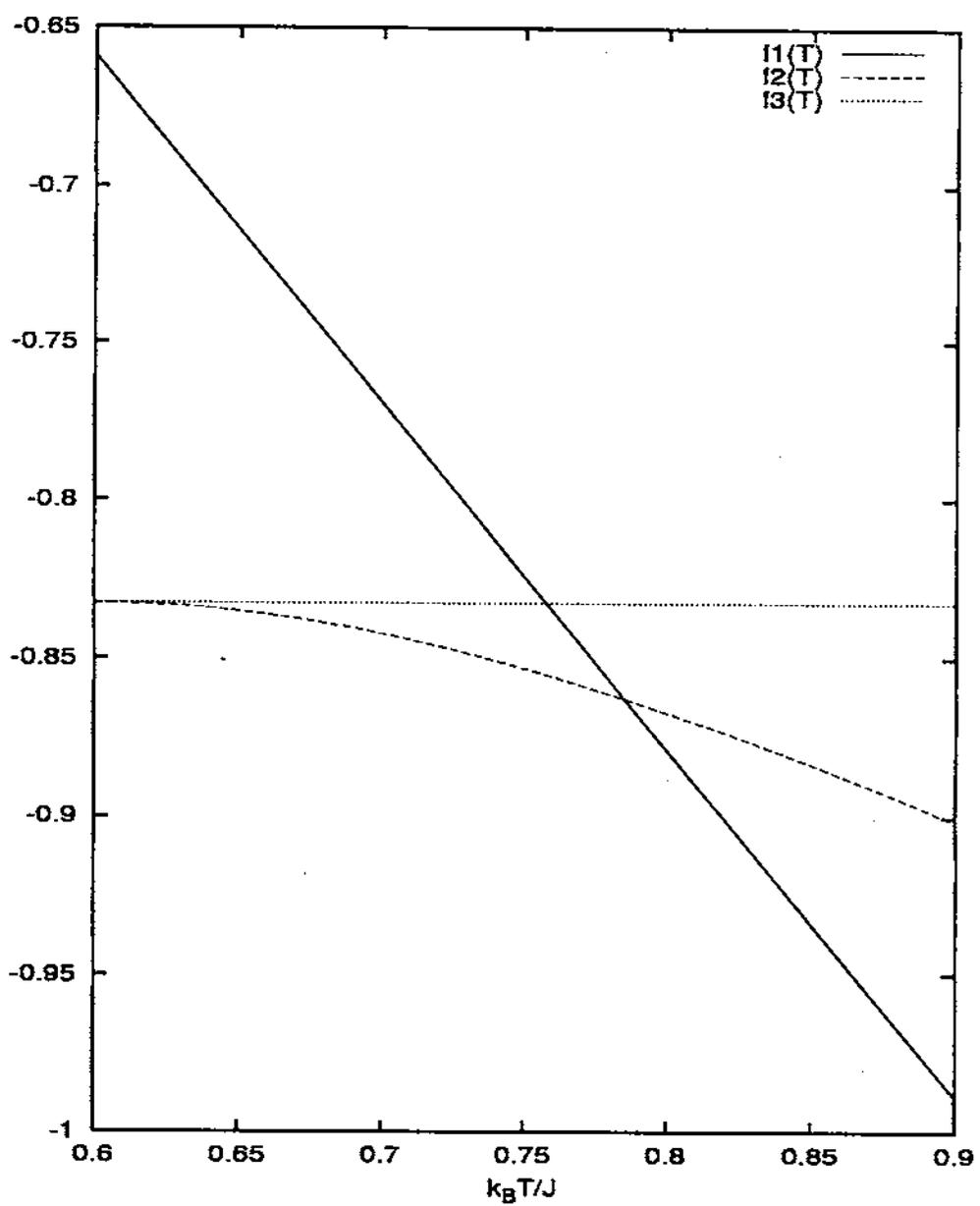


Figura 3.2: Comparação entre as energias livres em função da temperatura, das três soluções: Paramagnética, Quadrupolar e Vidro de Spins Quadrupolar, para $K/J = 0$.

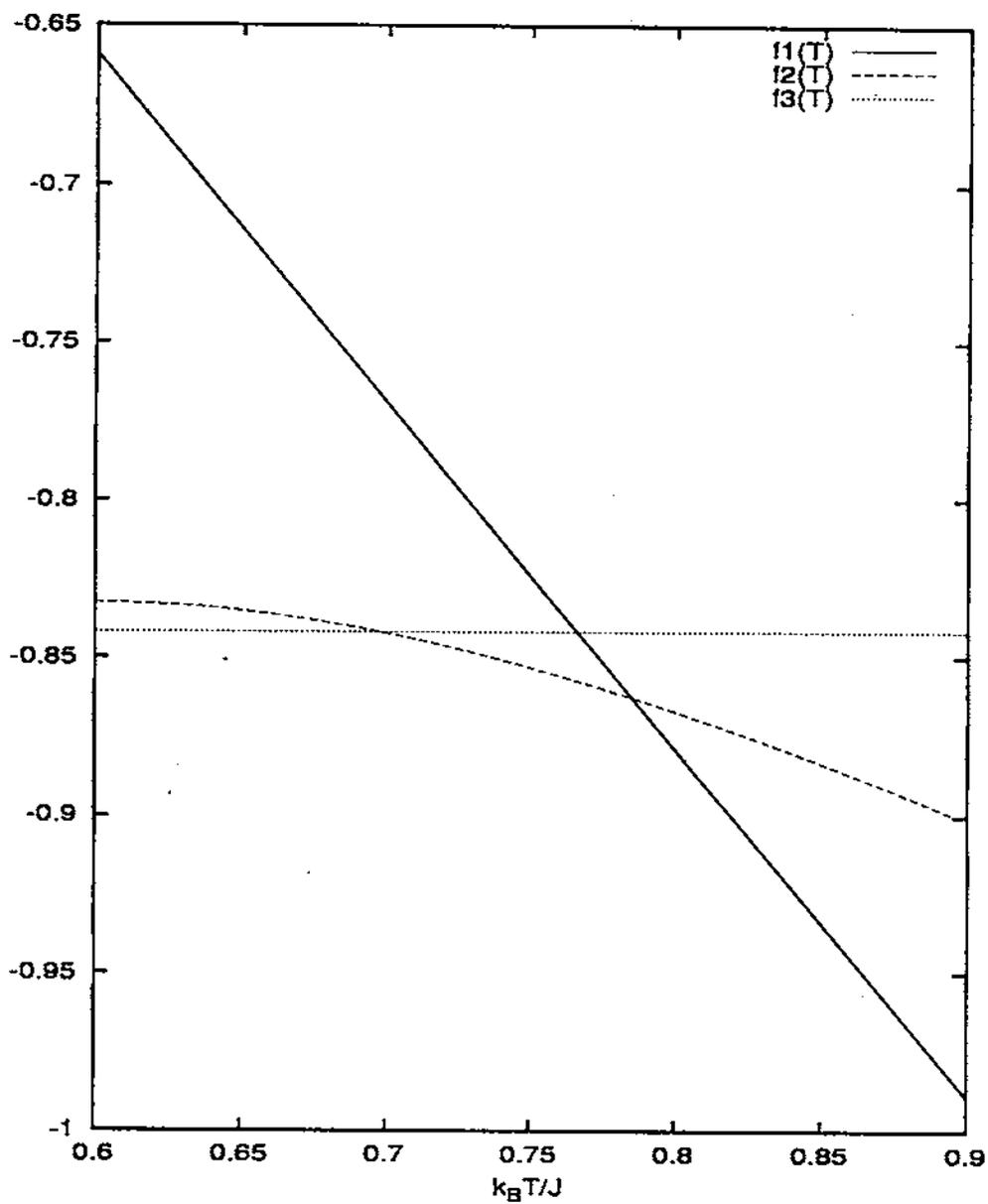


Figura 3.3: Comparação entre as energias livres em função da temperatura, das três soluções: Paramagnética, Quadrupolar e Vidro de Spins Quadrupolar, para $K/J = 0.15$.

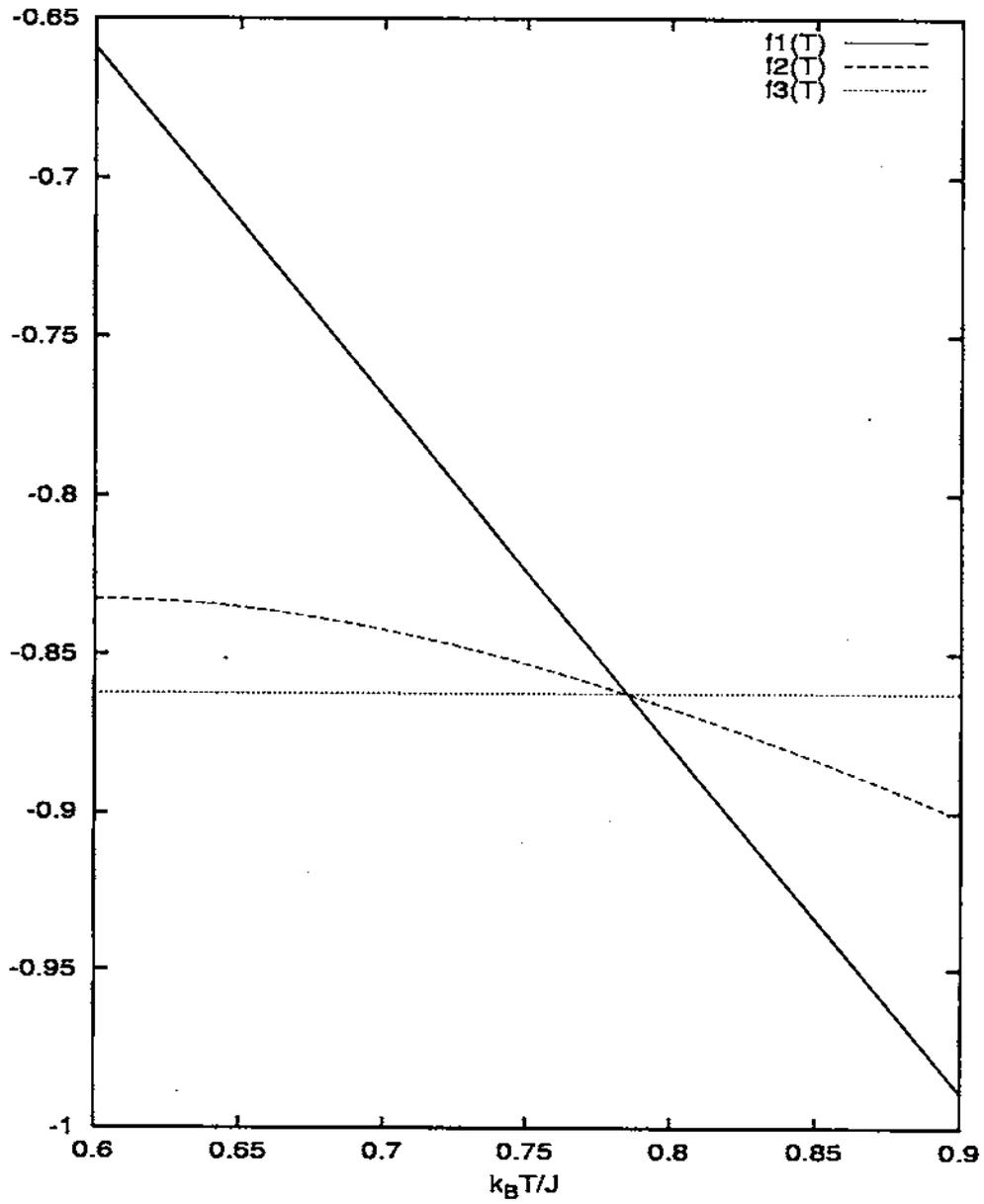


Figura 3.4: Comparação entre as energias livres em função da temperatura, das três soluções: Paramagnética, Quadrupolar e Vidro de Spins Quadrupolar, para $K/J = 0.271$

Igualando as equações das energias livres da soluções quadrupolar e vidro de spins quadrupolar obtemos duas soluções

$$T_2 = \frac{\sqrt{J^2 + K^2} \pm K}{2\sqrt{\ln 2}} \quad (3.101)$$

sendo que tomamos a solução com o sinal +, posto que a outra solução dá uma linha abaixo de $T/J = 0.6$, onde a fase quadrupolar não é mais aceitável fisicamente. Desta forma a fronteira entre as fases Q e VSQ é dada por

$$T_3 = \frac{\sqrt{J^2 + K^2} + K}{2\sqrt{\ln 2}} \quad (3.102)$$

As três fases acima coexistem em um ponto triplo, cujas coordenadas são obtidas igualando as três energias livres, que nos dá

$$T_t/J = \frac{1}{2\sqrt{\ln(3/2)}} = 0.7852\dots \quad , \quad K_t/J = \frac{2\ln 2 - \ln 3}{2\sqrt{\ln 2 \ln(3/2)}} = 0.2713\dots \quad (3.103)$$

Nesse ponto as três linhas se juntam em concordância com a regra de fases de Gibbs¹⁰⁵.

3.6 Conclusões

Resolvemos um modelo para vidros de spins com spin 1 e interações entre p spins utilizando o método das réplicas. O diagrama de fases apresenta o mesmo número de fases do caso $p = 2$ e basicamente os mesmos parâmetros de ordem, porém agora todas as transições são de primeira ordem (uma característica comum nos modelos com interações entre p spins). A solução com simetria entre réplicas fornece apenas duas fases - uma paramagnética e uma quadrupolar -, sendo ambas marginalmente estáveis com relação à análise de estabilidade de Almeida-Thouless. Nessas duas fases o parâmetro vidro de spins é nulo. Porém, a fase quadrupolar apresenta entropia negativa a baixas temperaturas. Para $p \rightarrow \infty$ implementamos um passo de quebra de simetria entre réplicas e determinamos o diagrama de fases correto, incluindo uma fase vidro de spins quadrupolar. Neste caso as três fases se encontram em um ponto triplo. Em outros modelos com

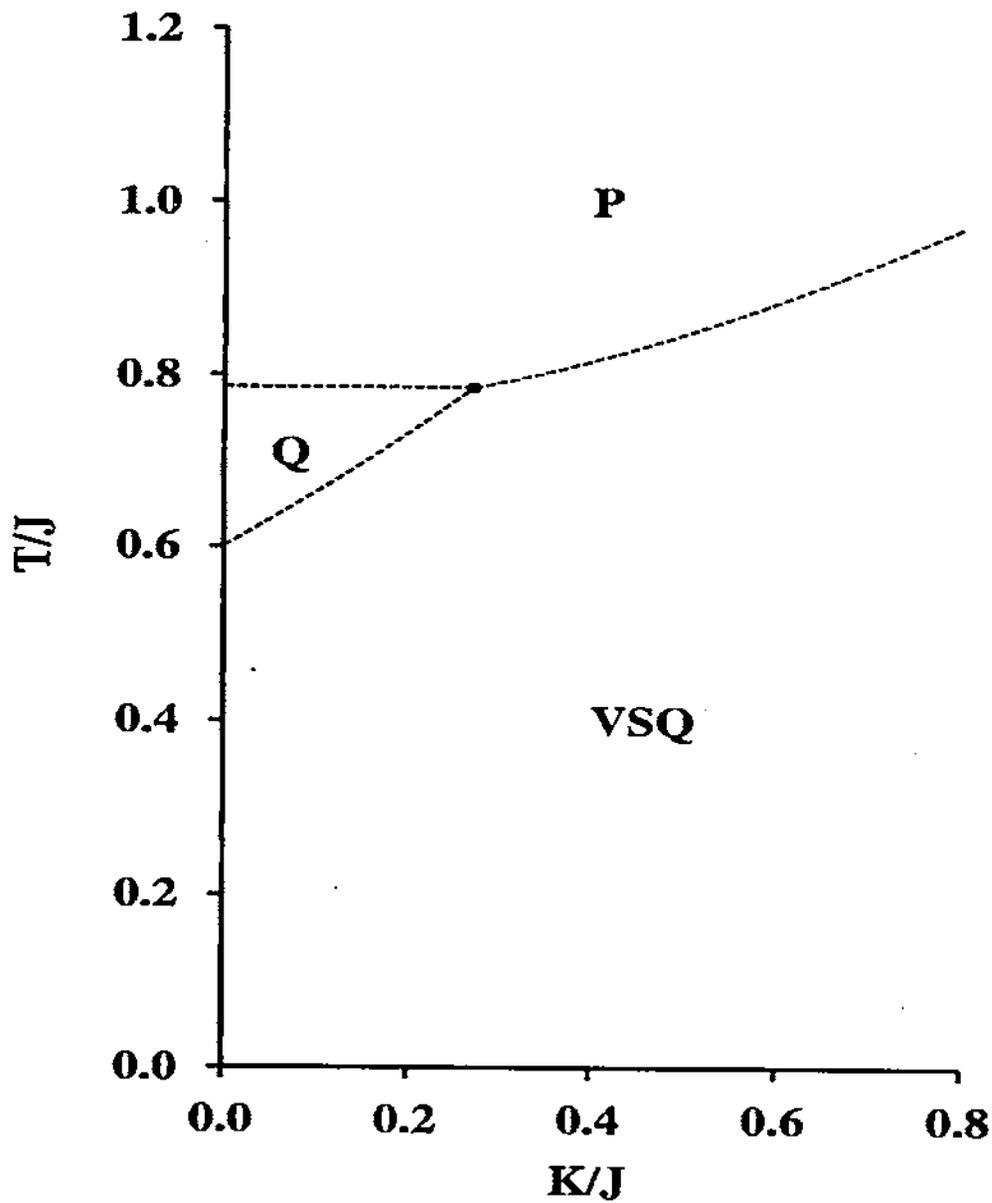


Figura 3.5: Diagrama de fases no limite $p \rightarrow \infty$, considerando um passo de quebra de simetria entre réplicas; todas as linhas são de primeira ordem. No ponto triplo (ponto negro) as três fases coexistem.

interações entre p spins, também apenas um passo de quebra de simetria entre réplicas fornece uma solução fisicamente aceitável. É interessante ressaltar que todos os resultados deste problema foram obtidos analiticamente.

Capítulo 4

O modelo Sherrington-Kirkpatrick na presença de um campo magnético aleatório trimodal

4.1 Introdução

O modelo de Ising com campo aleatório (random-field Ising model – RFIM), introduzido por Imry e Ma⁴⁶, tem suscitado muito interesse desde a identificação de suas realizações físicas. Provavelmente a realização física mais importante do RFIM é um sistema antiferromagnético de Ising diluído na presença de um campo magnético uniforme^{48,49}. Muitos antiferromagnetos diluídos têm sido investigados, de maneira que sistemas como as ligas $\text{Fe}_x\text{Zn}_{1-x}\text{F}_2$ e $\text{Fe}_x\text{Mg}_{1-x}\text{Cl}_2$ são atualmente considerados como realizações experimentais padrões do RFIM^{106,55}. Em teorias de campo médio, é bem conhecido que distribuições de probabilidades diferentes para o campo aleatório levam a diagramas de fases distintos. Por exemplo, a distribuição de probabilidades gaussiana fornece uma linha de transições contínuas entre as fases ferromagnética e paramagnética¹⁰⁷, enquanto para a distribuição de probabilidades bimodal tal borda consiste de uma linha de transições contínuas a altas temperaturas e uma linha de transições de primeira ordem em baixas temperaturas com um ponto tricrítico comum a essas duas linhas¹⁰⁸. Essa diferença nos diagramas de fases do RFIM com distribuições de probabilidades bimodais e gaussianas na teoria de campo médio foi rigorosamente provada por Salinas e Wreszinski¹⁰⁹. De acordo com um argumento de Aharony¹⁰⁸, sempre que uma distribuição de probabilidades $p(h)$ simétrica

apresenta um mínimo em $h = 0$, devemos esperar um ponto tricrítico e uma transição de primeira ordem para temperaturas suficientemente baixas. Estudos posteriores de campo médio para o RFIM, consideraram a distribuição trimodal (uma distribuição com três picos)^{110,111}

$$P(h_i) = p_+ \delta(h_i - h_0) + p_- \delta(h_i + h_0) + p_0 \delta(h_i) \quad (4.1)$$

na forma simétrica, i.e., $p_+ = p_- = \frac{1}{2}(1 - p_0)$. Esperamos que tal distribuição, a qual pode ser interpretada como uma distribuição bimodal onde uma fração p_0 de sítios não estão expostos ao campo magnético¹¹⁰, represente melhor sistemas reais do que a distribuição bimodal. Foi mostrado que a diluição de campos desempenha um importante papel no que concerne à presença de pontos tricríticos: análises distintas levam a estimativas ligeiramente diferentes para o valor acima do qual o ponto tricrítico desaparece (enquanto a análise de Mattis¹¹⁰ mostra que o ponto tricrítico desaparece para $p_0 > 0.25$, a análise de Kaufman et al.¹¹¹ leva a $p_0 > 0.24$). Se as características dos diagramas de fases do RFIM obtidos na aproximação de campo médio permanecem ou não em modelos com interações de curto alcance, representa um ponto que tem recebido muito interesse¹¹²⁻¹¹⁷. Para o RFIM tridimensional, simulações de Monte Carlo recentes detectaram um salto na magnetização mas sem calor latente, para a distribuição bimodal¹¹² e gaussiana¹¹³, enquanto expansões em séries a altas temperaturas¹¹⁴ e análises de escala a temperatura nula¹¹⁵ encontraram uma transição de fases contínua para ambas distribuições. Contudo, em quatro dimensões a mesma análise a temperatura nula¹¹⁵ leva a uma transição de primeira ordem no caso da distribuição bimodal e a uma transição contínua no caso da distribuição gaussiana, em concordância com os resultados de campo médio. Além disso, a fase de baixas temperaturas do RFIM, em dimensões finitas, pode apresentar uma energia livre com uma estrutura não trivial, como foi sugerido por análises perturbativas^{118,119}.

O problema do vidro de spin de Ising (ISG) tornou-se, nos dias atuais, um dos problemas mais controversos em física de magnetos desordenados e tem sido muito estudado. Do ponto de vista teórico esses dois problemas, RFIM e ISG, têm sido estudados de forma separada, mas com algumas exceções¹²⁰⁻¹²⁸. Contudo, muitos antiferromagnetos diluídos, como $\text{Fe}_x\text{Zn}_{1-x}\text{F}_2$ ⁵⁰⁻⁵⁴ e $\text{Fe}_x\text{Mg}_{1-x}\text{Cl}_2$ ¹²⁹⁻¹³¹ exibem, dentro de certos intervalos

de concentrações, comportamento de vidro de spins, campo aleatório ou ambos. Para o $\text{Fe}_x\text{Zn}_{1-x}\text{F}_2$, obtemos o comportamento de RFIM para $x \geq 0.40$ e comportamento de vidro de spins para $x \leq 0.24$, enquanto para concentrações intermediárias ($0.24 \leq x \leq 0.40$) observamos ambos os comportamentos, dependendo da amplitude do campo magnético externo aplicado [RFIM (ISG) para pequenos (elevados) valores de campos magnéticos], com uma região de transição entre eles; esse último efeito foi observado no composto $\text{Fe}_{0.31}\text{Zn}_{0.69}\text{F}_2$ ⁵⁰⁻⁵⁴. Provavelmente, tais propriedades somente poderão ser explicadas se considerarmos modelos que levem em conta os ingredientes de vidros de spins e de campos magnéticos aleatórios juntos. De fato, a mudança de comportamento observada no $\text{Fe}_{0.31}\text{Zn}_{0.69}\text{F}_2$ foi encontrada também no estudo do modelo SK na presença de um campo aleatório gaussiano¹²⁶. Por outro lado, o estudo do modelo SK na presença de um campo aleatório bimodal produziu resultados interessantes, com transições de primeira ordem e pontos tricríticos¹²⁷; tais resultados podem ser relevantes para explicar as transições de primeira ordem observadas no $\text{Fe}_x\text{Mg}_{1-x}\text{Cl}_2$ ⁵⁵.

No presente capítulo vamos estudar o modelo SK na presença de um campo aleatório seguindo a distribuição de probabilidades trimodal (4.1). Assim, podemos interpolar desde a distribuição bimodal até um comportamento que é qualitativamente idêntico ao da distribuição gaussiana, pois monitorando a função delta que está na origem podemos controlar a presença de pontos tricríticos. Na próxima seção definimos o modelo e através do método das réplicas determinamos a energia livre e as equações de estado.

4.2 O modelo e as equações básicas

Consideremos o modelo Sherrington-Kirkpatrick na presença de um campo magnético aleatório definido em termos do hamiltoniano^{126,127,132},

$$\mathcal{H} = - \sum_{(ij)} J_{ij} S_i S_j - \sum_i h_i S_i \quad (4.2)$$

onde $S_i = \pm 1$, $i = 1, 2, \dots, N$ e as interações são de alcance infinito, ou seja, o somatório $\sum_{(i,j)}$ abrange todos os pares distintos de spins. As constantes de acoplamento J_{ij} e os

campos h_i são variáveis aleatórias com as seguintes distribuições de probabilidades

$$P(J_{ij}) = \left(\frac{N}{2\pi J^2}\right)^2 \exp\left[-\frac{N}{2J^2}\left(J_{ij} - \frac{J_0}{N}\right)^2\right] \quad (4.3)$$

e

$$P(h_i) = p_+\delta(h_i - h_0) + p_-\delta(h_i + h_0) + p_0\delta(h_i), \quad (4.4)$$

com $p_+ + p_- + p_0 = 1$. Por enquanto vamos manter a distribuição de probabilidades trimodal na sua forma geral (4.4); veremos depois que a fronteira ferromagnética não existe para $p_+ \neq p_-$, de forma que iremos nos restringir, mais adiante, ao caso $p_+ = p_- = (1 - p_0)/2$. Quando $p_0 = 0$ recuperamos o modelo SK na presença de um campo aleatório bimodal, $p_0 = 1$ reproduz o modelo SK sem campo, de forma que aumentando o valor de p_0 estamos diminuindo a quantidade de sítios que sofrem a influência do campo magnético.

Devemos mencionar que a aleatoriedade do acoplamento bilinear e do campo magnético normalmente estão correlacionadas em sistemas reais; porém, para efeito de simplicidade, vamos considerar duas distribuições de probabilidade independentes. Desta forma, para cada realização de acoplamento e campos $(\{J_{ij}\}, \{h_i\})$, temos uma energia livre $F(\{J_{ij}\}, \{h_i\})$, tal que as médias sobre a desordem, $[\]_{J,h}$, podem ser efetuadas como integrais independentes,

$$[F(\{J_{ij}\}, \{h_i\})]_{J,h} = \int \prod_{(ij)} [dJ_{ij} P(J_{ij})] \prod_i [dh_i P(h_i)] F(\{J_{ij}\}, \{h_i\}) \quad (4.5)$$

O procedimento usual consiste em aplicar o método das réplicas¹² para obter a energia livre por spin,

$$\begin{aligned} -\beta f &= \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} [\ln Z(\{J_{ij}\}, \{h_i\})]_{J,h} \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{Nn} ([Z^n]_{J,h} - 1) \quad , \end{aligned} \quad (4.6)$$

onde $\beta = 1/T$ (iremos trabalhar em unidades de $k_B = 1$). Z^n pode ser visto como a função de partição de n cópias do sistema definido em (4.2). Tomando inicialmente a média sobre os J_{ij} , a energia livre pode ser calculada usando o método do ponto de sela

no limite $N \rightarrow \infty$, o que nos dá

$$\beta f = -\frac{(\beta J)^2}{4} + \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{n} \min g(m_\alpha, q_{\alpha\beta}) \quad , \quad (4.7)$$

com

$$g(m_\alpha, q_{\alpha\beta}) = \frac{(\beta J)^2}{2} \sum_{(\alpha\beta)} q_{\alpha\beta}^2 + \frac{\beta J_0}{2} \sum_{\alpha} m_\alpha^2 - \left[\ln \text{Tr} \exp \left((\beta J)^2 \sum_{(\alpha\beta)} q_{\alpha\beta} S^\alpha S^\beta + \beta J_0 \sum_{\alpha} S^\alpha m_\alpha + \beta \sum_{\alpha} h S^\alpha \right) \right]_h \quad . \quad (4.8)$$

Na Eq. (4.7) devemos extremizar a função $g(m_\alpha, q_{\alpha\beta})$ com relação aos parâmetros $q_{\alpha\beta}$ e m_α . Calculando a média sobre o campo magnético aleatório considerando a distribuição de probabilidades dada pela equação (4.4), obtemos

$$g(m_\alpha, q_{\alpha\beta}) = \frac{(\beta J)^2}{2} \sum_{(\alpha\beta)} q_{\alpha\beta}^2 + \frac{\beta J_0}{2} \sum_{\alpha} m_\alpha^2 - p_+ \ln \text{Tr} \exp(\mathcal{H}_{ef}^+) - p_- \ln \text{Tr} \exp(\mathcal{H}_{ef}^-) - p_0 \ln \text{Tr} \exp(\mathcal{H}_{ef}^0) \quad . \quad (4.9)$$

Os hamiltonianos efetivos são definidos por

$$\mathcal{H}_{ef}^{\pm} = (\beta J)^2 \sum_{(\alpha\beta)} q_{\alpha\beta} S^\alpha S^\beta + \beta J_0 \sum_{\alpha} S^\alpha m_\alpha \pm \beta h_0 \sum_{\alpha} S^\alpha \quad (4.10)$$

e

$$\mathcal{H}_{ef}^0 = (\beta J)^2 \sum_{(\alpha\beta)} q_{\alpha\beta} S^\alpha S^\beta + \beta J_0 \sum_{\alpha} S^\alpha m_\alpha \quad . \quad (4.11)$$

A extremização da função $g(m_\alpha, q_{\alpha\beta})$ nos dá as equações de equilíbrio para a magnetização e o parâmetro vidro de spins, respectivamente,

$$m_\alpha = p_+ \langle S^\alpha \rangle_+ + p_- \langle S^\alpha \rangle_- + p_0 \langle S^\alpha \rangle_0 \quad , \quad (4.12)$$

$$q_{\alpha\beta} = p_+ \langle S^\alpha S^\beta \rangle_+ + p_- \langle S^\alpha S^\beta \rangle_- + p_0 \langle S^\alpha S^\beta \rangle_0 \quad , \quad (4.13)$$

onde $\langle \quad \rangle_{\pm}$ indica a média térmica com respeito aos hamiltonianos efetivos \mathcal{H}_{ef}^{\pm} dados pelas equações (4.10) e (4.11).

Devemos agora determinar as soluções das duas equações acima em termos dos parâmetros T, h_0 e J_0 . Quando $h_0 = 0$, podemos ver de imediato que existe a solução onde

todos m_α e $q_{\alpha\beta}$ são nulos, correspondendo à solução paramagnética. Para determinarmos outras soluções temos que imaginar algumas formas para o parâmetro vidro de spins $q_{\alpha\beta}$ e para magnetização m_α . A mais simples delas é supor que todas as réplicas são idênticas, o que será feito na próxima seção.

4.3 Solução com simetria entre réplicas

A primeira tentativa de resolver as equações (4.12) e (4.13) é usar a hipótese que todas as réplicas são idênticas, conhecida como hipótese de simetria entre réplicas. Ou seja, vamos supor que

$$m_\alpha = m \quad \forall \alpha \quad , \quad q_{\alpha\beta} = q \quad \forall \alpha\beta \quad .$$

Com isso a energia livre por spin (4.7) pode ser escrita como

$$\begin{aligned} \beta f = & -\frac{(\beta J)^2}{4}(1-q)^2 + \frac{\beta J_0}{2}m^2 - p_+ \int \mathcal{D}z \ln(2 \cosh \xi_+) \\ & - p_- \int \mathcal{D}z \ln(2 \cosh \xi_-) - p_0 \int \mathcal{D}z \ln(2 \cosh \xi_0) \quad , \end{aligned} \quad (4.14)$$

onde

$$\int \mathcal{D}z \dots = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dz}{\sqrt{2\pi}} \exp(-z^2/2) \dots \quad , \quad (4.15)$$

$$\xi_{\pm} = \beta J \sqrt{q} z + \beta J_0 m \pm \beta h_0 \quad (4.16)$$

e

$$\xi_0 = \beta J \sqrt{q} z + \beta J_0 m \quad . \quad (4.17)$$

A minimização da equação acima com relação aos parâmetros q e m nos dá

$$m = p_+ \int \mathcal{D}z \operatorname{th} \xi_+ + p_- \int \mathcal{D}z \operatorname{th} \xi_- + p_0 \int \mathcal{D}z \operatorname{th} \xi_0 \quad (4.18)$$

e

$$q = p_+ \int \mathcal{D}z \operatorname{th}^2 \xi_+ + p_- \int \mathcal{D}z \operatorname{th}^2 \xi_- + p_0 \int \mathcal{D}z \operatorname{th}^2 \xi_0 \quad . \quad (4.19)$$

Como dissemos anteriormente, podemos ver da equação (4.18) que o caso $p_+ \neq p_-$ sempre dá uma magnetização diferente de zero; a partir de agora, vamos nos restringir a

$p_+ = p_- = (1 - p_0)/2$. Nesse caso, o campo aleatório induz o parâmetro q , de tal forma que não há ordenamento espontâneo do tipo vidro de spins como no modelo SK. É trivial perceber que se fizermos $p_0 = 0$ iremos obter as mesmas equações para o modelo com campo aleatório bimodal¹²⁷. Se $h_0 \neq 0$, q é sempre diferente de zero.

Apesar do parâmetro de ordem vidro de spins q ser sempre induzido quando o campo aleatório é diferente de zero ($p_0 < 1$), o mesmo pode contribuir para um comportamento não trivial devido à instabilidade da solução com simetria entre réplicas. Tal instabilidade ocorre na linha de Almeida e Thouless (linha AT), que é determinada analisando a estabilidade dessa solução. Como é usual, para determinarmos a linha AT seguimos o procedimento adotado por Almeida e Thouless¹³ e, para isto, precisamos calcular os autovalores da matriz de estabilidade

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial^2 f}{\partial m_\alpha \partial m_\beta} & \frac{\partial^2 f}{\partial m_\alpha \partial q_{\alpha\beta}} \\ \frac{\partial^2 f}{\partial q_{\alpha\beta} \partial m_\alpha} & \frac{\partial^2 f}{\partial q_{\alpha\beta} \partial q_{\nu\gamma}} \end{pmatrix}$$

A condição de estabilidade requer que todos os autovalores da matriz acima sejam positivos. O cálculo dos autovalores da matriz acima é análogo ao cálculo feito para o modelo Sherrington–Kirkpatrick, em que apenas um dos autovalores será negativo em um diagrama de fases T/J versus J_0/J (ou T/J versus h_0/J), o autovalor transversal. A solução com simetria entre réplicas é instável abaixo da linha Almeida–Thouless dada por

$$(T/J)^2 = p_+ \int \mathcal{D}z \operatorname{sech}^4 \xi^+ + p_- \int \mathcal{D}z \operatorname{sech}^4 \xi^- + p_0 \int \mathcal{D}z \operatorname{sech}^4 \xi^0, \quad (4.20)$$

que pode ser obtida resolvendo simultaneamente as Eqs. (4.18), (4.19) e (4.20).

A seguir, estudaremos em detalhes os diagramas de fases para os vários valores de p_0 , bem como as regiões de instabilidade da solução com simetria entre réplicas.

4.4 Diagramas de fases na solução com simetria entre réplicas

Vamos considerar inicialmente o caso $J_0 = 0$; podemos ver, facilmente, que o único comportamento não trivial nesse caso, é dado pela linha AT no plano campo magnético versus temperatura, o qual pode ser obtido da solução das Eqs. (4.20) e (4.19) visto que a magnetização m é um parâmetro irrelevante quando $J_0 = 0$. As integrais envolvendo ξ^- podem ser facilmente transformadas fazendo a mudança de variáveis $z \rightarrow -z$, de tal maneira que as equações para a linha AT e para o parâmetro vidro de spin tornam-se

$$(T/J)^2 = (1 - p_0) \int \mathcal{D}z \operatorname{sech}^4(\beta J \sqrt{q}z + \beta h_0) + p_0 \int \mathcal{D}z \operatorname{sech}^4(\beta J \sqrt{q}z) \quad , \quad (4.21)$$

$$q = (1 - p_0) \int \mathcal{D}z \operatorname{th}^2(\beta J \sqrt{q}z + \beta h_0) + p_0 \int \mathcal{D}z \operatorname{th}^2(\beta J \sqrt{q}z) \quad . \quad (4.22)$$

Deve ser observado que as equações acima são válidas para valores arbitrários dos pesos na distribuição de probabilidades da Eq. (4.4), com $p_+ + p_- = (1 - p_0)/2$; embora a linha AT mude com a diluição do campo, ela não muda com a inversão do campo. As linhas AT no plano campo magnético versus temperatura são exibidas na Figura 4.1, para valores típicos de p_0 . Claramente, a linha AT para a distribuição bimodal ($p_0 = 0$)¹²⁷ é idêntica à do modelo SK na presença de um campo uniforme¹³, devido à propriedade de invariância sob a inversão do campo. Para $0 < p_0 < 1$, podemos calcular analiticamente o comportamento da linha AT no regime de campos baixos ($T \cong J$),

$$1 - \frac{T}{J} \cong \left[\frac{3(1 - p_0)}{4} \right]^{1/3} \left(\frac{h_0}{J} \right)^{2/3} \quad , \quad (4.23)$$

o que leva a uma pequena mudança na amplitude, porém mantendo o mesmo expoente para o campo da linha AT original¹³. Se considerarmos $p_0 \approx 0$, o comportamento da linha AT para baixas temperaturas, também pode ser facilmente calculado,

$$\frac{T}{J} \approx \frac{4}{3} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left[(1 - p_0) \exp \left(-\frac{h_0^2}{2J^2} \right) + p_0 \right] \quad , \quad (4.24)$$

o qual exhibe o decaimento exponencial usual¹³, mas com um deslocamento para a direita quando aumentamos a temperatura e o valor de p_0 . Em todas as outras situações, as

linhas AT foram calculadas resolvendo numericamente as Eqs. (4.21) e (4.22). Notamos que para valores de p_0 próximos a 1, as integrais multiplicando p_0 nas Eqs. (4.21) e (4.22) contribuem significativamente, de tal maneira que as linhas AT ficam independentes de h_0 , para altos valores de campo, como está mostrado na figura 4.1.

Vamos agora nos restringir ao caso $J_0 > 0$. Para determinarmos os diagramas de fases para os vários valores de p_0 , podemos resolver as equações dos parâmetros de ordem (4.18-4.19) numericamente. Conforme mencionamos anteriormente, o caso $p_+ \neq p_-$ produz uma magnetização diferente de zero levando a um comportamento trivial, de forma que iremos estudar o caso $p_+ = p_- = (1 - p_0)/2$. O parâmetro q é sempre induzido pelo campo magnético; assim, analogamente ao RFIM, teremos duas fases possíveis dentro da solução com simetria entre réplicas enquanto não considerarmos a análise de estabilidade de Almeida-Thouless: a fase ferromagnética ($m \neq 0, q \neq 0$) e a fase independente ($m = 0, q \neq 0$). No RFIM, essa última fase é usualmente denominada de fase paramagnética; para o presente problema, dentro da solução com simetria entre réplicas, iremos manter a nomenclatura independente, por razões que irão ficar claras logo adiante.

Podemos também determinar as fronteiras entre as fases acima expandindo as equações dos parâmetros de ordem em torno de $m = 0$ e $q = q_0$, onde q_0 é a solução da Eq. (4.19) com $m = 0$. No Apêndice F, mostramos como esta expansão pode ser feita. A equação da magnetização até quinta ordem fica

$$m = A_1 m + A_3 m^3 + A_5 m^5 + O(m^7) \quad , \quad (4.25)$$

onde os coeficientes A_1, A_3 e A_5 são dados no Apêndice F. As fronteiras críticas foram determinadas analisando os coeficientes acima (veja o Apêndice G)

- As transições contínuas (ou de segunda ordem) são dadas pelas condições $A_1 = 1$ e $A_3 < 0$.
- As transições de primeira ordem ocorrem quando $A_1 = 1$ e $A_3 > 0$; a fronteira crítica, nesse caso, é determinada através de uma construção de Maxwell, ou, igualando as energias livres das duas soluções (veja logo abaixo mais detalhes sobre como obtivemos as linhas de primeira ordem).

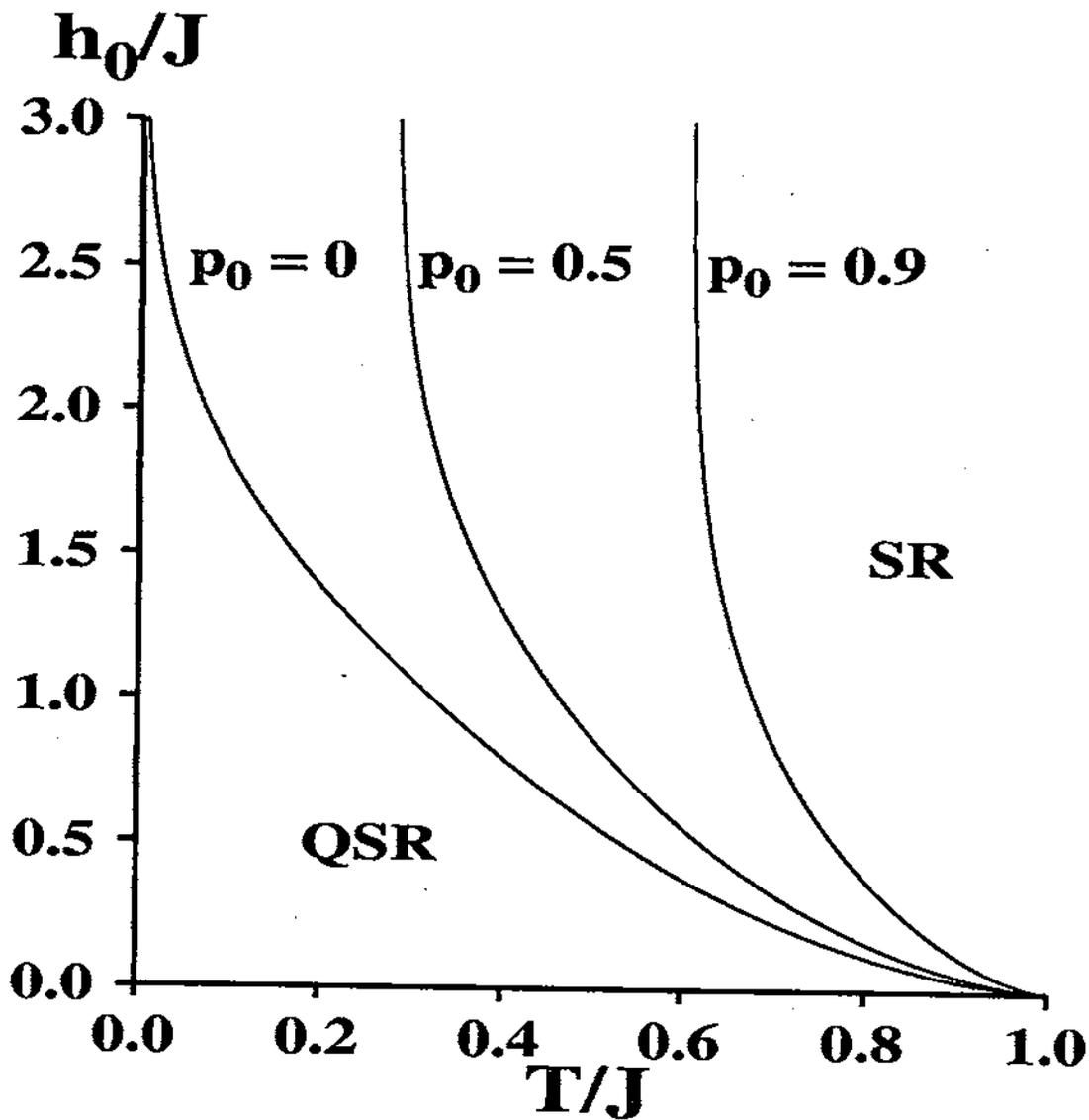


Figura 4.1: Linha AT, para o modelo SK na presença de um campo magnético aleatório trimodal, no plano h_0 versus T (em unidades de J), para valores típicos de p_0 . À direita da linha AT temos uma região com simetria entre réplicas (SR), enquanto que à esquerda da mesma temos quebra de simetria entre réplicas (QSR).

- Quando os dois tipos de transições estão presentes, a fronteira de segunda ordem e a de primeira ordem se juntam em um ponto tricrítico¹³³, o qual define o limite de validade das expansões em série; a partir do ponto tricrítico a magnetização é descontínua. A localização de tal ponto é obtida fazendo $A_1 = A_3 = 0$ com a condição $A_5 < 0$ satisfeita.

As linhas de primeira ordem, para um dado valor de temperatura (T/J), foram obtidas através do seguinte procedimento:

1. Fixamos um valor de J_0/J onde sabemos que a fase ferromagnética existe.
2. Determinamos a solução paramagnética ($m = 0$) das equações (4.18) e (4.19).
3. Calculamos a energia livre dessa solução (f_0).
4. Determinamos a solução ferromagnética ($m \neq 0$) das equações (4.18) e (4.19).
5. Calculamos a energia livre dessa solução (f_1).
6. Comparamos as energias f_0 e f_1 , caso sejam diferentes, diminuímos o valor de J_0/J e voltamos ao item 2; caso sejam iguais, dentro da precisão que desejamos, consideramos que o ponto ($J_0/J, T/J$) está sobre a linha de primeira ordem.

Além das fronteiras acima, determinamos também as linhas AT que delimitam a região de estabilidade da solução com simetria entre réplicas, resolvendo as Eqs. (4.18), (4.19) e (4.20). É importante lembrar que a transição sobre essas linhas tem um caráter diferente de uma transição termodinâmica típica; a transição sobre essas linhas refere-se a uma mudança no tipo de solução, que deixa de ser réplica simétrica e passa a ser do tipo Parisi, sendo associada à fase vidro de spins. Normalmente são utilizados dois critérios para a identificação da fase vidro de spins em modelos com interações de alcance infinito:

(i) dentro da solução com simetria entre réplicas, o parâmetro q pode tornar-se não nulo abaixo de uma certa temperatura, assinalando uma mudança de fase.

(ii) a linha AT normalmente separa o diagrama de fases em regiões onde a solução com simetria entre réplicas é estável e instável. A instabilidade da solução com simetria entre

réplicas é geralmente sanada introduzindo um esquema de quebra de simetria devido a Parisi^{14,16}. É comum associar a fase vidro de spins com a região com quebra de simetria entre réplicas de Parisi.

Normalmente, para sistemas onde o parâmetro q torna-se não nulo na fase vidro de spins a linha AT ocorre junto, como é o caso do modelo SK; nesses casos os dois critérios acima coincidem. No presente problema, o parâmetro q é sempre induzido pelo campo magnético aleatório e adotamos o segundo critério para identificar as fases vidro de spins e ferromagnética mista.

Baseado nas condições acima, determinamos as fronteiras críticas e os pontos tricríticos para vários valores de p_0 e h_0 . Os resultados são mostrados em diagramas de fases de T/J em função de J_0/J . Nas Figuras 4.2–4.4 mostramos três fronteiras ferromagnéticas distintas no presente problema para um valor típico de p_0 ($p_0 = 0.3$), comparadas com as correspondentes ao caso bimodal ($p_0 = 0$). Na Figura 4.2 existe um ponto sobre a fronteira ferromagnética no qual $A_3 = 0$; tal ponto não pode ser considerado tricrítico, pois não existem transições de primeira ordem nesse caso. Contudo, para qualquer valor de h_0 maior que os da Figura 4.2 [$h_0/J = 0.9573$ ($p_0 = 0$) e $h_0/J = 1.53526$ ($p_0 = 0.3$)], obtemos transições de primeira ordem e pelo menos um ponto tricrítico. Na Figura 4.3 mostramos situações onde aparecem dois pontos tricríticos ao longo da fronteira ferromagnética; verificamos que, para um valor fixo de p_0 , tal comportamento ocorre em um pequeno intervalo de h_0 . Na Figura 4.4 apenas um ponto tricrítico aparece, separando uma linha de segunda ordem (região de altas temperaturas) de uma linha de primeira ordem (região de baixas temperaturas). Podemos ver desses diagramas, que o principal efeito da diluição do campo é empurrar os pontos tricríticos para temperaturas mais baixas e diminuir o tamanho das linhas de primeira ordem.

Conforme mencionamos anteriormente, apesar do parâmetro de ordem vidro de spins ser sempre induzido pelo campo aleatório, o mesmo pode exibir um comportamento interessante, associado com a instabilidade da solução com simetria entre réplicas. A instabilidade de Almeida-Thouless, dada pela solução das Eqs. (4.18), (4.19) e (4.20) com $p_+ = p_- = (1 - p_0)/2$, leva a duas linhas distintas nos diagramas de fases das Figuras

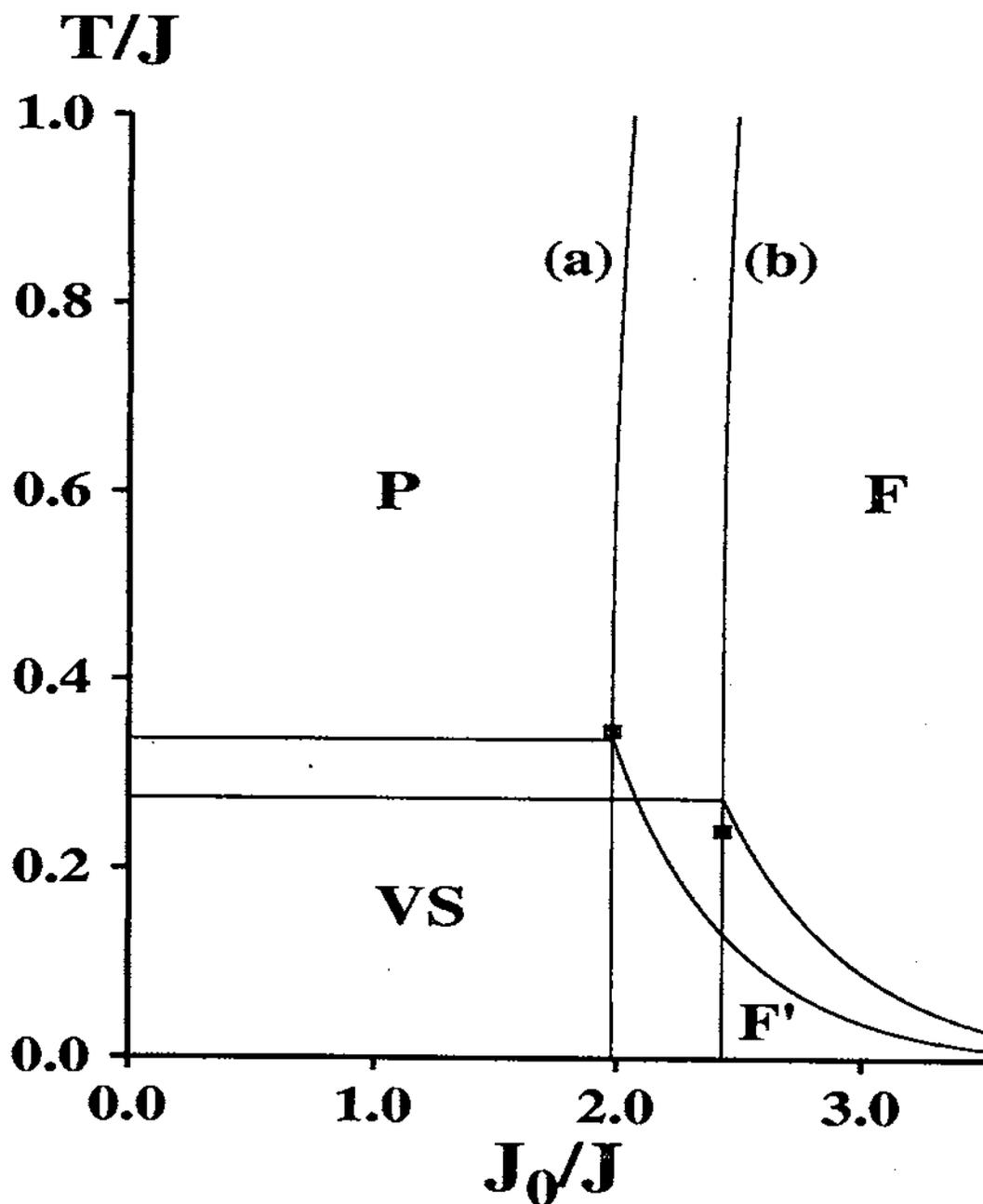


Figura 4.2: Diagrama de fases T versus J_0 (em unidades de J) do modelo SK na presença de um campo aleatório trimodal com $p_0 = 0.3$, comparado com o caso bimodal ($p_0 = 0$), para valores de h_0 escolhidos convenientemente. (a) $h_0/J = 0.9573$ ($p_0 = 0$); (b) $h_0/J = 1.53526$ ($p_0 = 0.3$). As fronteiras ferromagnéticas são contínuas, exceto no ponto onde $A_3 = 0$ representado por um quadrado preto. Esses são os menores valores de h_0 , acima dos quais ocorrem transições de primeira ordem. A nomenclatura das fases está explicada no texto, com as fases de baixas temperaturas VS e F' delimitadas pelas linhas AT.

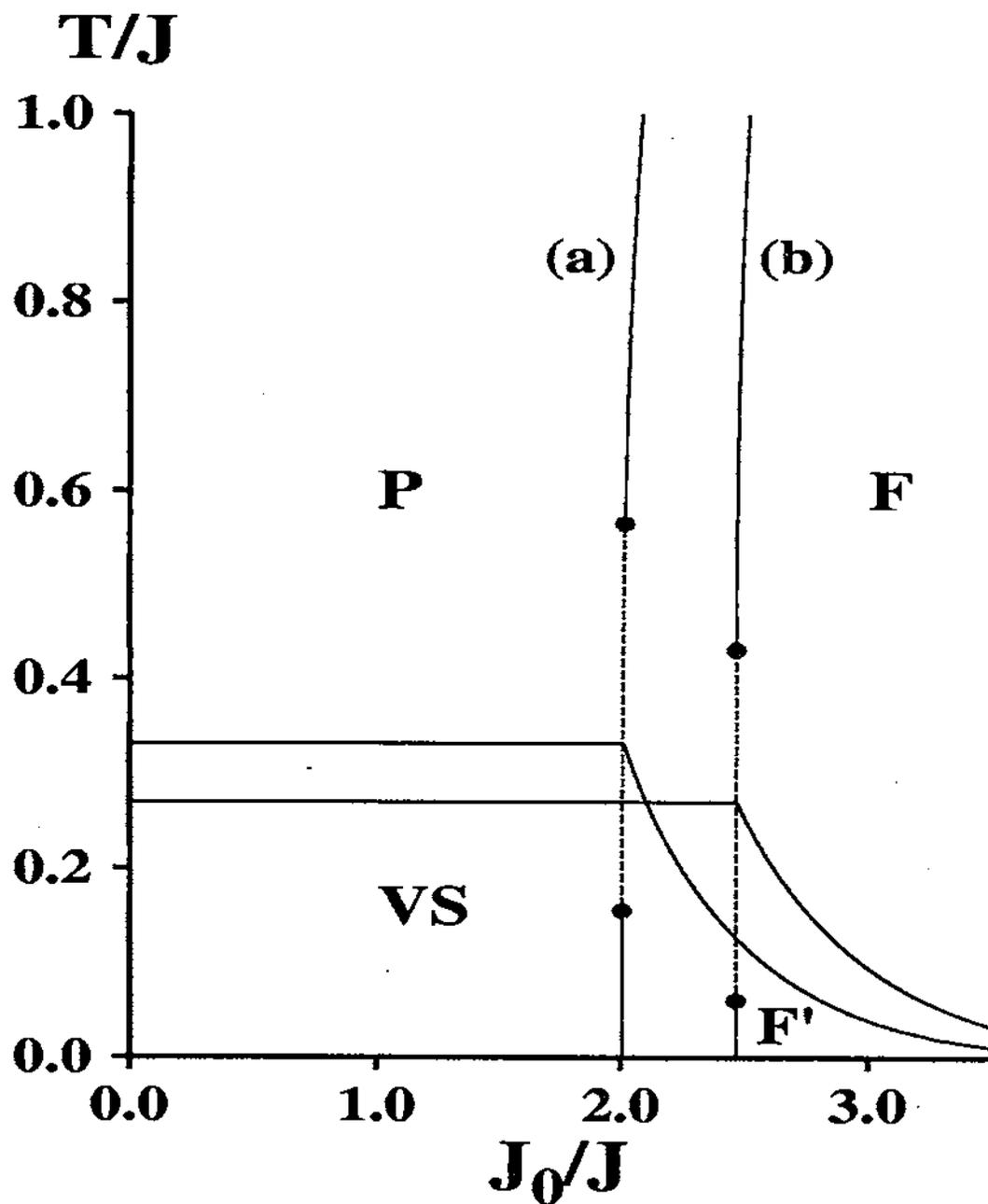


Figura 4.3: Diagrama de fases T versus J_0 (em unidades de J) do modelo SK na presença de um campo aleatório trimodal com $p_0 = 0.3$, comparado com o caso bimodal ($p_0 = 0$), para valores de h_0 escolhidos de tal forma que obtemos dois pontos tricríticos (círculos pretos) ao longo da fronteira ferromagnética. (a) $h_0/J = 0.97$ ($p_0 = 0$); (b) $h_0/J = 1.558$ ($p = 0.3$). As linhas tracejadas representam transições de primeira ordem. A nomenclatura das fases é a mesma da Fig. 4.2.

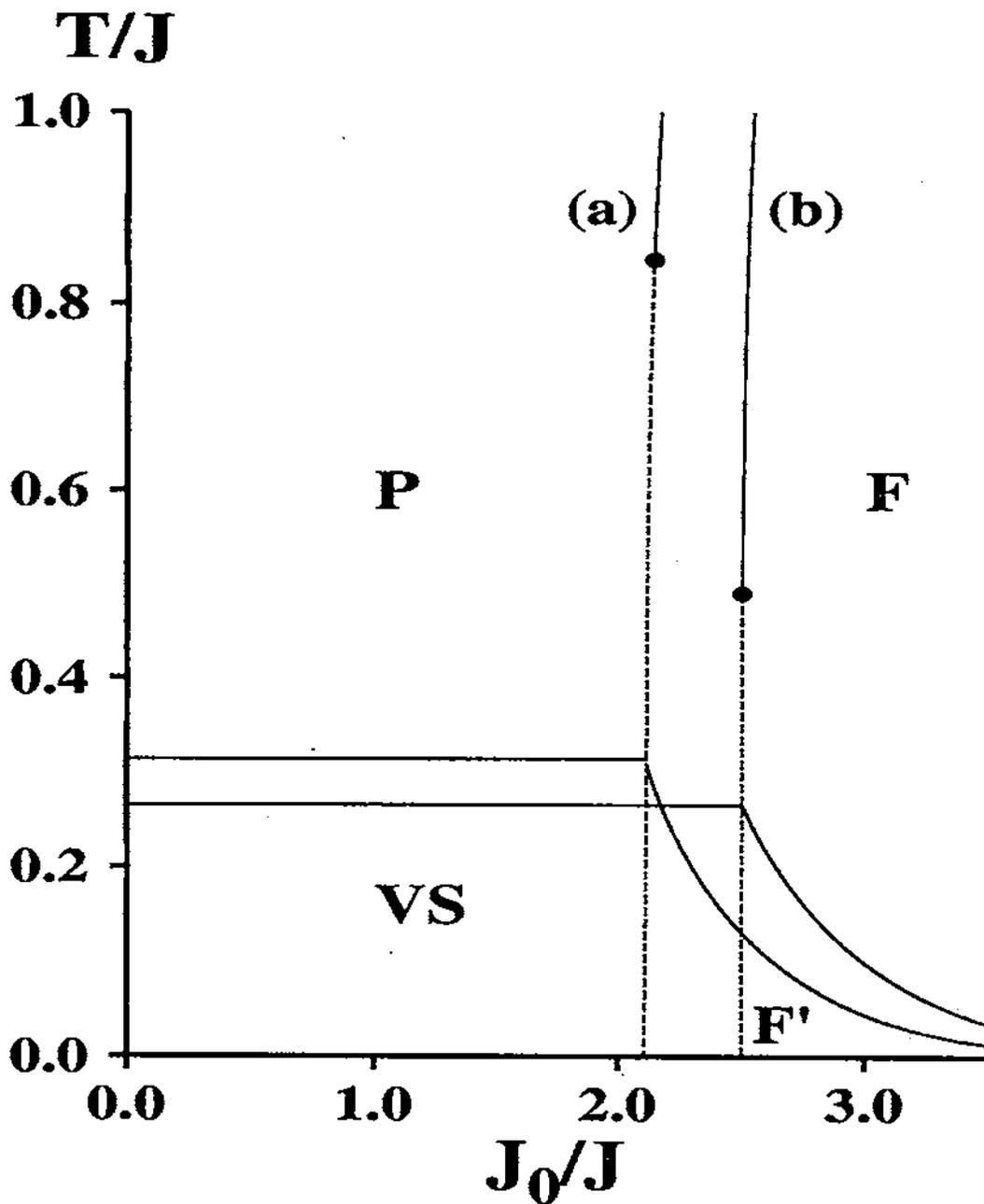


Figura 4.4: Diagrama de fases T versus J_0 (em unidades de J) do modelo SK na presença de um campo aleatório trimodal com $p_0 = 0.3$, comparado com o caso bimodal ($p_0 = 0$), para valores de h_0 escolhidos de tal forma que obtemos um ponto tricrítico (círculo preto) ao longo da fronteira ferromagnética. (a) $h_0/J = 1.02$ ($p_0 = 0$); (b) $h_0/J = 1.58$ ($p = 0.3$). A nomenclatura das fases e as representações das linhas são as mesmas das Figuras 4.2 e 4.3.

4.2-4.4: uma dentro da fase independente ($m = 0$) outra dentro da fase ferromagnética ($m \neq 0$). A primeira, é uma linha reta independente de J_0 pois a magnetização é nula nesse caso e toda a dependência em J_0 desaparece. A segunda apresenta o comportamento usual de decaimento exponencial com a temperatura quando aumentamos o valor de J_0 , de forma que para baixas temperaturas, obtemos

$$\frac{T}{J} \cong \frac{4}{3} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left\{ \frac{1}{2} (1 - p_0) \exp \left[-\frac{(J_0 + h_0)^2}{2J^2} \right] + p_0 \exp \left[-\frac{J_0^2}{2J^2} \right] + \frac{1}{2} (1 - p_0) \exp \left[-\frac{(J_0 - h_0)^2}{2J^2} \right] \right\} \quad (4.26)$$

As duas regiões com magnetização nula serão associadas com as fases paramagnética (altas temperaturas) e vidro de spins (baixas temperaturas), enquanto as outras com magnetização diferente de zero serão associadas com as fases ferromagnética (altas temperaturas) e ferromagnética mista (baixas temperaturas). Em resumo, as diversas fases exibidas nos diagramas de fases são identificadas como:

- Fase paramagnética (P) onde $m = 0$, $q \neq 0$ e a solução com simetria entre réplicas é estável;
- Fase vidro de spins (VS) onde $m = 0$, $q \neq 0$ e a solução com simetria entre réplicas é instável;
- Fase ferromagnética (F) onde $m \neq 0$, $q \neq 0$ e a solução com simetria entre réplicas é estável;
- Fase ferromagnética mista (F') onde $m \neq 0$, $q \neq 0$ e a solução com simetria entre réplicas é instável.

Devemos mencionar que os resultados para baixas temperaturas (dentro das fases F' a VS) são questionáveis devido à instabilidade da solução com simetria entre réplicas; em particular o ponto para $p_0 = 0.3$ onde $A_3 = 0$ na Figura 4.2, bem como os pontos tricríticos de baixas temperaturas nas Figura 4.3 e 4.4 podem desaparecer completamente em um procedimento de quebra de simetria entre réplicas. Contudo, os pontos tricríticos

em altas temperaturas, como os das Figuras 4.3 e 4.4, se encontram na região de estabilidade e devem persistir sob um tratamento mais geral; acreditamos que tais pontos são reminiscentes dos pontos tricríticos do RFIM bimodal.

As duas linhas AT mencionadas acima usualmente se juntam na fronteira ferromagnética de segunda ordem; porém, em transições de primeira ordem isso não ocorre^{127,128,133}: existe uma pequena (mas finita) descontinuidade entre elas nas Figuras 4.3 e 4.4. Devido à região de coexistência de fases; a linha AT1 (AT2) prossegue até o limite direito (esquerdo) da região de coexistência, como consequência as linhas AT1 e AT2 não se encontram na fronteira ferromagnética, como mostra a Fig. 4.5. Uma vez que as linhas AT assinalam uma instabilidade da solução com simetria entre réplicas e não correspondem a uma transição de fases genuína, não há necessidade de usar qualquer tipo de "construção de Maxwell" para esse caso. Na próxima seção vamos analisar o comportamento do sistema em temperatura nula.

4.5 Diagrama de fases para $T = 0$

Para determinarmos o diagrama de fases à temperatura nula, vamos primeiramente determinar as equações dos parâmetros de ordem e da energia livre por spin em $T = 0$. Podemos escrever a equação da magnetização e do parâmetro vidro de spins, respectivamente, como

$$m = p_+ u_1^+ + p_- u_1^- + p_0 u_1^0 \quad , \quad (4.27)$$

$$q = p_+ u_2^+ + p_- u_2^- + p_0 u_2^0 \quad , \quad (4.28)$$

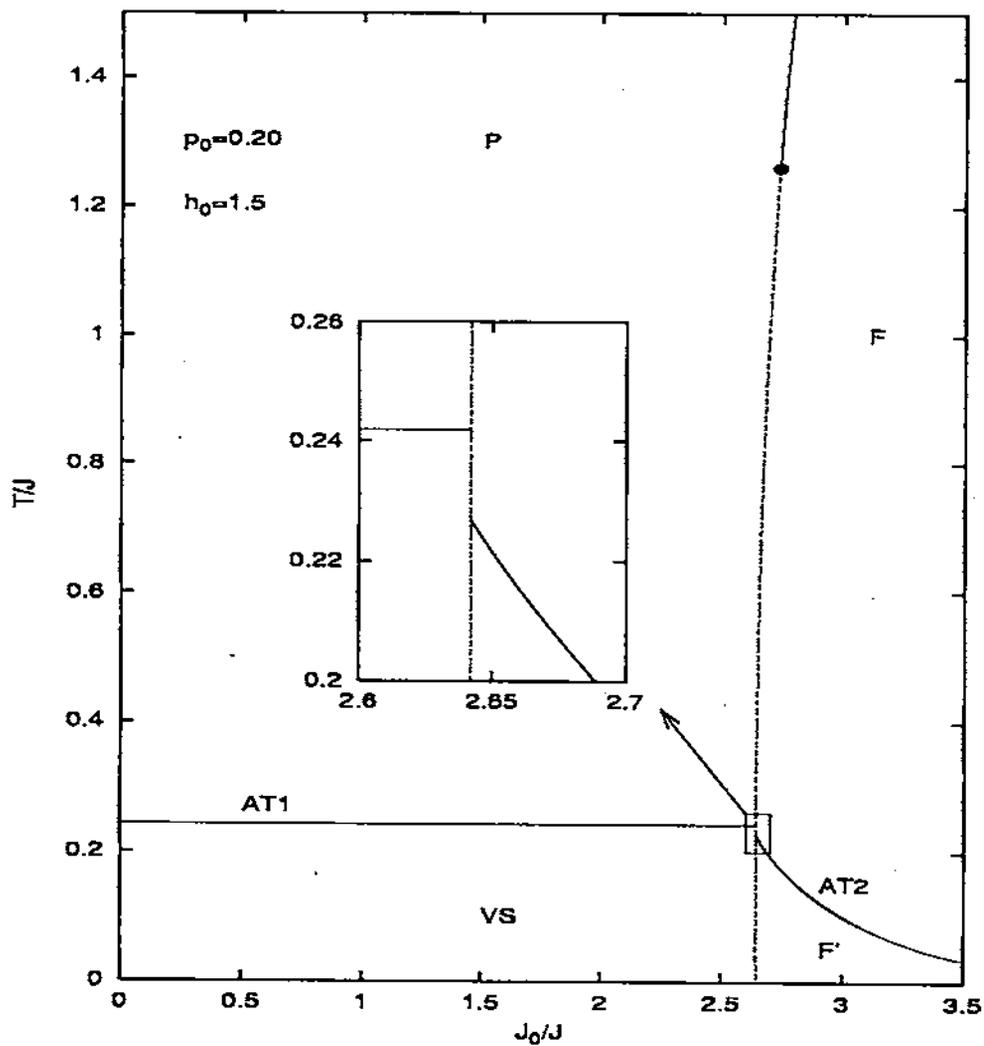
onde

$$u_k^\pm = \int \mathcal{D}z \operatorname{th}^k \xi_\pm \quad (4.29)$$

e

$$u_k^0 = \int \mathcal{D}z \operatorname{th}^k \xi_0 \quad (4.30)$$

com ξ_\pm dados pela equação (4.16) e ξ_0 dado pela equação (4.17).



AT2

Figura 4.5: Diagrama de fases T versus J_0 (em unidades de J) do modelo SK na presença de um campo aleatório trimodal com $p_0 = 0.2$ e $h_0/J = 1.5$, onde mostramos uma ampliação da região onde há a descontinuidade nas linhas AT.

Podemos separar cada integral u_k^\pm em duas. Consideremos primeiro integrais do tipo (com $J = 1$)

$$u_k^+ = \int_{-\infty}^0 \frac{dz}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{z^2}{2}} \text{th}^k \left[\frac{\sqrt{q}}{T} (z - \Delta) \right] + \int_0^{\infty} \frac{dz}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{z^2}{2}} \text{th}^k \left[\frac{\sqrt{q}}{T} (z - \Delta) \right] \quad (4.31)$$

onde

$$\Delta = -\frac{J_0 m + h_0}{\sqrt{q}} \quad (4.32)$$

Quando $T \rightarrow 0$, temos duas possibilidades

$$\text{se } z > \Delta, \lim_{T \rightarrow 0} \text{th} \left[\frac{\sqrt{q}}{T} (z - \Delta) \right] = 1 \quad ,$$

$$\text{se } z < \Delta, \lim_{T \rightarrow 0} \text{th} \left[\frac{\sqrt{q}}{T} (z - \Delta) \right] = -1 \quad .$$

Vemos imediatamente que $u_2^+ = 1$, então o parâmetro q também é igual a 1. A integral u_1^+ fica

$$\lim_{T \rightarrow 0} u_1^+ = - \int_{-\infty}^{\Delta} \frac{dz}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{z^2}{2}} + \int_{\Delta}^{\infty} \frac{dz}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{z^2}{2}} \quad ; \quad (4.33)$$

após algumas manipulações algébricas obtemos

$$u_1^+ = \frac{2}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{\Delta/\sqrt{2}} e^{-t^2} dt = \text{erf} \left(\frac{J_0 m + h_0}{\sqrt{2}} \right) \quad (4.34)$$

O cálculo dos outros tipos de integrais é análogo e nos dá

$$u_1^- = \text{erf} \left(\frac{J_0 m - h_0}{\sqrt{2}} \right) \quad , \quad (4.35)$$

$$u_1^0 = \text{erf} \left(\frac{J_0 m}{\sqrt{2}} \right) \quad . \quad (4.36)$$

Vemos então que o parâmetro q é igual a 1 e a magnetização passa a ser dada por

$$m = \frac{1}{2} (1 - p_0) \left[\text{erf} \left(\frac{J_0 m + h_0}{\sqrt{2}} \right) + \text{erf} \left(\frac{J_0 m - h_0}{\sqrt{2}} \right) \right] + p_0 \text{erf} \left(\frac{J_0 m}{\sqrt{2}} \right) \quad (4.37)$$

A energia livre também é calculada de forma análoga, podendo ser expressa por

$$\begin{aligned}
f &= -\frac{J_0 m^2}{2} - \frac{h_0}{2}(1-p_0) \left[\operatorname{erf} \left(\frac{J_0 m + h_0}{\sqrt{2}} \right) - \operatorname{erf} \left(\frac{J_0 m - h_0}{\sqrt{2}} \right) \right] \\
&- \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left\{ (1-p_0) \left[\exp \left(-\frac{(J_0 m + h_0)^2}{2} \right) + \exp \left(-\frac{(J_0 m - h_0)^2}{2} \right) \right] \right. \\
&\quad \left. + 2p_0 \exp \left(-\frac{(J_0 m)^2}{2} \right) \right\} .
\end{aligned} \tag{4.38}$$

Podemos ver que se $p_0 = 0$ recuperamos as equações para o modelo com campo bimodal.

Em $T = 0$ temos duas fases: a fase vidro de spins (**VS**), onde $m = 0$ e a fase ferromagnética mista (**F'**) onde $m \neq 0$. As fronteiras críticas entre as fases vidro de spins e ferromagnética mista para os vários valores de p_0 são obtidas expandindo a equação da magnetização em torno de $m = 0$. Neste caso a expansão torna-se mais simples, sendo dada por

$$m = a_1 m + a_3 m^3 + a_5 m^5 + O(m^7)$$

onde

$$a_1 = \sqrt{\frac{2}{\pi}} J_0 \left[e^{-h_0^2/2} (1-p_0) + p_0 \right] ,$$

$$a_3 = \frac{1}{6} \sqrt{\frac{2}{\pi}} J_0^3 \left[e^{-h_0^2/2} (1-p_0) (h_0^2 - 1) - p_0 \right]$$

e

$$a_5 = \frac{1}{120} \sqrt{\frac{2}{\pi}} J_0^5 \left[e^{-h_0^2/2} (1-p_0) (3 - 6h_0^2 + h_0^4) - 3p_0 \right] .$$

As fronteiras de segunda ordem e o pontos tricríticos são obtidos analisando os coeficientes a_1 , a_3 e a_5 como fizemos para o caso de temperatura finita. Na Figura 4.6 mostramos as fronteiras entre as fases **VS** e **F'** para valores típicos de p_0 . Notamos que o efeito do peso p_0 é favorecer as transições contínuas, ao longo das quais $a_1 = 1$ e $a_3 < 0$, i.e.,

$$\frac{J_0}{J} = \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{1}{p_0 + (1-p_0) \exp(-h_0^2/2J^2)} , \tag{4.39}$$

enquanto diminui a extensão da linha de primeira ordem. Para valores pequenos de p_0 essas duas linhas se juntam em um ponto tricrítico, obtido resolvendo as equações

$$a_1 = 1 \quad , \quad a_3 = 0 \quad (4.40)$$

com a condição $a_5 < 0$; dentro da análise para temperaturas finitas, isso corresponde a situação onde o ponto tricrítico de baixas temperaturas (cf. Fig. 4.3) colapsa no eixo $T = 0$. Se $p_0 = 0$ tal efeito ocorre quando¹²⁷

$$\frac{h_0}{J} = 1 \quad ; \quad \frac{J_0}{J} = \sqrt{\frac{\pi e}{2}} \approx 2.0664 \quad . \quad (4.41)$$

Verificamos que para $0 < p_0 < p_0^*$ (onde p_0^* está definido abaixo), as equações (4.40) têm duas soluções, sendo que apenas uma delas satisfaz a condição $a_5 < 0$. Aumentando p_0 dentro dessa região, notamos que tais soluções se aproximam uma da outra e colapsam em $p_0 = p_0^*$. Calculamos $p_0^* = 2(e^{3/2} + 2)^{-1} \approx 0.30856$ analiticamente, onde temos um ponto crítico de quarta ordem¹³⁴ (caracterizado por $a_1 = a_3 = a_5 = 0$ e $a_7 < 0$) em

$$\frac{h_0}{J} = \sqrt{3} \approx 1.73207 \quad ; \quad \frac{J_0}{J} = \frac{\sqrt{2\pi}}{6}(e^{3/2} + 2) \approx 2.70786 \quad . \quad (4.42)$$

O valor p_0^* representa um limite de p_0 acima do qual não existem transições de primeira ordem para qualquer temperatura $T \geq 0$. Para $p_0 > p_0^*$ a fronteira crítica de segunda ordem na Figura 4.6 aproxima-se de uma assíntota para valores altos de h_0 ; na verdade, quando $p_0 \rightarrow 1$ a borda ferromagnética aproxima-se de uma linha reta em $J_0/J = \sqrt{\pi/2}$ [veja Eq. (4.39)], característica do modelo SK na ausência de campo¹².

Devemos mencionar que os pontos à temperatura finita onde $A'_3 = 0$, como os da Figura 4.2, são qualitativamente diferentes do ponto crítico de quarta ordem encontrado em $p_0 = p_0^*$ a temperatura nula, apesar das duas situações representarem situações limites para a ocorrência de pontos tricríticos. No primeiro caso, $A_5 < 0$, enquanto no segundo $A_5 = 0$. Na Figura 4.7 mostramos o comportamento dos coeficientes A_3 e A_5 , em função da temperatura e ao longo da fronteira ferromagnética, para o caso (b) da Figura 4.2, isto é, $p_0 = 0.3$ ($h_0/J = 1.53526$), e $p_0 = p_0^*$ ($h_0/J = \sqrt{3}$). Podemos ver claramente que apenas o ponto crítico de quarta ordem tem o coeficiente $A_5 = 0$, correspondendo à situação onde os pontos da Figura 4.2 colapsam no eixo $T = 0$.

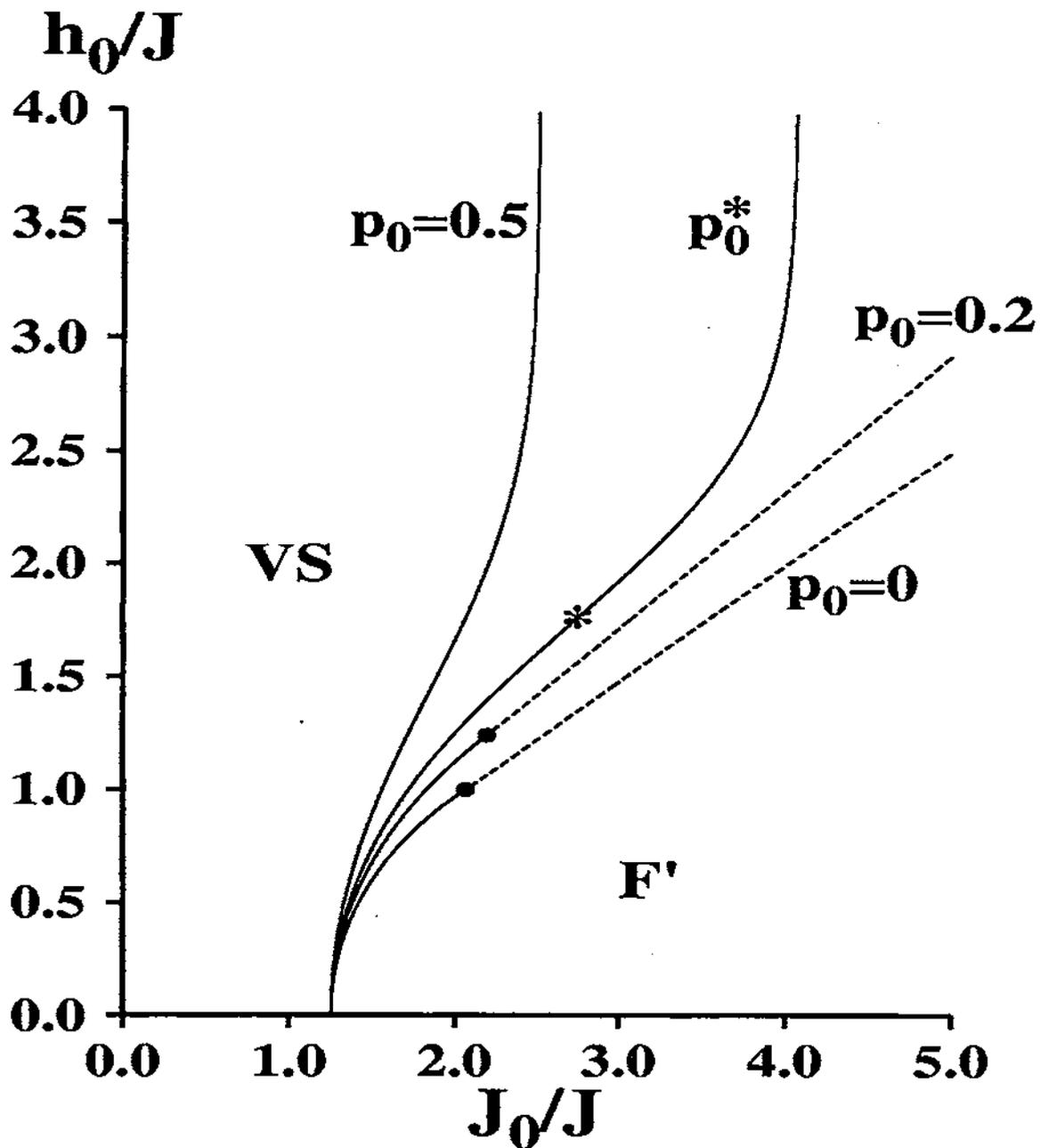


Figura 4.6: Diagrama de fases à temperatura nula h_0 versus J_0 (em unidades de J) do modelo SK na presença de um campo aleatório trimodal para valores típicos de p_0 . Se $0 < p_0 < p_0^*$ sempre temos pontos tricríticos (círculos negros), seguidos por transições de primeira ordem para altos valores de h_0 . Quando $p_0 = p_0^*$, temos um ponto de quarta ordem (estrela). Acima de $p_0 = p_0^* = 2(e^{3/2} + 2)^{-1} \approx 0.30856$, as fronteiras críticas separando as fases VS e F' são contínuas.

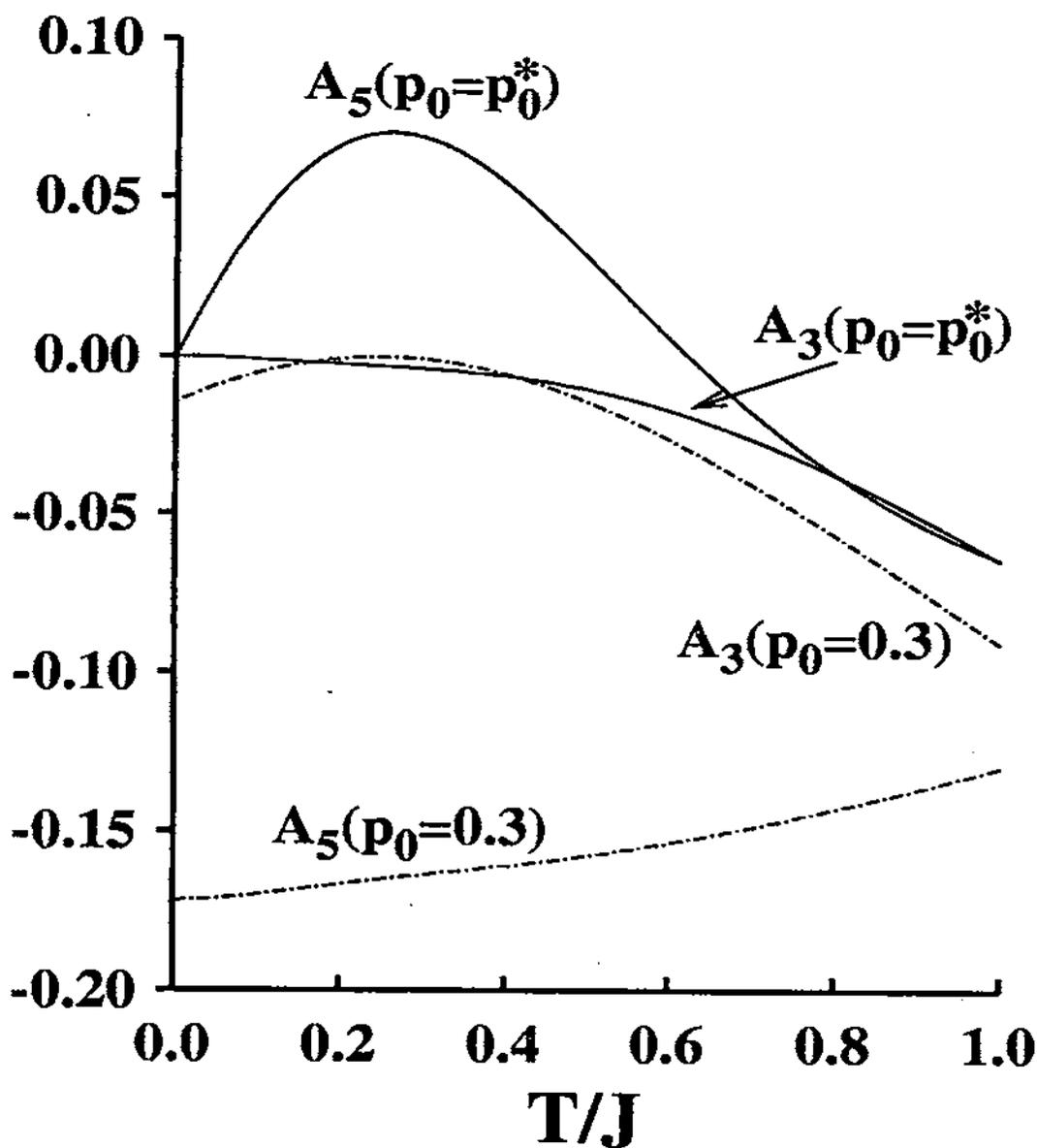


Figura 4.7: As ordenadas representam os coeficientes A_3 ou A_5 ao longo da fronteira ferromagnética, para $p_0 = 0.3$ ($h_0/J = 1.53526$) (linhas tracejadas) e $p_0 = p_0^*$ ($h_0/J = \sqrt{3}$) (linhas contínuas), como função da temperatura. No primeiro caso, $A_3 = 0$ em $T/J \approx 0.25$ (com $A_5 < 0$), enquanto no segundo caso, $A_3 = A_5 = 0$ em $T = 0$.

Se $0 < p_0 < p_0^*$, é sempre possível obter transições de primeira ordem escolhendo convenientemente os valores de h_0 . Na figura 4.8 mostramos os limites de p_0 e h_0/J através dos quais transições de primeira ordem e pontos tricríticos são possíveis ao longo da fronteira ferromagnética. Na região (a), temos transições de primeira ordem a temperatura nula e finita, com um único ponto tricrítico (a temperatura finita): exemplos típicos são mostrados na Figura 4.4. Dentro de uma região estreita [região (b)] aparecem dois pontos tricríticos e uma linha de primeira ordem ocorrendo somente a temperaturas finitas: exemplos típicos são mostrados na Figura 4.3. A região (b) é delimitada por duas linhas representadas por valores característicos de $(p_0, h_0/J)$: (i) a linha inferior corresponde ao conjunto de pontos que satisfazem a condição $A_3 = 0$, mas sem transições de primeira ordem (por exemplo, os pontos mostrados na Figura 4.2); (ii) a linha superior corresponde as coordenadas dos pontos tricríticos a temperatura nula. Na região (c) da Figura 4.8 todas as transições são de segunda ordem.

4.6 Conclusões

Estudamos o modelo Sherrington-Kirkpatrick na presença de um campo magnético aleatório que obedece a uma distribuição de probabilidades trimodal, correspondendo a uma distribuição bimodal mais uma probabilidade p_0 de diluição do campo, i.e., $P(h_i) = p_+ \delta(h_i - h_0) + p_0 \delta(h_i) + p_- \delta(h_i + h_0)$. Usamos o método das réplicas e os diagramas de fases foram obtidos dentro da aproximação de réplicas simétricas. As fronteiras ferromagnéticas exibem um comportamento interessante, com a presença de transições de primeira ordem e pontos tricríticos: dentro de certas faixas de valores de p_0 e h_0 , temos a presença de um ou dois pontos tricríticos. Mostramos que as transições de primeira ordem são diretamente afetadas pela diluição nos campos, de tal maneira que o comprimento de tais linhas são reduzidas quando aumentamos o valor de p_0 . De fato, existe um valor limite, $p_0^* = 2(e^{3/2} + 2)^{-1} \approx 0.30856$, acima do qual a fronteira ferromagnética é sempre de segunda ordem. Tais efeitos podem ser reminiscentes daquelas que ocorrem dentro da teoria de campo médio do modelo de Ising ferromagnético na presença de um campo

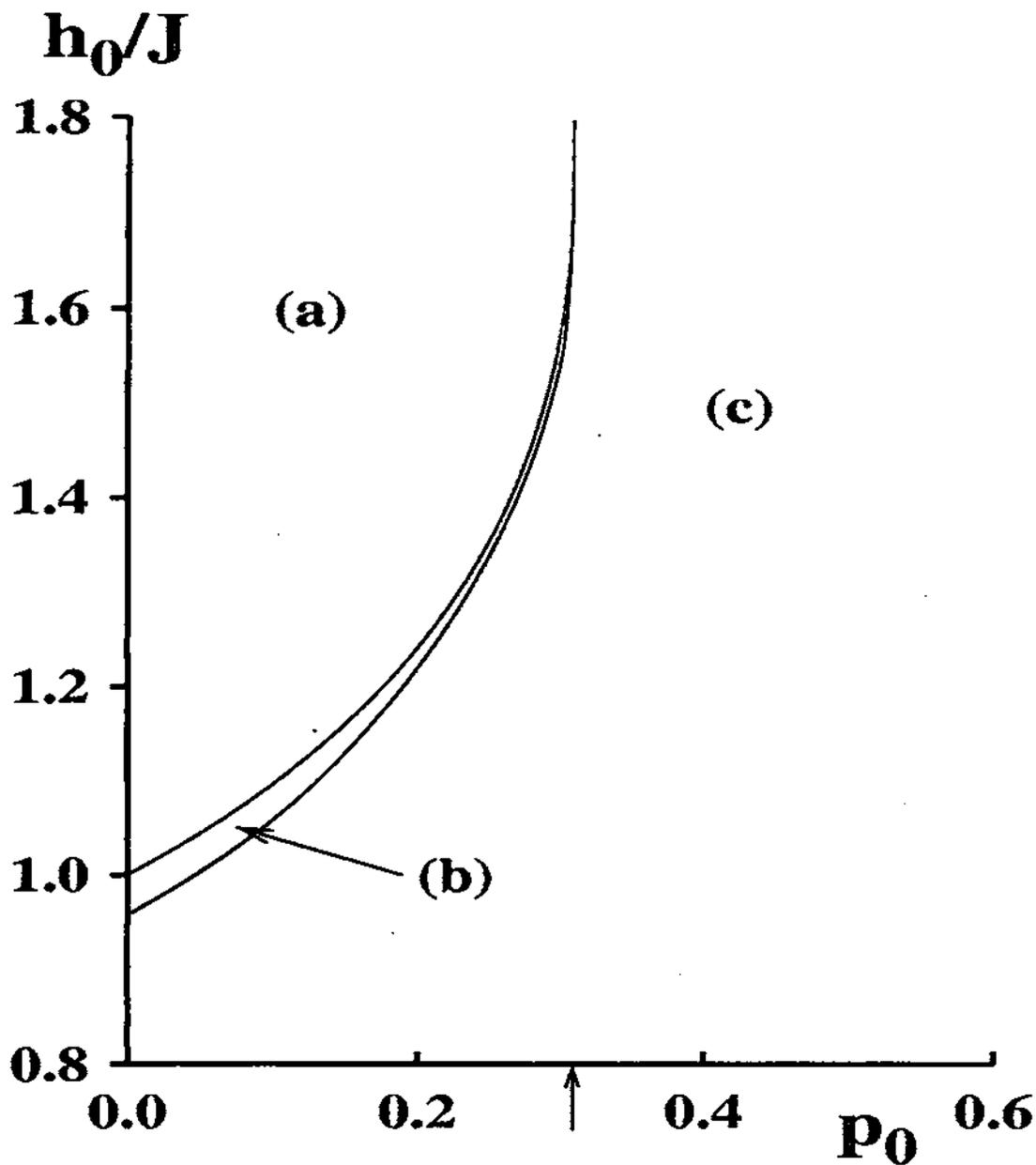


Figura 4.8: Limites de p_0 e h_0/J associados com os comportamentos distintos das fronteiras ferromagnéticas. (a) Transições de primeira ordem a temperatura nula e finita, com um único ponto tricrítico a temperatura finita. (b) Dois pontos tricríticos com uma fronteira de primeira ordem para temperatura finita. (c) Transições de fases contínuas. A seta indica o valor $p_0 = p_0^*$.

aleatório trimodal: o ponto tricrítico simples que aparece no caso de uma distribuição bimodal¹⁰⁸ é removido pela presença da função delta na origem sempre que p_0 torna-se maior que um certo valor^{110,111}.

A temperatura nula, se $0 < p_0 < p_0^*$, a fronteira crítica ferromagnética apresenta um único ponto tricrítico, com uma transição de primeira ordem para valores altos de h_0 . Aumentando p_0 , a linha de primeira ordem torna-se menor e, para $p_0 = p_0^*$, observamos um ponto crítico de quarta ordem; para $p_0 > p_0^*$ a fronteira ferromagnética é sempre de segunda ordem.

Apesar do parâmetro de ordem de vidro de spins ser sempre induzido pelo campo magnético aleatório ($p_0 < 1$), ainda assim o mesmo contribui para um comportamento não trivial, no que concerne à estabilidade da solução com simetria entre réplicas. Calculamos as regiões de instabilidade dessa solução, levando à identificação de duas fases a baixas temperaturas: a fase vidro de spins e a ferromagnética mista. Além disso, mostramos que a linha Almeida-Thouless no plano campo versus temperatura depende de p_0 , com diferentes amplitudes (embora com o mesmo expoente) no regime de campos baixos, sendo qualitativamente distinta no regime de campos altos.

Quando a fronteira ferromagnética apresenta transições de primeira e de segunda ordem com apenas um ponto tricrítico, verificamos que este ponto está localizado na região de estabilidade da solução com simetria entre réplicas, de forma que o mesmo não será removido por qualquer procedimento de quebra de simetria entre réplicas que venha a ser implementado. Ou seja, a solução com simetria entre réplicas prediz corretamente a existência de um ponto tricrítico nesse caso. Contudo, quando temos dois pontos tricríticos ocorrendo ao longo da fronteira ferromagnética, pelo menos um deles (aquele que se encontra a temperaturas mais baixas) aparece quase sempre dentro da região de instabilidade.

A aplicabilidade dos presentes resultados na descrição de sistemas reais dependem, obviamente, da sobrevivência das características da solução de campo médio nas respectivas versões de curto alcance dos modelos de vidros de spins e ferromagnetos na presença de um campo aleatório. Contudo, esperamos que a distribuição trimodal utilizada no presente

trabalho, represente melhor um sistema real do que a distribuição bimodal. Apesar de não conhecermos resultados experimentais para comparar com nossos resultados, acreditamos que o antiferromagneto diluído $\text{Fe}_x\text{Mg}_{1-x}\text{Cl}_2$ é um bom candidato, visto que para valores convenientes de diluição tal sistema pode exibir transições de primeira ordem⁵⁵, bem como uma região com mudança de comportamento de primeira para segunda ordem¹³⁵.

Capítulo 5

Conclusões

Nesta tese estudamos os efeitos de acoplamento biquadrático e de campo aleatório em modelos para vidros de spins, utilizando o método das réplicas. No Capítulo 2 estudamos um modelo com spin 1 onde incluímos interações aleatórias bilineares e biquadráticas, ambas com distribuições gaussianas e média zero. Introduzimos três parâmetros para descrever o sistema no espaço das réplicas: a densidade P_α , que mede a fração de spins no estado $S_\alpha = \pm 1$ e duas matrizes, definidas respectivamente pelos parâmetros vidro de spins ($q_{\alpha\beta}$) e vidro de spins biquadrático ($Q_{\alpha\beta}$). Os diagramas de fases foram determinados no plano T/J versus K/J , onde K é a variância da distribuição do acoplamento biquadrático, J é a variância do acoplamento bilinear e T é a temperatura em unidades de $1/k_B$. A solução com réplicas simétricas apresenta apenas duas fases: a fase paramagnética ($q = 0, P \neq 0, Q \neq 0$) e a fase vidro de spins ($q \neq 0, P \neq 0, Q \neq 0$), separadas por uma linha de transição de segunda ordem. A análise de estabilidade revelou que toda a fase vidro de spins é instável, bem como uma região da fase paramagnética associada com a quebra de simetria entre réplicas na matriz $Q_{\alpha\beta}$. Assim o diagrama de fases apresenta pelo menos três fases: a fase paramagnética (P), a fase vidro de spins biquadrática (VSB) e a fase vidro de spins usual (VS). As fases VSB e VS devem ser descritas pela solução completa de Parisi. Na região onde $K/J \gg 1$ obtivemos um comportamento similar aos modelos de vidros orientacionais^{62,63,56,57} para os quais estão presentes apenas o acoplamento biquadrático.

No Capítulo 3 consideramos os mesmo tipos de interações que no Capítulo 2, com as

interações entre p spins e tomamos o limite $p \rightarrow \infty$. O diagrama de fases apresenta o mesmo número de fases que o caso $p = 2$ e basicamente os mesmos parâmetros de ordem. Neste caso, contudo, todas as transições são de primeira ordem (uma característica comum nos modelos com interações entre p spins). A solução com simetria entre réplicas fornece apenas duas fases [paramagnética (P) e quadrupolar (Q)], sendo ambas marginalmente estáveis com relação à análise de estabilidade de de Almeida-Thouless; nessas duas fases o parâmetro q de vidro de spins é nulo. Porém, a fase Q apresenta entropia negativa a baixas temperaturas. Para esse modelo implementamos um passo de quebra de simetria entre réplicas e determinamos o diagrama de fases correto, incluindo a fase vidro de spins quadrupolar (VSQ); nesse caso as três fases se encontram em um ponto triplo. Em outros modelos com interações entre p spins também apenas um passo de quebra de simetria entre réplicas fornece uma solução fisicamente aceitável. É interessante ressaltar que todos os resultados deste problema foram obtidos analiticamente.

Outro problema que estudamos foi o modelo SK na presença de um campo aleatório com distribuição trimodal [$P(h_i) = p_+\delta(h_i-h_0) + p_0\delta(h_0) + p_-\delta(h_i+h_0)$]. Os diagramas de fases a temperatura finita são equivalentes aos da distribuição bimodal¹²⁷ para valores de p_0 inferiores a um certo p_0^* , apresentando transições de primeira e segunda ordem e pontos tricríticos. Para valores de p_0 superiores a p_0^* as transições de primeira ordem deixam de existir, ou seja, as transições de primeira ordem são afetadas pela diluição do campo. O valor p_0^* pode ser calculado analiticamente através da expansão da magnetização à temperatura nula. Estes resultados podem representar uma contrapartida teórica do que é observado no antiferromagneto diluído $\text{Fe}_x\text{Mg}_{1-x}\text{Cl}_2$, visto que para valores convenientes de diluição, este composto pode exibir transições de primeira e segunda ordem.

Como algumas possíveis extensões deste trabalho podemos citar: No modelo tratado no Capítulo 2, onde estudamos um modelo com spin 1 e incluímos interações aleatórias bilineares e biquadráticas, ambas com distribuições gaussianas e média zero, podemos implementar um passo de quebra de simetria entre réplicas a fim de verificar se ocorrem mudanças significativas nas linhas AT separando as fases P-VSQ e VSQ-VS. No Capítulo 3, onde as interações ocorrem entre p spins no limite $p \rightarrow \infty$, a extensão natu-

ral é estudar o caso onde p é finito e verificar a forma do diagrama de fases e quando ocorre a mudança na natureza das transições de fases, que é de segunda ordem quando $p = 2$ e de primeira ordem no limite $p \rightarrow \infty$. Para o problema tratado no Capítulo 4, o modelo SK na presença de um campo aleatório com distribuição trimodal $[P(h_i) = p_+\delta(h_i - h_0) + p_0\delta(h_0) + p_-\delta(h_i + h_0)]$, podemos utilizar essa mesma distribuição (ou a distribuição bimodal) para outros modelos de vidros de spins, onde ocorrem transições de segunda ordem apenas, e verificar a existência, também, de pontos tricríticos e transições de primeira ordem introduzidos pela aleatoriedade do campo. No presente momento, gostaríamos de acrescentar que as duas primeiras extensões acima estão em andamento.

Apêndice A

Cálculo da energia livre por spin na solução com réplicas simétricas para o modelo de vidro de spins com interação quadrupolar aleatória

Adotando a hipótese das réplicas simétricas, a energia livre por spin e o hamiltoniano efetivo (2.17) são dados respectivamente por

$$\beta f = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{n} \left\{ \frac{q^2(\beta J)^2 n(n-1)}{2} + \frac{Q^2(\beta K)^2 n(n-1)}{2} + \frac{(\beta J)^2}{4} p^2 n + \frac{(\beta K)^2}{4} P^2 n - \ln[\text{Tr exp}(\mathcal{H}_{eff})] \right\} \quad (\text{A.1})$$

e

$$\mathcal{H}_{eff} = (\beta J)^2 q \sum_{(\alpha\beta)} S^\alpha S^\beta + (\beta K)^2 Q \sum_{(\alpha\beta)} (S^\alpha)^2 (S^\beta)^2 + \frac{(\beta J)^2}{2} p \sum_{\alpha} (S^\alpha)^2 + \frac{(\beta K)^2}{2} P \sum_{\alpha} (S^\alpha)^4 \quad (\text{A.2})$$

Considerando $J = 1$, $k_B = 1$ e tomando o limite nos termos fora do logaritmo da energia livre temos,

$$f = \frac{p^2 - q^2}{4T} + \frac{P^2 - Q^2}{4T} K^2 - T \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{n} \ln[Z_n] \quad , \quad (\text{A.3})$$

onde

$$Z_n = \text{Tr exp}(\mathcal{H}_{eff}) \quad (\text{A.4})$$

e

$$\mathcal{H}_{eff} = \frac{q}{T^2} \sum_{(\alpha\beta)} S^\alpha S^\beta + \frac{K^2}{T^2} Q \sum_{(\alpha\beta)} (S^\alpha)^2 (S^\beta)^2 + \frac{p}{2T^2} \sum_{\alpha} (S^\alpha)^2 + \frac{K^2}{2T^2} P \sum_{\alpha} (S^\alpha)^4 \quad (\text{A.5})$$

Para desacoplar os somatórios em $(\alpha\beta)$ reescrevemos, como

$$\sum_{(\alpha\beta)} S^\alpha S^\beta = \frac{1}{2} \left(\sum_{\alpha} S^\alpha \right)^2 - \frac{1}{2} \sum_{\alpha} (S^\alpha)^2 \quad , \quad (\text{A.6})$$

$$\sum_{(\alpha\beta)} (S^\alpha)^2 (S^\beta)^2 = \frac{1}{2} \left(\sum_{\alpha} (S^\alpha)^2 \right)^2 - \frac{1}{2} \sum_{\alpha} (S^\alpha)^4 \quad (\text{A.7})$$

e utilizamos a identidade gaussiana para escrever

$$\exp \left[\frac{q}{2T^2} \left(\sum_{\alpha} S^\alpha \right)^2 \right] = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{\sqrt{2\pi}} \exp \left[-\frac{1}{2} x^2 + x \frac{\sqrt{q}}{T} \sum_{\alpha} S^\alpha \right] \quad , \quad (\text{A.8})$$

$$\exp \left[\frac{K^2 Q}{2T^2} \left(\sum_{\alpha} (S^\alpha)^2 \right)^2 \right] = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dy}{\sqrt{2\pi}} \exp \left[-\frac{1}{2} y^2 + y \frac{K\sqrt{Q}}{T} \sum_{\alpha} (S^\alpha)^2 \right] \quad . \quad (\text{A.9})$$

Então

$$Z_n = \text{Tr} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx dy}{2\pi} \exp \left\{ -\frac{x^2 + y^2}{2} + \sum_{\alpha} \left[\frac{x\sqrt{q}}{T} S^\alpha + \frac{p-q}{2T^2} (S^\alpha)^2 + \frac{yK\sqrt{Q}}{T} (S^\alpha)^2 + \frac{(P-Q)K^2}{2T^2} (S^\alpha)^4 \right] \right\} \quad . \quad (\text{A.10})$$

O traço envolve termos desacoplados com relação às réplicas, análogo a um sistema de n spins não interagentes. Assim

$$Z_n = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx dy}{2\pi} \exp \left[-\frac{x^2 + y^2}{2} \right] \prod_{S^\alpha} \text{Tr} \exp \left[\frac{x\sqrt{q}}{T} S^\alpha + \frac{p-q}{2T^2} (S^\alpha)^2 + \frac{yK\sqrt{Q}}{T} (S^\alpha)^2 + \frac{(P-Q)K^2}{2T^2} (S^\alpha)^4 \right] \quad , \quad (\text{A.11})$$

ou

$$Z_n = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx dy}{2\pi} \exp \left[-\frac{x^2 + y^2}{2} \right] (A)^n \quad , \quad (\text{A.12})$$

onde

$$A = e^{\frac{-z\sqrt{q}}{T}+B} + 1 + e^{\frac{z\sqrt{q}}{T}+B} = 1 + 2e^B \cosh\left(\frac{\sqrt{q}}{T}x\right) \quad (\text{A.13})$$

e

$$B = \frac{p-q}{2T^2} + \frac{K\sqrt{Q}}{T}y + \frac{P-Q}{2T^2}K^2 \quad (\text{A.14})$$

Podemos reescrever a equação (A.12) como

$$Z_n = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx dy}{2\pi} \exp\left[-\frac{x^2 + y^2}{2}\right] \exp[n \ln A] \quad (\text{A.15})$$

e no limite $n \rightarrow 0$

$$Z_n = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx dy}{2\pi} \exp\left[-\frac{x^2 + y^2}{2}\right] (1 + n \ln A + O(n^2)) \quad (\text{A.16})$$

A energia livre (A.3) resulta em

$$f = \frac{p^2 - q^2}{4T} + \frac{P^2 - Q^2}{4T}K^2 - T \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{n} \ln \left[1 + n \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx dy}{2\pi} \exp\left[-\frac{x^2 + y^2}{2}\right] \ln A \right] \quad (\text{A.17})$$

utilizando usando o fato que $\ln(1+x) \approx x$, para $x \ll 1$, temos

$$f = \frac{p^2 - q^2}{4T} + \frac{P^2 - Q^2}{4T}K^2 - T \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx dy}{2\pi} \exp\left[-\frac{x^2 + y^2}{2}\right] \ln A \quad (\text{A.18})$$

Apêndice B

Cálculos assintóticos para valores grandes de K na solução paramagnética

Basicamente temos que calcular integrais em x da função

$$\varphi_2(x) = \frac{1}{1 + \frac{1}{2} \exp \left[- \left(\frac{p}{2T^2} + \frac{(p-Q)K^2}{2T^2} + \frac{K\sqrt{Q}x}{T} \right) \right]} , \quad (\text{B.1})$$

quando K for muito maior do que T .

Sabemos que $p > Q > 0$, $K > 0$ e $T > 0$. Definindo

$$x^* = \frac{p}{2KT\sqrt{Q}} + \frac{(p-Q)K}{2T\sqrt{q}} , \quad (\text{B.2})$$

podemos escrever

$$\varphi_2(x) = \frac{1}{1 + \frac{1}{2} \exp \left[- \frac{K\sqrt{Q}}{T} (x + x^*) \right]} . \quad (\text{B.3})$$

É fácil ver que $x^* > 0$ (veremos adiante que x^* é finito quando $K \rightarrow \infty$).

Comportamento de p na solução paramagnética quando $K \rightarrow \infty$

A equação de p pode ser escrita como

$$p = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{x^2}{2}} \varphi_2(x) . \quad (\text{B.4})$$

Fazendo a transformação

$$x' = x + x^* \quad , \quad (\text{B.5})$$

a equação de p fica

$$p = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{\sqrt{2\pi}} \frac{\exp(-(x - x^*)^2/2)}{1 + \frac{1}{2} \exp\left(-\frac{K\sqrt{Q}x}{T}\right)} \quad . \quad (\text{B.6})$$

Vamos usar a aproximação de Sommerfeld para aproximar a integral acima no limite $K \rightarrow \infty$. Partimos da identidade

$$d(u(x)v(x)) = u(x)v'(x)dx + v(x)u'(x)dx \quad , \quad (\text{B.7})$$

ou

$$\int u'(x)v(x)dx = u(x)v(x)| - \int u(x)v'(x)dx \quad . \quad (\text{B.8})$$

Tomando

$$u(x) = \int_{-\infty}^x \frac{dx'}{\sqrt{2\pi}} \exp(-(x' - x^*)^2/2) \quad (\text{B.9})$$

e

$$v(x) = \frac{1}{1 + \frac{1}{2} \exp\left(-\frac{K\sqrt{Q}x}{T}\right)} \quad , \quad (\text{B.10})$$

vemos que

$$p = u(x)v(x)|_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} u(x)v'(x)dx \quad . \quad (\text{B.11})$$

Observando que

$$u(\infty) = 0 \quad , \quad v(\infty) = 1$$

$$u(-\infty) = -1 \quad , \quad v(-\infty) = 0$$

e

$$v'(x) = \frac{K\sqrt{Q}}{2T} \frac{\exp\left(-\frac{K\sqrt{Q}x}{T}\right)}{\left[1 + \frac{1}{2} \exp\left(-\frac{K\sqrt{Q}x}{T}\right)\right]^2} \quad ,$$

a equação (B.6) pode ser escrita como

$$p = -\frac{K\sqrt{Q}}{2T} \int_{-\infty}^{\infty} dx \left[\int_{-\infty}^x \frac{dx'}{\sqrt{2\pi}} \exp(-(x' - x^*)^2/2) \right] \frac{\exp\left(-\frac{K\sqrt{Q}x}{T}\right)}{\left[1 + \frac{1}{2} \exp\left(-\frac{K\sqrt{Q}x}{T}\right)\right]^2} \quad . \quad (\text{B.12})$$

Efetuada uma expansão de $u(x)$ em torno de $x = 0$, ficamos com

$$u(x) \approx \int_{-\infty}^0 \frac{dx'}{\sqrt{2\pi}} \exp(-(x' - x^*)^2/2) + \frac{\exp(-x^{*2}/2)}{\sqrt{2\pi}} x + O(x^2) \quad (\text{B.13})$$

ou

$$u(x) \approx -\frac{1}{2} \left[1 + \operatorname{erf}\left(\frac{x^*}{\sqrt{2\pi}}\right) \right] + \frac{\exp(-x^{*2}/2)}{\sqrt{2\pi}} x + O(x^2) \quad (\text{B.14})$$

Com esta aproximação, as integrais a calcular ficam triviais, sendo dadas por

$$I_0 = \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{\exp\left(-\frac{K\sqrt{Q}x}{T}\right)}{\left[1 + \frac{1}{2} \exp\left(-\frac{K\sqrt{Q}x}{T}\right)\right]^2} = \frac{2T}{K\sqrt{Q}} \quad (\text{B.15})$$

e

$$I_1 = \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{x \exp\left(-\frac{K\sqrt{Q}x}{T}\right)}{\left[1 + \frac{1}{2} \exp\left(-\frac{K\sqrt{Q}x}{T}\right)\right]^2} = -2 \ln 2 \frac{T^2}{K^2 Q} \quad (\text{B.16})$$

Assim, a equação (B.6) até primeira ordem em $1/K$ fica

$$p \approx \frac{1}{2} \left[1 + \operatorname{erf}\left(\frac{x^*}{\sqrt{2\pi}}\right) \right] + \frac{\exp(-x^{*2}/2)}{\sqrt{2\pi}} \frac{T \ln 2}{K\sqrt{Q}} \quad (\text{B.17})$$

Comportamento de Q na solução paramagnética quando $K \rightarrow \infty$

A equação de Q , usando a notação da seção anterior, pode ser escrita como

$$Q = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{\sqrt{2\pi}} \frac{\exp(-(x - x^*)^2/2)}{\left[1 + \frac{1}{2} \exp\left(-\frac{K\sqrt{Q}x}{T}\right)\right]^2} \quad (\text{B.18})$$

Utilizando o mesmo procedimento da seção anterior, definimos

$$u(x) = \int_{-\infty}^x \frac{dx'}{\sqrt{2\pi}} \exp(-(x' - x^*)^2/2) \quad (\text{B.19})$$

e

$$v(x) = \frac{1}{\left[1 + \frac{1}{2} \exp\left(-\frac{K\sqrt{Q}x}{T}\right)\right]^2} \quad (\text{B.20})$$

Agora temos

$$v'(x) = \frac{K\sqrt{Q}}{T} \frac{\exp\left(-\frac{K\sqrt{Q}x}{T}\right)}{\left[1 + \frac{1}{2} \exp\left(-\frac{K\sqrt{Q}x}{T}\right)\right]^3}$$

Após a expansão de $u(x)$, as integrais a calcular são

$$J_0 = \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{\exp(-\frac{K\sqrt{Q}x}{T})}{[1 + \frac{1}{2} \exp(-\frac{K\sqrt{Q}x}{T})]^3} = \frac{T}{K\sqrt{Q}} \quad (\text{B.21})$$

e

$$J_1 = \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{x \exp(-\frac{K\sqrt{Q}x}{T})}{[1 + \frac{1}{2} \exp(-\frac{K\sqrt{Q}x}{T})]^3} = (1 - \ln 2) \frac{T^2}{K^2 Q} \quad (\text{B.22})$$

Portanto,

$$Q \approx \frac{1}{2} [1 + \operatorname{erf}(\frac{x^*}{\sqrt{2}})] - \frac{\exp(-x^{*2}/2) T (1 - \ln 2)}{\sqrt{2\pi} K \sqrt{Q}} \quad (\text{B.23})$$

Comportamento da linha de transição entre as fases paramagnética e vidro de spins quando $K \rightarrow \infty$

Utilizando as aproximações das seções anteriores e a equação da linha de transição entre as paramagnética e vidro de spins ($T^2 = Q$), podemos escrever

$$p - Q \approx \frac{\exp(-x^{*2}/2)}{K\sqrt{2\pi}} \quad (\text{B.24})$$

No limite $K \rightarrow \infty$, ficamos com

$$x^* = \frac{\exp(-x^{*2}/2)}{2Q\sqrt{2\pi}}$$

e

$$Q = \frac{1}{2} [1 + \operatorname{erf}(\frac{x^*}{\sqrt{2}})]$$

A solução numérica das duas equações acima é dada por

$$x^* = 0.306713\dots$$

e

$$Q = 0.6240691\dots$$

Então, para valores grandes de K a fronteira crítica é dada por

$$T = 0.7876986\dots$$

Apêndice C

Elementos da matriz de estabilidade para o modelo de vidro de spins com interação quadrupolar aleatória

A matriz de estabilidade é simétrica. Precisamos, então, calcular apenas 6 tipos de blocos.

Nas equações abaixo, utilizaremos a notação

$$\langle \varphi_i^n \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx dy}{2\pi} \exp\left(-\frac{x^2 + y^2}{2}\right) \varphi_i^n ,$$

onde φ_i são dadas por (2.30) e (2.31).

Bloco $\frac{\partial^2 g}{\partial p_\alpha \partial p_\beta}$

O bloco $\frac{\partial^2 g}{\partial p_\alpha \partial p_\beta}$ apresenta tamanho $n \times n$ e possui dois tipos de elementos:

i) Elementos com $\alpha = \beta$,

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 g}{\partial p_\alpha \partial p_\alpha} &= \frac{1 + K^2}{2T^2} \left[1 - \frac{1 + K^2}{2T^2} (\langle (S^\alpha)^2 \rangle - \langle (S^\alpha)^2 \rangle^2) \right] \\ &= \frac{1 + K^2}{2T^2} \left[1 - \frac{1 + K^2}{2T^2} (p - p^2) \right] \equiv A \end{aligned} \quad (\text{C.1})$$

ii) Elementos com $\alpha \neq \beta$,

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 g}{\partial p_\alpha \partial p_\beta} &= \left(\frac{1 + K^2}{2T^2} \right)^2 (\langle (S^\alpha)^2 \rangle \langle (S^\beta)^2 \rangle - \langle (S^\alpha)^2 (S^\beta)^2 \rangle) \\ &= \left(\frac{1 + K^2}{2T^2} \right)^2 (p^2 - Q) \equiv B \end{aligned} \quad (\text{C.2})$$

Bloco $\frac{\partial^2 g}{\partial q_{\nu\gamma} \partial p_\alpha}$

Esse bloco apresenta tamanho $n(n-1)/2xn$ e possui dois tipos de elementos:

i) Elementos com dois índices iguais e um diferente,

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 g}{\partial q_{\alpha\beta} \partial p_\alpha} &= \frac{1+K^2}{2T^4} [\langle (S^\alpha)^2 \rangle \langle S^\alpha S^\beta \rangle - \langle (S^\alpha)^3 \rangle \langle S^\beta \rangle] \\ &= \frac{1+K^2}{2T^4} q(p-1) \equiv C \end{aligned} \quad (C.3)$$

onde lembramos que $(S^\alpha)^3 = S^\alpha$.

ii) Elementos com os três índices diferentes,

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 g}{\partial q_{\nu\gamma} \partial p_\alpha} &= \frac{1+K^2}{2T^4} [\langle (S^\alpha)^2 \rangle \langle S^\nu S^\gamma \rangle - \langle (S^\alpha)^2 S^\nu S^\gamma \rangle] \\ &= \frac{1+K^2}{2T^4} (pq - \langle \varphi_2 \varphi_1^2 \rangle) \equiv D \end{aligned} \quad (C.4)$$

Bloco $\frac{\partial^2 g}{\partial Q_{\nu\gamma} \partial p_\alpha}$

Esse bloco também apresenta tamanho $n(n-1)/2xn$ e possui dois tipos de elementos:

i) Elementos com dois índices iguais e um diferente,

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 g}{\partial Q_{\alpha\beta} \partial p_\alpha} &= \frac{(1+K^2)K^2}{2T^4} [\langle (S^\alpha)^2 \rangle \langle (S^\alpha)^2 (S^\beta)^2 \rangle - \langle (S^\alpha)^2 (S^\alpha)^2 (S^\beta) \rangle] \\ &= \frac{(1+K^2)K^2}{2T^4} Q(p-1) \equiv E \end{aligned} \quad (C.5)$$

onde lembramos que $(S^\alpha)^4 = (S^\alpha)^2$.

ii) Elementos com os três índices diferentes,

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 g}{\partial Q_{\nu\gamma} \partial p_\alpha} &= \frac{(1+K^2)K^2}{2T^4} [\langle (S^\alpha)^2 \rangle \langle (S^\nu)^2 (S^\gamma)^2 \rangle - \langle (S^\alpha)^2 (S^\nu)^2 (S^\gamma)^2 \rangle] \\ &= \frac{(1+K^2)K^2}{2T^4} (pQ - \langle \varphi_2^3 \rangle) \equiv F \end{aligned} \quad (C.6)$$

Bloco $\frac{\partial^2 g}{\partial q_{\nu\gamma} \partial q_{\alpha\beta}}$

Esse bloco apresenta tamanho $n(n-1)/2xn(n-1)/2$ e possui três tipos de elementos:

i) Elementos com índices iguais entre pares,

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2 g}{\partial q_{\alpha\beta} \partial q_{\alpha\beta}} &= \frac{1}{T^2} + \frac{1}{T^4} [\langle S^\alpha S^\beta \rangle^2 - \langle (S^\alpha)^2 (S^\beta)^2 \rangle] \\ &= \frac{1}{T^2} [1 + \frac{1}{T^2} (q^2 - Q)] \equiv G \quad .\end{aligned}\tag{C.7}$$

ii) Elementos com um índice igual entre pares,

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2 g}{\partial q_{\alpha\beta} \partial q_{\alpha\gamma}} &= \frac{1}{T^4} [\langle S^\alpha S^\beta \rangle^2 - \langle (S^\alpha)^2 S^\beta S^\gamma \rangle] \\ &= \frac{1}{T^4} (q^2 - \langle \varphi_2 \varphi_1^2 \rangle) \equiv H \quad .\end{aligned}\tag{C.8}$$

iii) Elementos com todos os índices diferentes,

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2 g}{\partial q_{\alpha\beta} \partial q_{\nu\gamma}} &= \frac{1}{T^4} [\langle S^\alpha S^\beta \rangle \langle S^\nu S^\gamma \rangle - \langle S^\alpha S^\beta S^\nu S^\gamma \rangle] \\ &= \frac{1}{T^4} (q^2 - \langle \varphi_1^4 \rangle) \equiv I\end{aligned}\tag{C.9}$$

Bloco $\frac{\partial^2 g}{\partial Q_{\nu\gamma} \partial q_{\alpha\beta}}$

Esse bloco também apresenta tamanho $n(n-1)/2xn$ e possui três tipos de elementos:

i) Elementos com índices iguais entre pares,

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2 g}{\partial Q_{\alpha\beta} \partial q_{\alpha\beta}} &= \frac{K^2}{T^4} [\langle S^\alpha S^\beta \rangle \langle (S^\alpha)^2 (S^\beta)^2 \rangle - \langle (S^\alpha)^3 (S^\beta)^3 \rangle] \\ &= \frac{K^2}{T^4} q(Q-1) \equiv J \quad .\end{aligned}\tag{C.10}$$

ii) Elementos com um índice igual entre pares,

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2 g}{\partial Q_{\alpha\beta} \partial q_{\alpha\gamma}} &= \frac{K^2}{T^4} [\langle S^\alpha S^\beta \rangle \langle (S^\alpha)^2 (S^\beta)^2 \rangle - \langle (S^\alpha)^3 S^\beta (S^\gamma)^2 \rangle] \\ &= \frac{K^2}{T^4} (qQ - \langle \varphi_1^2 \varphi_2 \rangle) \equiv K \quad .\end{aligned}\tag{C.11}$$

iii) Elementos com todos os índices diferentes,

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2 g}{\partial Q_{\alpha\beta} \partial q_{\nu\gamma}} &= \frac{K^2}{T^4} [\langle S^\alpha S^\beta \rangle \langle (S^\alpha)^2 (S^\beta)^2 \rangle - \langle S^\alpha S^\beta (S^\nu)^2 (S^\gamma)^2 \rangle] \\ &= \frac{K^2}{T^4} (qQ - \langle \varphi_1^2 \varphi_2^2 \rangle) \equiv L \quad .\end{aligned}\tag{C.12}$$

Bloco $\frac{\partial^2 g}{\partial Q_{\nu\gamma} \partial Q_{\alpha\beta}}$

Esse bloco também apresenta tamanho $n(n-1)/2xn$ e possui três tipos de elementos:

i) Elemento com índices iguais entre pares,

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 g}{\partial Q_{\alpha\beta} \partial Q_{\alpha\beta}} &= \frac{K^2}{T^2} + \frac{K^4}{T^4} [\langle (S^\alpha)^2 (S^\beta)^2 \rangle^2 - \langle (S^\alpha)^2 (S^\beta)^2 \rangle] \\ &= \frac{K^2}{T^2} \left[1 + \frac{K^2}{T^2} Q(Q-1) \right] \equiv M \quad . \end{aligned} \quad (\text{C.13})$$

ii) Elementos com um índice igual entre pares,

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 g}{\partial Q_{\alpha\beta} \partial Q_{\alpha\gamma}} &= \frac{K^4}{T^4} [\langle (S^\alpha)^2 (S^\beta)^2 \rangle \langle (S^\alpha)^2 (S^\gamma)^2 \rangle - \langle (S^\alpha)^4 (S^\beta)^2 (S^\gamma)^2 \rangle] \\ &= \frac{K^4}{T^4} [Q^2 - \langle \varphi_2^3 \rangle] \equiv N \quad . \end{aligned} \quad (\text{C.14})$$

iii) Elementos com todos os índices diferentes,

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 g}{\partial Q_{\alpha\beta} \partial Q_{\nu\gamma}} &= \frac{K^4}{T^4} [\langle (S^\alpha)^2 (S^\beta)^2 \rangle \langle (S^\nu)^2 (S^\gamma)^2 \rangle - \langle (S^\alpha)^2 (S^\beta)^2 (S^\nu)^2 (S^\gamma)^2 \rangle] \\ &= \frac{K^4}{T^4} [Q^2 - \langle \varphi_2^4 \rangle] \equiv O \quad . \end{aligned} \quad (\text{C.15})$$

Apêndice D

Cálculo da distribuição de probabilidades de energias para o vidro de spins com interações entre p spins

Neste apêndice calcularemos a distribuição de probabilidades de energias para o vidro de spins quadrupolar com interações entre p -spins, e mostraremos que no limite $p \rightarrow \infty$ as energias de cada configuração são decorrelacionadas. O hamiltoniano para o esse modelo pode ser escrito como

$$\mathcal{H} = \sum_{\vec{i}} (\bar{J}\bar{S} + \bar{K}\bar{S}^2) \quad , \quad (\text{D.1})$$

onde

$$\begin{aligned} \bar{J} &= J_{i_1, i_2, \dots, i_p} \quad , \\ \bar{K} &= K_{i_1, i_2, \dots, i_p} \quad , \\ \bar{S} &= S_{i_1} S_{i_2} \dots S_{i_p} \quad , \\ \sum_{\vec{i}} &= \sum_{1 \leq i_1 < \dots < i_p \leq N} \quad . \end{aligned}$$

A energia de uma dada configuração de spins $\{S_i\}$ é fixa para cada conjunto de $\{J_{ij}\}$ e $\{K_{ij}\}$. A probabilidade para que uma dada configuração de spins $\{S_i\}$ apresente uma energia E quando amostras $\{J_{i_1, i_2, \dots, i_p}\}$ e $\{K_{i_1, i_2, \dots, i_p}\}$ são escolhidas aleatoriamente é

dada por

$$P(E, \{S_i\}) = \overline{\delta(E - \mathcal{H}(\{S_i\}))} \quad , \quad (\text{D.2})$$

onde a barra indica média sobre as configurações. Utilizando a representação integral para a função delta,

$$\delta(E - \mathcal{H}(\{S_i\})) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dz}{2\pi} \exp[iz(E - \mathcal{H}(\{S_i\}))] \quad , \quad (\text{D.3})$$

as médias sobre a desordem são facilmente calculadas,

$$P(E, \{S_i\}) = \int \frac{dz}{2\pi} \prod_i \left[\frac{N^{p-1}}{\pi p!} \right] d\tilde{J} d\tilde{K} \exp \left[\sum_i \left[-\frac{N^{p-1}}{p!} \left(\frac{\tilde{J}^2}{J^2} + \frac{\tilde{K}^2}{K^2} \right) + iz(\tilde{J}\tilde{S} + \tilde{K}\tilde{S}^2) \right] + izE \right] \quad . \quad (\text{D.4})$$

Calculando as integrais em \tilde{J} e \tilde{K} temos

$$P(E, \{S_i\}) = \int \frac{dz}{2\pi} \exp \left[izE - \frac{p!}{4N^{p-1}} (J^2 + K^2) z^2 \sum_i \tilde{S}^2 \right] \quad , \quad (\text{D.5})$$

onde usamos o fato que $\tilde{S}^2 = \tilde{S}^4$. Note que \tilde{S}^2 é igual a 1 ou 0; por causa disso, $P(E)$ depende somente do número de spins não nulos na configuração. Considerando W o número de spins diferentes de zero, então $W = NR$, onde

$$R = \frac{1}{N} \sum_i (S_i)^2 \quad . \quad (\text{D.6})$$

A média térmica de R é o parâmetro de ordem de quadrupolo do problema com $p = 2$. Se a configuração $\{S_i\}$ apresenta menos que p spins não nulos, então a energia dessa configuração é nula. Se existem mais que $p - 1$ spins não nulos o somatório na Eq. (D.5) pode ser escrito como

$$\sum_i \tilde{S}^2 = \frac{W!}{p!(W-p)!} \quad (\text{D.7})$$

ou

$$\sum_i \tilde{S}^2 = \frac{(NR)!}{p!(NR-p)!} = \frac{(NR)^p}{p!} \left[1 + A(NR)^{-1} + B(NR)^{-2} + \dots \right] \quad , \quad (\text{D.8})$$

onde A e B são coeficientes independentes de N e R . No limite termodinâmico, ficamos com

$$\sum_i \tilde{S}^2 = \frac{(NR)^p}{p!} \quad . \quad (\text{D.9})$$

Deste modo, a integral em (D.5) resulta em

$$P(E, R) = \frac{1}{\sqrt{N\pi R^p(J^2 + K^2)}} \exp \left[-\frac{E^2}{NR^p(J^2 + K^2)} \right] . \quad (\text{D.10})$$

Vemos, então, que a energia apresenta uma distribuição de probabilidades gaussiana com média zero e variância $NR^p(J^2 + K^2)$. Estamos interessados no limite $p \rightarrow \infty$; é importante notar que o limite termodinâmico só é corretamente obtido se mantivermos a condição $N \gg p$ quando tomarmos o limite $p \rightarrow \infty$. Isso é satisfeito se tomarmos $N \gg p \gg \ln p$; assim, para $R < 1$ a largura da gaussiana, Eq. (D.10), tende a zero quando N tende a infinito. Dessa forma, no limite termodinâmico e grandes valores de p , a função de distribuição $P(E, R)$ é uma delta em $E = 0$ para $R < 1$. Para $R = 1$ a função de distribuição $P(E, R)$ é independente de p . No limite $p \rightarrow \infty$ a função de distribuição é dada por

$$P(E, R) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{N\pi(J^2 + K^2)}} \exp \left[-\frac{E^2}{N(J^2 K^2)} \right] & \text{para } R = 1 \quad , \\ \delta(E) & \text{para } R < 1 \quad . \end{cases} \quad (\text{D.11})$$

A importância das simplificações para o limite $p \rightarrow \infty$ tornam-se mais aparentes quando investigamos as correlações entre as energias para diferentes configurações. A probabilidade para que uma configuração $\{S_i\}^{(1)}$ apresente energia E_1 e outra configuração $\{S_i\}^{(2)}$ apresente energia E_2 , para uma amostra de $\{J_{i_1, i_2, \dots, i_p}\}$ e $\{K_{i_1, i_2, \dots, i_p}\}$ escolhidos aleatoriamente é dada por

$$P(E_1, E_2) = \overline{\delta(E_1 - \mathcal{H}_1)\delta(E_2 - \mathcal{H}_2)} \quad , \quad (\text{D.12})$$

onde os índices 1 e 2 indicam as respectivas configurações.

Utilizando a representação integral para as funções δ , obtemos

$$P(E_1, E_2) = \int \frac{dz_1 dz_2}{(2\pi)^2} \prod_i \left[\frac{N^{p-1}}{\pi p!} \right] d\tilde{J} d\tilde{K} \exp \left[-\frac{N^{p-1}}{p!} \sum_i \left[\frac{\tilde{J}^2}{J^2} + \frac{\tilde{K}^2}{K^2} \right] \right. \\ \left. + \sum_i [iz_1(\tilde{J}\tilde{S}_1 + \tilde{K}\tilde{S}_1^2) + iz_2(\tilde{J}\tilde{S}_2 + \tilde{K}\tilde{S}_2^2)] + i(z_1 E_1 + z_2 E_2) \right] . \quad (\text{D.13})$$

As integrais em \bar{J} e \bar{K} são facilmente resolvidas. A integral em \bar{J} é dada por

$$\bar{J}_1 = \exp \left[\frac{-J^2 p!}{4N^{p-1}} \sum_{\dot{i}} (z_1 \bar{S}_1 + z_2 \bar{S}_2)^2 \right] \quad . \quad (D.14)$$

Podemos escrever o somatório, no limite termodinâmico, como

$$\sum_{\dot{i}} (z_1 \bar{S}_1 + z_2 \bar{S}_2)^2 = \frac{(NR_1)^p}{p!} z_1^2 + \frac{(NR_2)^p}{p!} z_2^2 + 2 \frac{(Nq)^p}{p!} z_1 z_2 \quad , \quad (D.15)$$

onde utilizamos a aproximação (D.8) e também a aproximação

$$\sum_{\dot{i}} \bar{S}_1 \bar{S}_2 = \frac{N!}{p!(N-p)!} \left(\frac{1}{N} \sum_{i_1=1}^N S_{i_1}^{(1)} S_{i_1}^{(2)} \right) \dots \left(\frac{1}{N} \sum_{i_p=1}^N S_{i_p}^{(1)} S_{i_p}^{(2)} \right) \approx \frac{N^p}{p!} q^p \quad . \quad (D.16)$$

Na expressão anterior q representa a superposição entre as configurações, definida por

$$q = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N S_i^{(1)} S_i^{(2)} \quad (D.17)$$

entre as duas configurações. Então, a integral em \bar{J} resulta em

$$\bar{J}_1 = \exp \left[-\frac{J^2 N}{4} (R_1^p z_1^2 + R_2^p z_2^2 + 2q^p z_1 z_2) \right] \quad . \quad (D.18)$$

A integral em \bar{K} também é trivial e fornece

$$\bar{K}_1 = \exp \left[\frac{-K^2 p!}{4N^{p-1}} \sum_{\dot{i}} (z_1 \bar{S}_1^2 + z_2 \bar{S}_2^2)^2 \right] \quad . \quad (D.19)$$

Utilizando o mesmo procedimento podemos escrever, no limite termodinâmico,

$$\bar{K}_1 = \exp \left[-\frac{K^2 N}{4} (R_1^p z_1^2 + R_2^p z_2^2 + 2Q^p z_1 z_2) \right] \quad , \quad (D.20)$$

onde Q é dado por

$$Q = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (S_i^{(1)} S_i^{(2)})^2 \quad . \quad (D.21)$$

Juntando as integrais em \bar{J} e \bar{K} , a Eq. (D.13) fica

$$P(E_1, E_2) = \int \frac{dz_1 dz_2}{(2\pi)^2} \exp \left[-\frac{N}{4} (J^2 + K^2) (R_1^p z_1^2 + R_2^p z_2^2) + i(E_1 z_1 + E_2 z_2) - \frac{N}{2} (J^2 q^p + K^2 Q^p) z_1 z_2 \right] \quad , \quad (D.22)$$

resolvendo as integrais e exercitando um pouco a álgebra obtemos

$$P(E_1, E_2) = \frac{1}{N\pi\sqrt{R_1^p R_2^p (J^2 + K^2)^2 - (J^2 q^p + K^2 Q^p)^2}} \exp \left[\frac{-R_1^p E_2^2 - R_2^p E_1^2 + 2E_1 E_2 \frac{J^2 q^p + K^2 Q^p}{J^2 + K^2}}{N (R_1^p R_2^p (J^2 + K^2)^2 - (J^2 q^p + K^2 Q^p)^2)} \right] \quad (D.23)$$

Como estamos interessados no limite $p \rightarrow \infty$, vemos duas possibilidades para os valores que os parâmetros q, Q, R_1 e R_2 podem assumir.

Consideremos inicialmente $|q| < 1, |Q| < 1$. Neste caso as energias ficam decorrelacionadas:

$$P(E_1, E_2) = P(E_1)P(E_2) \quad , \quad (D.24)$$

ou seja, as energias comportam-se como variáveis aleatórias independentes e identicamente distribuídas.

Outra possibilidade é $q < 1$ e $Q = 1$ e, nesse caso, $R_1 = R_2 = 1$. Então

$$P(E_1, E_2) = P(E_1)\delta(E_1 - E_2) \quad . \quad (D.25)$$

O cálculo acima pode ser estendido para um número arbitrário de configurações de spins e pode-se mostrar que no limite $p \rightarrow \infty$ a distribuição de energias é dada por

$$P(E_1, \dots, E_M) = \prod_{i=1}^M P(E_i) \quad , \quad (D.26)$$

se $|q| < 1$ e $|Q| < 1$. Assim, as energias das configurações macroscopicamente distinguíveis ($|q| < 1, |Q| < 1, R = 1$) comportam-se como variáveis aleatórias independentes e identicamente distribuídas.

Apêndice E

Elementos da matriz de estabilidade para o modelo de vidro de spins com interação entre p spins

A matriz de estabilidade é simétrica. Precisamos, então, calcular apenas 6 tipos de blocos. O cálculo é análogo ao caso $p = 2$, de forma que apresentaremos apenas os resultados.

Nas equações abaixo, utilizaremos a notação

$$\langle \varphi_i^n \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx dy}{2\pi} \exp\left(-\frac{x^2 + y^2}{2}\right) \varphi_i^n ,$$

onde φ_i são dadas por (3.36) e (3.37)

Bloco $\frac{\partial^2 g}{\partial R_\alpha \partial R_\beta}$

Esse bloco apresenta tamanho $n \times n$ e possui dois tipos de elementos.

i) Elementos com $\alpha = \beta$,

$$\frac{\partial^2 g}{\partial R_\alpha \partial R_\alpha} = \frac{\beta^2(J^2 + K^2)p(p-1)}{4} R^{p-2} \left[1 + \frac{\beta^2(J^2 + K^2)p(p-1)}{4} R^{p-2}(R^2 - R) \right] = A . \quad (\text{E.1})$$

ii) Elementos com $\alpha \neq \beta$,

$$\frac{\partial^2 g}{\partial R_\alpha \partial R_\beta} = \left[\frac{\beta^2(J^2 + K^2)p(p-1)}{4} \right]^2 R^{2(p-2)}(R^2 - Q) = B . \quad (\text{E.2})$$

Bloco $\frac{\partial^2 g}{\partial q_{\nu\gamma} \partial R_\alpha}$

Esse bloco apresenta tamanho $n(n-1)/2xn$ e possui dois tipos de elementos:

i) Elementos com dois índices iguais e um diferente,

$$\frac{\partial^2 g}{\partial q_{\alpha\beta} \partial R_\alpha} = 2 \left[\frac{\beta^2 p(p-1)}{4} \right]^2 J^2 (J^2 + K^2) (Rq)^{p-2} q (R-1) = C \quad . \quad (\text{E.3})$$

ii) Elementos com três índices diferentes,

$$\frac{\partial^2 g}{\partial q_{\nu\gamma} \partial R_\alpha} = 2 \left[\frac{\beta^2 p(p-1)}{4} \right]^2 J^2 (J^2 + K^2) (Rq)^{p-2} (Rq - \langle \varphi_1 \varphi_2^2 \rangle) = D \quad . \quad (\text{E.4})$$

Bloco $\frac{\partial^2 g}{\partial Q_{\nu\gamma} \partial R_\alpha}$

Esse bloco também apresenta tamanho $n(n-1)/2xn$ e possui dois tipos de elementos:

i) Elementos com dois índices iguais e um diferente,

$$\frac{\partial^2 g}{\partial Q_{\alpha\beta} \partial R_\alpha} = 2 \left[\frac{\beta^2 p(p-1)}{4} \right]^2 K^2 (J^2 + K^2) (RQ)^{p-2} Q (R-1) = E \quad . \quad (\text{E.5})$$

ii) Elementos com os três índices diferentes,

$$\frac{\partial^2 g}{\partial Q_{\nu\gamma} \partial R_\alpha} = 2 \left[\frac{\beta^2 p(p-1)}{4} \right]^2 K^2 (J^2 + K^2) (RQ)^{p-2} (RQ - \langle \varphi_2^3 \rangle) = F \quad . \quad (\text{E.6})$$

Bloco $\frac{\partial^2 g}{\partial q_{\nu\gamma} \partial q_{\alpha\beta}}$

Esse bloco apresenta tamanho $n(n-1)/2xn(n-1)/2$ e possui três tipos de elementos:

i) Elementos com índices iguais entre pares,

$$\frac{\partial^2 g}{\partial q_{\alpha\beta} \partial q_{\alpha\beta}} = \frac{\beta^2 J^2 p(p-1)}{2} q^{p-2} \left[1 - \frac{\beta^2 J^2 p(p-1)}{2} q^{p-2} (Q - q^2) \right] = G \quad . \quad (\text{E.7})$$

ii) Elementos com um índice igual entre pares,

$$\frac{\partial^2 g}{\partial q_{\alpha\beta} \partial q_{\alpha\gamma}} = \left[\frac{\beta^2 J^2 p(p-1)}{2} \right]^2 (q^{p-2})^2 (q^2 - \langle \varphi_1^2 \varphi_2 \rangle) = H \quad . \quad (\text{E.8})$$

iii) Elementos com todos os índices diferentes,

$$\frac{\partial^2 g}{\partial q_{\alpha\beta} \partial q_{\alpha\gamma}} = \left[\frac{\beta^2 J^2 p(p-1)}{2} \right]^2 (q^{p-2})^2 (q^2 - \langle \varphi_1^4 \rangle) = I \quad . \quad (\text{E.9})$$

Bloco $\frac{\partial^2 g}{\partial Q_{\nu\gamma} \partial q_{\alpha\beta}}$

Esse bloco também apresenta tamanho $n(n-1)/2 \times n(n-1)/2$ e possui três tipos de elementos:

i) Elementos com índices iguais entre pares,

$$\frac{\partial^2 g}{\partial Q_{\alpha\beta} \partial q_{\alpha\beta}} = \left[\frac{JK\beta^2 p(p-1)}{2} \right]^2 (qQ)^{p-2} q(Q-1) = J \quad . \quad (\text{E.10})$$

ii) Elementos com um índice igual entre pares,

$$\frac{\partial^2 g}{\partial Q_{\alpha\beta} \partial q_{\alpha\gamma}} = \left[\frac{JK\beta^2 p(p-1)}{2} \right]^2 (qQ)^{p-2} (qQ - \langle \varphi_1^2 \varphi_2 \rangle) = K \quad . \quad (\text{E.11})$$

iii) Elementos com todos os índices diferentes,

$$\frac{\partial^2 g}{\partial Q_{\alpha\beta} \partial q_{\nu\gamma}} = \left[\frac{JK\beta^2 p(p-1)}{2} \right]^2 (qQ)^{p-2} (qQ - \langle \varphi_1^2 \varphi_2^2 \rangle) = L \quad . \quad (\text{E.12})$$

Bloco $\frac{\partial^2 g}{\partial Q_{\nu\gamma} \partial Q_{\alpha\beta}}$

Esse bloco também apresenta tamanho $n(n-1)/2 \times n(n-1)/2$ e possui três tipos de elementos:

i) Elemento com índices iguais entre pares,

$$\frac{\partial^2 g}{\partial Q_{\alpha\beta} \partial Q_{\alpha\beta}} = \frac{K^2 \beta^2 p(p-1)}{2} Q^{p-2} \left[1 - \frac{K^2 \beta^2 p(p-1)}{2} Q^{p-2} Q(1-Q) \right] = M \quad . \quad (\text{E.13})$$

ii) Elementos com um índice igual entre pares,

$$\frac{\partial^2 g}{\partial Q_{\alpha\beta} \partial Q_{\alpha\gamma}} = \left[\frac{K^2 \beta^2 p(p-1)}{2} \right]^2 (Q^{p-2})^2 (Q^2 - \langle \varphi_2^3 \rangle) = N \quad . \quad (\text{E.14})$$

iii) Elementos com todos os índices diferentes,

$$\frac{\partial^2 g}{\partial Q_{\alpha\beta} \partial Q_{\nu\gamma}} = \left[\frac{K^2 \beta^2 p(p-1)}{2} \right]^2 (Q^{p-2})^2 (Q^2 - \langle \varphi_2^4 \rangle) = O \quad . \quad (\text{E.15})$$

Apêndice F

Expansão em séries de potências da equação da magnetização (4.18)

Neste Apêndice vamos expandir as equações do parâmetro de ordem vidro de spins (Eq. (4.19)) e da magnetização (Eq. (4.18)) com o objetivo de obter uma aproximação até quinta ordem para a magnetização; veremos que essa expansão fornece apenas termos de potências ímpares, ou seja uma equação do tipo

$$m = A_1 m + A_3 m^3 + A_5 m^5 + O(m^7) \quad . \quad (F.1)$$

Expansão até quinta ordem da Eq. (4.19)

Vamos considerar inicialmente a expansão em série de Taylor até terceira ordem da Eq. (4.19) em torno de $m = 0$ e $q = q_0$

$$\begin{aligned} q = q_0 &+ \left. \frac{\partial Q}{\partial q} \right|_0 (q - q_0) + \left. \frac{\partial Q}{\partial m} \right|_0 m + \frac{1}{2} \left[\left. \frac{\partial^2 Q}{\partial q^2} \right|_0 (q - q_0)^2 + \right. \\ &2 \left. \frac{\partial^2 Q}{\partial q \partial m} \right|_0 (q - q_0)m + \left. \frac{\partial^2 Q}{\partial m^2} \right|_0 m^2 \left. \right] + \frac{1}{6} \left[\left. \frac{\partial^3 Q}{\partial q^3} \right|_0 (q - q_0)^3 + \right. \\ &3 \left. \frac{\partial^3 Q}{\partial q^2 \partial m} \right|_0 (q - q_0)^2 m + 3 \left. \frac{\partial^3 Q}{\partial q \partial m^2} \right|_0 (q - q_0)m^2 + \left. \frac{\partial^3 Q}{\partial m^3} \right|_0 m^3 \left. \right] \quad , \end{aligned} \quad (F.2)$$

onde Q está definido a seguir e as derivadas são tomadas em $m = 0$ e $q = q_0$. As equações dos parâmetros de ordem (4.18-4.19) podem ser escritas como

$$M = p_- u_1^- + p_0 u_1^0 + p_+ u_1^+ = \sum_{i=-,0,+} p_i u_1^i \quad , \quad (\text{F.3})$$

$$Q = p_- u_2^- + p_0 u_2^0 + p_+ u_2^+ = \sum_{i=-,0,+} p_i u_2^i \quad , \quad (\text{F.4})$$

onde M e Q são a magnetização e o parâmetro vidro de spins, respectivamente, u_k^\pm é dado por

$$u_k^\pm = \int \mathcal{D}z \operatorname{th}^k \xi_\pm \quad (\text{F.5})$$

e

$$\int \mathcal{D}z \dots = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dz}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{z^2}{2}} \dots \quad , \quad (\text{F.6})$$

com ξ_\pm dados pela equação (4.16) e ξ_0 dado pela equação (4.17). Uma derivada geral de u_k^i com relação a q pode ser calculada,

$$\frac{\partial u_k^i}{\partial q} = \frac{k\beta J}{2\sqrt{q}} \int \mathcal{D}z (\operatorname{th}^{k-1} \xi^i - \operatorname{th}^{k+1} \xi^i) z \quad . \quad (\text{F.7})$$

Utilizando o resultado

$$\int \mathcal{D}z f(z) z = \int \mathcal{D}z f'(z) \quad , \quad (\text{F.8})$$

obtemos, após algumas simplificações,

$$\frac{\partial u_k^i}{\partial q} = \frac{k(\beta J)^2}{2} \int \mathcal{D}z [(k-1) \operatorname{th}^{k-2} \xi^i - 2k \operatorname{th}^k \xi^i + (k+1) \operatorname{th}^{k+2} \xi^i] \quad , \quad (\text{F.9})$$

ou seja

$$\frac{\partial u_k^i}{\partial q} = \frac{k(\beta J)^2}{2} [(k-1)u_{k-2}^i - 2ku_k^i + (k+1)u_{k+2}^i] \quad , \quad (\text{F.10})$$

onde utilizamos o fato que $u_0^i = 1$. Podemos, também, calcular uma derivada geral de u_k^i com relação a m ,

$$\frac{\partial u_k^i}{\partial m} = k\beta J_0 [u_{k-1}^i - u_{k+1}^i] \quad . \quad (\text{F.11})$$

Utilizando os resultados acima, podemos facilmente calcular as derivadas na Eq. (F.2). A seguir calcularemos cada derivada da expansão separadamente.

Cálculo de $\left. \frac{\partial Q}{\partial q} \right|_0$

Por exemplo, a primeira derivada com relação a q fica

$$\frac{\partial Q}{\partial q} = \sum_{i=-,0,+} p_i \frac{\partial u_2^i}{\partial q} = (\beta J)^2 \sum_{i=-,0,+} p_i [1 - 4u_2^i + 3u_4^i] \quad . \quad (\text{F.12})$$

Calculando a derivada em $m = 0$ e $q = q_0$ ficamos com

$$\frac{\partial Q}{\partial q} = (\beta J)^2 \sum_{i=-,0,+} p_i [1 - 4\rho_1^i(q_0) + 3\rho_2^i(q_0)] \quad , \quad (\text{F.13})$$

onde definimos

$$\rho_k^\pm(q_0) = \int \mathcal{D}z \text{th}^{2k}(\beta J \sqrt{q_0} z \pm \beta h_0) \quad , \quad (\text{F.14})$$

e $k = 1, 2, \dots$. É interessante observar a relação entre ρ_k^+ e ρ_k^- . Considerando

$$\rho_k^-(q_0) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dz}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{z^2}{2}} \text{th}^{2k}(\beta J \sqrt{q_0} z - \beta h) \quad , \quad (\text{F.15})$$

e fazendo a transformação $z \rightarrow -z$, obtemos

$$\rho_k^-(q_0) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dz}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{z^2}{2}} \text{th}^{2k}(\beta J \sqrt{q_0} z + \beta h) = \rho_k^+ \quad . \quad (\text{F.16})$$

Logo

$$\frac{\partial u_2^-}{\partial q} = \frac{\partial u_2^+}{\partial q} \quad . \quad (\text{F.17})$$

Utilizando o fato que estamos interessados no caso $p_+ = p_- = (1 - p_0)/2$, ficamos com

$$\frac{\partial Q}{\partial q} = (\beta J)^2 (1 - p_0) [1 - 4\rho_1^+(q_0) + 3\rho_2^+(q_0)] + (\beta J)^2 p_0 [1 - 4\rho_1^0(q_0) + 3\rho_2^0(q_0)] \quad . \quad (\text{F.18})$$

Definindo agora

$$\Gamma^\pm = 1 - 4\rho_1^\pm(q_0) + 3\rho_2^\pm(q_0) \quad (\text{F.19})$$

e

$$\Gamma = (1 - p_0)\Gamma^+ + p_0\Gamma^0 \quad (\text{F.20})$$

obtemos

$$\left. \frac{\partial Q}{\partial q} \right|_0 = (\beta J)^2 \Gamma \quad . \quad (\text{F.21})$$

Cálculo de $\left. \frac{\partial Q}{\partial m} \right|_0$

Utilizando o resultado da Eq. (F.11) vemos imediatamente que

$$\frac{\partial Q}{\partial m} = \sum_{i=-,0,+} p_i \frac{\partial u_1^i}{\partial m} = 2\beta J_0 \sum_{i=-,0,+} p_i [u_1^i - u_3^i] \quad . \quad (\text{F.22})$$

Quando $m = 0$, $q = q_0$ e k for ímpar temos

$$u_k^- = \int \mathcal{D}z \text{th}^k(\beta\sqrt{q_0}z - \beta h_0) \quad , \quad (\text{F.23})$$

de forma que fazendo a transformação $z \rightarrow -z$ obtemos $u_k^- = -u_k^+$. Além disso

$$u_k^0 = \int \mathcal{D}z \text{th}^k(\beta\sqrt{q_0}z) = 0 \quad . \quad (\text{F.24})$$

para k ímpar. Logo

$$\left. \frac{\partial Q}{\partial m} \right|_0 = 0 \quad (\text{F.25})$$

Cálculo de $\left. \frac{\partial^2 Q}{\partial m^2} \right|_0$

Efetuada a derivada em m na Eq. (F.22) temos

$$\frac{\partial^2 Q}{\partial m^2} = 2\beta J_0 \sum_{i=-,0,+} p_i \left(\frac{\partial u_1^i}{\partial m} - \frac{\partial u_3^i}{\partial m} \right) \quad . \quad (\text{F.26})$$

Utilizando o resultado da Eq. (F.11) temos

$$\frac{\partial u_1^i}{\partial m} - \frac{\partial u_3^i}{\partial m} = \beta J_0 (1 - 4u_2^i + 3u_4^i) \quad , \quad (\text{F.27})$$

e observando que em $m = 0$ e $q = q_0$, temos

$$u_2^i = \rho_1^i(q_0) \quad , \quad u_4^i = \rho_2^i(q_0) \quad , \quad (\text{F.28})$$

e então

$$\frac{\partial u_1^i}{\partial m} - \frac{\partial u_3^i}{\partial m} = \beta J_0 \Gamma^i \quad . \quad (\text{F.29})$$

Assim, a segunda derivada em m da Eq. (F.4) fica

$$\left. \frac{\partial^2 Q}{\partial m^2} \right|_0 = 2(\beta J_0)^2 \Gamma \quad , \quad (\text{F.30})$$

onde consideramos $p_+ = p_- = (1 - p_0)/2$.

Cálculo de $\left. \frac{\partial^2 Q}{\partial q^2} \right|_0$

Efetuada a derivada em q na Eq. (F.12) temos

$$\frac{\partial^2 Q}{\partial q^2} = (\beta J)^4 \sum_{i=-,0,+} p_i (-4 + 34u_2^i - 60u_4^i + 30u_6^i) . \quad (\text{F.31})$$

Após tomarmos $m = 0$, $q = q_0$ e $p_+ = p_- = (1 - p_0)/2$, ficamos com

$$\left. \frac{\partial^2 Q}{\partial q^2} \right|_0 = (\beta J)^4 \gamma , \quad (\text{F.32})$$

onde definimos

$$\gamma^i = -4 + 34\rho_1^i - 60\rho_2^i + 30\rho_3^i \quad (\text{F.33})$$

e

$$\gamma = (1 - p_0)\gamma^1 + p_0\gamma^0 . \quad (\text{F.34})$$

Cálculo de $\left. \frac{\partial^2 Q}{\partial q \partial m} \right|_0$

Efetuada a derivada em m na Eq. (F.12) temos

$$\frac{\partial^2 Q}{\partial q \partial m} = (\beta J)^2 (\beta J_0) \sum_{i=-,0,+} p_i (-8u_1^i + 20u_3^i - 12u_5^i) . \quad (\text{F.35})$$

Considerando $m = 0$, $q = q_0$ e $p_+ = p_- = (1 - p_0)/2$, vemos que

$$\left. \frac{\partial^2 Q}{\partial q \partial m} \right|_0 = 0 . \quad (\text{F.36})$$

Cálculo de $\left. \frac{\partial^3 Q}{\partial q \partial m^2} \right|_0$

Efetuada a derivada em m na Eq. (F.35) temos

$$\frac{\partial^3 Q}{\partial q \partial m^2} = 2(\beta J)^2 (\beta J_0)^2 \sum_{i=-,0,+} p_i (-4 + 34u_2^i - 60u_4^i + 30u_6^i) . \quad (\text{F.37})$$

Considerando $m = 0$, $q = q_0$ e $p_+ = p_- = (1 - p_0)/2$, temos

$$\left. \frac{\partial^3 Q}{\partial q \partial m^2} \right|_0 = 2(\beta J)^2 (\beta J_0)^2 \gamma . \quad (\text{F.38})$$

Obtenção da expansão de Q em termos de m

Nessa seção vamos considerar todas as derivadas obtidas nas seções anteriores e substituí-las na Eq. (F.2). Veremos logo adiante que a expansão de Q terá a seguinte forma

$$q = Q_2 m^2 + Q_4 m^4 + O(m^6) \quad . \quad (\text{F.39})$$

Como estamos interessados em expansões até quinta ordem em m , as derivadas $\frac{\partial^3 Q}{\partial q^3}$, $\frac{\partial^3 Q}{\partial q^2 \partial m}$ e $\frac{\partial^3 Q}{\partial m^3}$ não serão necessárias no nosso cálculo.

Substituindo as equações (F.21, F.25, F.30, F.32, F.36, F.38) na Eq. (F.2) obtemos

$$\begin{aligned} q = & q_0 + (\beta J)^2 \Gamma (q - q_0) + \frac{1}{2} (\beta J)^4 \gamma (q - q_0)^2 \\ & + (\beta J)^2 \Gamma m^2 + (\beta J)^2 (\beta J_0)^2 \gamma (q - q_0) m^2 \quad . \end{aligned} \quad (\text{F.40})$$

Vemos, então, que a primeira correção em $q - q_0$ é da ordem de m^2 . Considerando somente os termos até segunda ordem em m temos

$$q - q_0 = (\beta J)^2 \Gamma (q - q_0) + (\beta J_0)^2 \Gamma m^2 \quad (\text{F.41})$$

ou

$$q - q_0 = \frac{(\beta J_0)^2 \Gamma}{1 - (\beta J)^2 \Gamma} m^2 \quad . \quad (\text{F.42})$$

Substituindo o valor de $q - q_0$ na Eq. (F.40) e rearranjando os termos resultantes, obtemos

$$q - q_0 = Q_2 m^2 + Q_4 m^4 + O(m^6) \quad , \quad (\text{F.43})$$

onde

$$Q_2 = \frac{(\beta J_0)^2 \Gamma}{1 - (\beta J)^2 \Gamma} \quad , \quad (\text{F.44})$$

e

$$Q_4 = \frac{(\beta J)^2 (\beta J_0)^4 \gamma \Gamma}{2(1 - (\beta J)^2 \Gamma)^2} \quad . \quad (\text{F.45})$$

Expansão até quinta ordem da Eq. (4.18)

Vamos considerar inicialmente a expansão de Taylor até quinta ordem da Eq. (4.18) em torno de $m = 0$ e $q = q_0$

$$\begin{aligned}
 m = & \left. \frac{\partial M}{\partial q} \right|_0 (q - q_0) + \left. \frac{\partial M}{\partial m} \right|_0 m + \frac{1}{2} \left[\left. \frac{\partial^2 M}{\partial q^2} \right|_0 (q - q_0)^2 + \right. \\
 & \left. 2 \left. \frac{\partial^2 M}{\partial q \partial m} \right|_0 (q - q_0)m + \left. \frac{\partial^2 M}{\partial m^2} \right|_0 m^2 \right] + \frac{1}{6} \left[\left. \frac{\partial^3 M}{\partial q^3} \right|_0 (q - q_0)^3 + \right. \\
 & \left. 3 \left. \frac{\partial^3 M}{\partial q^2 \partial m} \right|_0 (q - q_0)^2 m + 3 \left. \frac{\partial^3 M}{\partial q \partial m^2} \right|_0 (q - q_0)m^2 + \left. \frac{\partial^3 M}{\partial m^3} \right|_0 m^3 \right] \\
 & + \frac{1}{6} \left. \frac{\partial^3 M}{\partial m^3} \right|_0 m^3 + \frac{1}{6} \left. \frac{\partial^4 M}{\partial q \partial m^3} \right|_0 (q - q_0)m^3 + \frac{1}{24} \left. \frac{\partial^4 M}{\partial m^4} \right|_0 m^4 + \frac{1}{120} \left. \frac{\partial^5 M}{\partial m^5} \right|_0 m^5, \quad (F.46)
 \end{aligned}$$

onde só aparecem os termos até quinta ordem em m , levando em consideração que $(q - q_0)$ é da ordem de m^2 . Vamos agora calcular cada derivada separadamente, utilizando as derivadas gerais (F.10) e (F.11).

Cálculo de $\left. \frac{\partial M}{\partial m} \right|_0$

Utilizando as Eqs. (F.3) e (F.11), a derivada de M com relação a m é dada por

$$\frac{\partial M}{\partial m} = \sum_{i=-,0,+} p_i \frac{\partial u_1^i}{\partial m} = \beta J_0 \sum_{i=-,0,+} p_i [1 - u_2^i] \quad (F.47)$$

Considerando $m = 0$, $q = q_0$ e $p_+ = p_- = (1 - p_0)/2$, vemos que $u_2^+ = u_2^-$. Então

$$\left. \frac{\partial M}{\partial m} \right|_0 = \beta J_0 [1 - \rho_1^+(q_0) + p_0(\rho_1^+(q_0) - \rho_1^0(q_0))] \quad (F.48)$$

onde $\rho_k^i(q_0)$ é dado pela Eq. (F.14).

Cálculo de $\left. \frac{\partial M}{\partial q} \right|_0$

Utilizando as Eqs. (F.3) e (F.11), a derivada de M com relação a q fica

$$\frac{\partial M}{\partial q} = \sum_{i=-,0,+} p_i \frac{\partial u_1^i}{\partial q} = -(\beta J)^2 \sum_{i=-,0,+} p_i [u_1^i - u_3^i] \quad (F.49)$$

a partir da Eq. (F.22), vemos que

$$\left. \frac{\partial M}{\partial m} \right|_0 = 0 \quad , \quad (\text{F.50})$$

quando fizermos $m = 0$, $q = q_0$ e $p_+ = p_- = (1 - p_0)/2$.

Cálculo de $\left. \frac{\partial^2 M}{\partial q^2} \right|_0$

Derivando a Eq. (F.49) com relação a q temos

$$\frac{\partial^2 M}{\partial q^2} = -(\beta J)^4 \sum_{i=-,0,+} p_i [-4u_1^i + 10u_3^i - 6u_5^i] \quad , \quad (\text{F.51})$$

que se anula quando fizermos $m = 0$, $q = q_0$ e $p_+ = p_- = (1 - p_0)/2$.

Cálculo de $\left. \frac{\partial^2 M}{\partial m \partial q} \right|_0$

Derivando (F.47) com relação a q , temos

$$\frac{\partial^2 M}{\partial m \partial q} = -(\beta J_0)(\beta J)^2 \sum_{i=-,0,+} p_i [1 - 4u_2^i + 3u_4^i] \quad , \quad (\text{F.52})$$

e fazendo $m = 0$, $q = q_0$ e $p_+ = p_- = (1 - p_0)/2$, ficamos com

$$\left. \frac{\partial^2 M}{\partial m \partial q} \right|_0 = -(\beta J_0)(\beta J)^2 \Gamma \quad . \quad (\text{F.53})$$

Cálculo de $\left. \frac{\partial^2 M}{\partial m^2} \right|_0$

Derivando (F.47) com relação a m , temos

$$\frac{\partial^2 M}{\partial m^2} = -2(\beta J_0)^2 \sum_{i=-,0,+} p_i [u_1^i - u_3^i] \quad , \quad (\text{F.54})$$

e fazendo $m = 0$, $q = q_0$ e $p_+ = p_- = (1 - p_0)/2$, ficamos com

$$\left. \frac{\partial^2 M}{\partial m^2} \right|_0 = 0 \quad . \quad (\text{F.55})$$

Cálculo de $\left. \frac{\partial^3 M}{\partial m^3} \right|_0$

Derivando (F.54) com relação a m , temos

$$\frac{\partial^3 M}{\partial m^3} = -2(\beta J_0)^3 \sum_{i=-,0,+} p_i [1 - 4u_2^i + 3u_4^i] \quad , \quad (\text{F.56})$$

e fazendo $m = 0$, $q = q_0$ e $p_+ = p_- = (1 - p_0)/2$, ficamos com

$$\left. \frac{\partial^3 M}{\partial m^3} \right|_0 = -2(\beta J_0)^3 \Gamma \quad . \quad (\text{F.57})$$

Cálculo de $\left. \frac{\partial^4 M}{\partial m^4} \right|_0$

Derivando (F.56) com relação a m , temos

$$\frac{\partial^4 M}{\partial m^4} = -4(\beta J_0)^4 \sum_{i=-,0,+} p_i [-4u_1^i + 10u_3^i - 6u_5^i] \quad , \quad (\text{F.58})$$

que se anula quando fizermos $m = 0$, $q = q_0$ e $p_+ = p_- = (1 - p_0)/2$.

Cálculo de $\left. \frac{\partial^5 M}{\partial m^5} \right|_0$

Derivando (F.58) com relação a m , temos

$$\frac{\partial^5 M}{\partial m^5} = -4(\beta J_0)^5 \sum_{i=-,0,+} p_i [-4 + 34u_2^i - 60u_4^i + 30u_6^i] \quad , \quad (\text{F.59})$$

ou

$$\left. \frac{\partial^5 M}{\partial m^5} \right|_0 = -4(\beta J_0)^5 \gamma \quad . \quad (\text{F.60})$$

Cálculo de $\left. \frac{\partial^3 M}{\partial q^2 \partial m} \right|_0$

Derivando (F.52) com relação a q , temos

$$\frac{\partial^3 M}{\partial q^2 \partial m} = -(\beta J_0)(\beta J)^4 \sum_{i=-,0,+} p_i [-4 + 34u_2^i - 60u_4^i + 30u_6^i] \quad , \quad (\text{F.61})$$

ou

$$\left. \frac{\partial^3 M}{\partial q^2 \partial m} \right|_0 = -(\beta J_0)(\beta J)^4 \gamma \quad . \quad (\text{F.62})$$

Cálculo de $\left. \frac{\partial^3 M}{\partial q \partial m^2} \right|_0$

Derivando (F.52) com relação a m , temos

$$\frac{\partial^3 M}{\partial q \partial m^2} = -(\beta J_0)^2 (\beta J)^2 \sum_{i=-,0,+} p_i [-4u_1^i + 10u_3^i - 6u_5^i] \quad , \quad (\text{F.63})$$

ou

$$\left. \frac{\partial^3 M}{\partial q^2 \partial m} \right|_0 = 0 \quad . \quad (\text{F.64})$$

Cálculo de $\left. \frac{\partial^4 M}{\partial q \partial m^3} \right|_0$

Derivando (F.63) com relação a m , temos

$$\frac{\partial^4 M}{\partial q \partial m^3} = -2(\beta J_0)^3 (\beta J)^2 \sum_{i=-,0,+} p_i [-4 + 34u_2^i - 60u_4^i + 30u_6^i] \quad , \quad (\text{F.65})$$

ou

$$\left. \frac{\partial^4 M}{\partial q \partial m^3} \right|_0 = -2(\beta J_0)^3 (\beta J)^2 \gamma \quad . \quad (\text{F.66})$$

Expansão da equação da magnetização

Substituindo as derivadas acima na Eq. (F.46) e usando a Eq. (F.43), ficamos com

$$m = A_1 m + A_3 m^3 + A_5 m^5 + O(m^7) \quad , \quad (\text{F.67})$$

onde

$$A_1 = \beta J_0 (1 - q_0) \quad , \quad (\text{F.68})$$

$$A_3 = -\frac{(\beta J_0)^3}{3} \left[\frac{1 + 2(\beta J)^2 \Gamma}{1 - (\beta J)^2 \Gamma} \right] \Gamma \quad , \quad (\text{F.69})$$

$$A_5 = -\gamma \frac{(\beta J_0)^5}{30} \left[\frac{1 + 8(\beta J)^2 \Gamma + 36(\beta J)^4 \Gamma^2 + 15(\beta J)^6 \Gamma^3}{(1 - (\beta J)^2 \Gamma)} \right] \quad (\text{F.70})$$

Apêndice G

Equivalência das condições para fronteiras críticas na expansão de Landau e na expansão da equação da magnetização

Em geral, quando estamos resolvendo problemas de física estatística de sistemas magnéticos, tratamos com uma energia livre da forma

$$f(m) = \frac{1}{2}m^2 - g(m) \quad , \quad (\text{G.1})$$

onde $f(m)$ deve ser minimizada em relação ao parâmetro m , que representa a magnetização local. A minimização fornece uma equação de estado

$$f'(m) = 0 \Rightarrow m = g'(m) \quad , \quad (\text{G.2})$$

onde $g'(m)$ é uma função ímpar na ausência de campos magnéticos. Desta forma, sempre existe uma solução trivial dada por $m = 0$. A situação torna-se mais interessante quando surge uma solução não trivial ($m \neq 0$), representando uma fase ordenada.

A expansão de Landau para a energia livre (G.1) pode ser escrita na forma

$$f(m) = Am^2 + Bm^4 + Cm^6 + O(m^8) \quad . \quad (\text{G.3})$$

As condições para obtermos as fronteiras críticas a partir da Eq. (G.3) são discutidas em vários livros textos como o Huang¹³⁶, por exemplo. Assim, temos

1. As transições de segunda ordem são dadas pelas condições $A = 0$, $B > 0$ e $C > 0$.
2. As linhas de primeira ordem ocorrem quando $A > 0$, $B < 0$ e $C > 0$.
3. Quando os dois tipos de transições estão presentes, a fronteira de segunda ordem e a de primeira ordem se juntam em um ponto tricrítico^{133,136}, o qual define o limite de validade das expansões em série; a partir do ponto tricrítico a magnetização é descontínua. A localização de tal ponto é obtida fazendo $A = B = 0$ e $C > 0$.

Observando a Eq. (G.1), vemos que os coeficientes A , B e C podem ser expressos como

$$\begin{aligned}
 A &= \frac{1}{2}(1 - g^{(2)}(0)) \quad , \\
 B &= -\frac{1}{24}g^{(4)}(0) \quad , \\
 C &= -\frac{1}{120}g^{(6)}(0) \quad ,
 \end{aligned}
 \tag{G.4}$$

onde $g^{(n)}(0)$ indica a n -ésima derivada com relação a m , calculada em $m = 0$. Por outro lado, quando expandimos o parâmetro de ordem para pequenos valores de m , obtemos da Eq. (G.2),

$$m = A_1 m + A_3 m^3 + A_5 m^5 + \dots \quad , \tag{G.5}$$

onde

$$\begin{aligned}
 A_1 &= g^{(2)}(0) \quad , \\
 A_3 &= \frac{1}{6}g^{(4)}(0) \quad , \\
 A_5 &= \frac{1}{24}g^{(6)}(0) \quad .
 \end{aligned}
 \tag{G.6}$$

Utilizando as condições 1., 2., 3. e as Eqs. (G.4) e (G.6), vemos que as fronteiras críticas podem ser obtidas examinando os coeficientes A_1 , A_2 e A_3 . Assim, as fronteiras críticas podem ser obtidas a partir da expansão da equação da magnetização:

- As transições contínuas (ou de segunda ordem) são dadas pelas condições $A_1 = 1$ e $A_3 < 0$.

- As transições de primeira ordem ocorrem quando $A_1 = 1$ e $A_3 > 0$; a linha de coexistência de fases, nesse caso, é determinada através de uma construção de Maxwell, ou, igualando as energias livres das duas soluções.
- Quando os dois tipos de transições estão presentes, a fronteira de segunda ordem e a de primeira ordem se juntam em um ponto tricrítico que é obtido através das condições $A_1 = A_3 = 0$ e $A_5 < 0$.

Bibliografia

- ¹ K. Binder e A. Young, *Rev. Mod. Phys.* **58**, 801 (1986).
- ² M. A. Ruderman e C. Kittel, *Phys. Rev.* **96**, 99 (1954).
- ³ T. Kasuya, *Prog. Theor. Phys.* **55**, 1049 (1956).
- ⁴ K. Yosida, *Phys. Rev.* **106**, 893 (1957).
- ⁵ J. Hertz, *Phys. Scripta* T10, 1 (1985).
- ⁶ D. Chowdhury e A. Mookerjee, *Phys. Rep.* **114**, 1 (1986).
- ⁷ M. Mézard, G. Parisi e M. Virasoro, *Spin Glass Theory and Beyond* (World Scientific, Singapore, 1987).
- ⁸ K. Fischer e J. Hertz, *Spin Glasses* (Cambridge University Press, Cambridge, 1991).
- ⁹ *Spin Glasses and Random Fields*, editado por A. P. Young (World Scientific, Singapore, 1997).
- ¹⁰ V. Cannella e J. A. Midosh, *Phys. Rev. B* **6**, 4220 (1972).
- ¹¹ S. F. Edwards e P. W. Anderson, *J. Phys. F* **5**, 965 (1975).
- ¹² D. Sherrington e S. Kirkpatrick, *Phys. Rev. Lett.* **35**, 1792 (1975).
- ¹³ J. R. L. de Almeida e D. J. Thouless, *J. Phys. A* **11**, 983 (1978).
- ¹⁴ G. Parisi, *Phys. Rev. Lett.* **43**, 1754 (1979).

- ¹⁵ G. Parisi, *J. Phys. A* **13**, L115,1101,1887 (1980).
- ¹⁶ G. Parisi, *Phys. Rev. Lett.* **50**, 1946 (1983).
- ¹⁷ C. de Dominicis e I. Kondor, *Phys. Rev. B* **27**, 606 (1983).
- ¹⁸ E. Marinari, G. Parisi e J. J. Ruiz-Lorenzo, em *Spin Glasses and Random Fields*, editado por A. P. Young (World Scientific, Singapore, 1998), pp. 59-98.
- ¹⁹ D. J. Thouless, P. W. Anderson e R. G. Palmer, *Philos. Mag.* **55**, 593 (1977).
- ²⁰ L. Onsager, *J. Am. Chem. Soc.* **58**, 1486 (1936).
- ²¹ C. de Dominicis, M. Gabay, T. Garel e H. Orland, *J. Physique* **41**, 923 (1980).
- ²² A. J. Bray e M. A. Moore, *J. Phys. C* **13**, L469 (1980).
- ²³ F. Tanaka e S. F. Edwards, *J. Phys. F* **10**, 2471 (1980).
- ²⁴ M. Mézard, G. Parisi, N. Sourlas, G. Toulouse e M. Virasoro, *Phys. Rev. Lett.* **52**, 1156 (1984).
- ²⁵ M. Mézard, G. Parisi, N. Sourlas, G. Toulouse e M. Virasoro, *J. Physique* **45**, 843 (1984).
- ²⁶ R. Rammal, G. Toulouse e M. A. Virasoro, *Rev. Mod. Phys.* **58**, 765 (1986).
- ²⁷ C. D. Dominicis, I. Kondor e T. Temesvári, em *Spin Glasses and Random Fields*, editado por A. P. Young (World Scientific, Singapore, 1998), pp. 119-160.
- ²⁸ C. M. Newman e D. L. Stein, *Phys. Rev. Lett.* **76**, 515 (1996).
- ²⁹ S. Kirkpatrick, C. D. Gelatt e M. P. Vecchi, *Science* **220**, 671 (1983).
- ³⁰ Y. Fu e P. W. Anderson, *J. Phys. A: Math. and Gen.* **19**, 1605 (1986).
- ³¹ J. J. Hopfield, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **79**, 2554 (1982).

- ³² T. Garel, H. Orland e E. Pitard, em *Spin Glasses and Random Fields*, editado por A. P. Young (World Scientific, Singapore, 1998), pp. 387–443.
- ³³ D. S. Fisher e D. A. Huse, *Phys. Rev. Lett.* **56**, 1601 (1986).
- ³⁴ D. S. Fisher e D. A. Huse, *J. Phys. A* **20**, L1006 (1988).
- ³⁵ D. S. Fisher e D. A. Huse, *Phys. Rev. B* **38**, 386 (1988).
- ³⁶ M. A. Moore, H. Bokil e B. Drossel, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 4252 (1998).
- ³⁷ H. Bokil, A. J. Bray, B. Drossel e M. A. Moore, *Phys. Rev. Lett.* **82**, 5177 (1999).
- ³⁸ B. Drossel, H. Bokil, M. A. Moore e A. J. Bray, preprint cond-mat/9905354.
- ³⁹ E. Marinari, G. Parisi, J. J. Ruiz-Lorenzo e F. Zuliani, *Phys. Rev. Lett.* **82**, 5176 (1999).
- ⁴⁰ E. Marinari, G. Parisi, F. Ricci-Tersenghi, J. J. Ruiz-Lorenzo e F. Zuliani, preprint cond-mat/9906076.
- ⁴¹ J. D. Reger, R. N. Bhatt e A. P. Young, *Phys. Rev. Lett.* **64**, 1859 (1990).
- ⁴² E. R. Grannan e R. E. Hetzel, *Phys. Rev. Lett.* **67**, 907 (1991).
- ⁴³ G. Parisi e F. Ritort, *J. Phys. A* **26**, 6711 (1993).
- ⁴⁴ J. C. Ciria, G. Parisi e F. Ritort, *J. Phys. A* **26**, 6731 (1993).
- ⁴⁵ A. Cacciuto, E. Marinari e G. Parisi, *J. Phys. A* **30**, L263 (1999).
- ⁴⁶ Y. Imry e S. K. Ma, *Phys. Rev. Lett.* **35**, 1399 (1975).
- ⁴⁷ W. Selke, em *Phase Transitions and Critical Phenomena*, editado por C. Domb e J. Lebowitz (Academic Press, New York, 1992).
- ⁴⁸ S. Fishman e A. Aharony, *J. Phys. C* **12**, L729 (1979).

- ⁴⁹ J. Cardy, *Phys. Rev. B* **29**, 505 (1984).
- ⁵⁰ S. M. Rezende, F. C. Montenegro, U. A. Leitão e M. D. Coutinho-Filho, em *New Trends in Magnetism*, editado por M. D. Coutinho-Filho e S. M. Rezende (World Scientific, Singapore, 1989).
- ⁵¹ V. Jaccarino e A. R. King, em *New Trends in Magnetism*, editado por M. D. Coutinho-Filho e S. M. Rezende (World Scientific, Singapore, 1989).
- ⁵² F. C. Montenegro, U. A. Leitão, M. D. Coutinho-Filho e S. M. Rezende, *J. Appl. Phys.* **67**, 5243 (1990).
- ⁵³ F. C. Montenegro, A. R. King, V. Jaccarino, S.-J. Han e D. P. Belanger, *Phys. Rev. B* **44**, 2155 (1991).
- ⁵⁴ D. P. Belanger e A. P. Young, *J. Magn. Magn. Mat.* **100**, 272 (1991).
- ⁵⁵ D. P. Belanger, em *Spin Glasses and Random Fields*, editado por A. P. Young (World Scientific, Singapore, 1998), pp. 251-275.
- ⁵⁶ K. Walasek, K. Lukierska-Walasek e M. Wodawski, *Acta Phys. Pol. A* **92**, 407 (1997).
- ⁵⁷ L. D. Cesare, K. Lukierska-Walasek, I. Rabuffo e K. Walasek, *Acta Phys. Pol. A* **92**, 411 (1997).
- ⁵⁸ F. da Costa, C. Yokoi e F. Nobre, *J. Phys. A: Math. Gen.* **30**, 2317 (1997).
- ⁵⁹ F. A. da Costa, C. S. O. Yokoi e S. R. Salinas, *J. Phys. A: Math. Gen.* **27**, 3365 (1994).
- ⁶⁰ J. J. Arenzon, M. Nicodemi e M. Sellito, *J. de Physique I* **6**, 1143 (1996).
- ⁶¹ M. Sellito, M. Nicodemi e J. Arenzon, *J. de Physique I* **7**, 945 (1997).
- ⁶² E. A. Lutchinskaia e E. E. Tareyeva, *Phys. Rev. B* **52**, 366 (1995).

- ⁶³ L. D. Cesare, K. Lukierska-Walasek, I. Rabuffo e K. Walasek, *Phys. Rev. B* **54**, 15892 (1996).
- ⁶⁴ G. R. Schreiber, *Eur. Phys. J. B* **9**, 479 (1999).
- ⁶⁵ S. Inawashiro, N. E. Frankel e C. J. Thompson, *Phys. Rev. B* **24**, 6532 (1981).
- ⁶⁶ S. Inawashiro, N. E. Frankel e C. J. Thompson, *Phys. Rev. B* **24**, 6542 (1981).
- ⁶⁷ S. Inawashiro, N. E. Frankel e C. J. Thompson, *Phys. Rev. B* **26**, 379 (1982).
- ⁶⁸ S. Inawashiro, N. E. Frankel e C. J. Thompson, *J. Mag. Mag. Mat.* **31-34**, 1297 (1983).
- ⁶⁹ C. J. Thompson, S. Inawashiro e N. E. Frankel, *Prog. Theor. Phys.* **87**, 155 (1986).
- ⁷⁰ E. A. Lutchinskaya, V. N. Ryzhov e E. E. Tareyeva, *J. Phys. C: Solid State Phys.* **17**, L665 (1984).
- ⁷¹ T. K. Kopeć, *Phys. Rev. B* **48**, 15658 (1993).
- ⁷² T. K. Kopeć, *Phys. Rev. B* **48**, 3698 (1993).
- ⁷³ K. Walasek, *Phys. Rev. B* **51**, 9314 (1995).
- ⁷⁴ P. Mottishaw, *Europ. Lett.* **1**, 409 (1986).
- ⁷⁵ K. Walasek, *J. Phys. A: Math Gen.* **28**, L497 (1995).
- ⁷⁶ B. Derrida, *Phys. Rev. Lett.* **45**, 79 (1980).
- ⁷⁷ B. Derrida, *Phys. Rev. B* **24**, 2613 (1981).
- ⁷⁸ U. T. Höchli, K. Knorr e A. Loidl, *Adv. Phys.* **39**, 409 (1990).
- ⁷⁹ K. Binder e J. D. Reger, *Adv. Phys.* **41**, 547 (1992), see also K. Binder in Ref.⁹.
- ⁸⁰ R. Pirc, B. Tadić e R. Blinc, cond-mat/9512129.
- ⁸¹ Y. Lin e N. S. Sullivan, *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* **142**, 141 (1987).

- ⁸² K. Binder, em *Spin Glasses and Random Fields* (World Scientific, Singapore, 1997), pp. 99-118.
- ⁸³ B. Tadić, R. B. R. Pirc, J. Petersson e W. Wiotte, *Phys. Rev. B* **50**, 9824 (1994).
- ⁸⁴ E. Courtens, *J. Phys. Lett.-Paris* **43**, L119 (1982).
- ⁸⁵ E. Courtens, *Ferroelectrics* **72**, 229 (1987).
- ⁸⁶ T. K. Kopeć, *Phys. Rev. B* **48**, 16792 (1993).
- ⁸⁷ E. A. Lutchinskaya e E. E. Tareeva, *Teor. Mat. Fiz.* **90**, 273 (1992).
- ⁸⁸ M. Blume, V. Emery e R. Griffiths, *Phys. Rev. A* **4**, 1071 (1971).
- ⁸⁹ M. Kaufman, R. B. Griffiths, J. M. Yeomans e M. E. Fisher, *Phys. Rev. B* **23**, 3448 (1981).
- ⁹⁰ J. de Araújo, F. A. da Costa e F. D. Nobre, *Eur. Phys. J. B*, **aceito para publicação**, a saber (2000).
- ⁹¹ D. Sherrington, *J. Phys. A* **13**, 637 (1980).
- ⁹² S. K. Ghatak e D. Sherrington, *J. Phys. C: Solid State Phys.* **10**, 3149 (1977).
- ⁹³ E. J. S. Lage e J. R. L. de Almeida, *J. Phys. C: Solid State Phys.* **15**, L1187 (1982).
- ⁹⁴ P. M. D. Sherrington, *J. Phys. C: Solid State Phys* **18**, 5201 (1985).
- ⁹⁵ T. Kirkpatrick e D. Thirumalai, *Phys. Rev. Lett.* **58**, 2091 (1987).
- ⁹⁶ T. Kirkpatrick e D. Thirumalai, *Phys. Rev. B* **36**, 5388 (1987).
- ⁹⁷ D. Gross e M. Mezard, *Nuc. Phys. B* **240**, 431 (1984).
- ⁹⁸ B. Derrida e G. Toulouse, *J. de Physique Lett.* **46**, 223 (1985).
- ⁹⁹ E. Gardner, *Nuc. Phys. B* **257**, 747 (1985).

- ¹⁰⁰ H. Horner, *Z. Phys. B* **57**, 29 (1984).
- ¹⁰¹ J. P. Bouchaud, L. F. Cugliandolo, J. Kurchan e M. Mézard, em *Spin Glasses and Random Fields*, editado por A. P. Young (World Scientific, Singapore, 1998), pp. 161–223.
- ¹⁰² L. D. Cesare, K. Lukierska-Walasek, I. Rabuffo e K. Walasek, *J. Phys. A: Math. Gen.* **29**, 1605 (1996).
- ¹⁰³ T. K. Kopeć, *J. Phys. A: Math. Gen.* **29**, L49 (1996).
- ¹⁰⁴ J. de Araújo, F. A. da Costa e F. D. Nobre, *J. Phys. A: Math. and Gen.*, **aceito para publicação**, a saber (2000).
- ¹⁰⁵ H. B. Callen, *Thermodynamics and an Introduction to Thermostatistics*, 2nd ed. (John Wiley and Sons, Inc., New York, 1985).
- ¹⁰⁶ D. P. Belanger, em *Recent Progress in Random Magnets*, editado por D. H. Ryan (World Scientific, Singapore, 1992), pp. 277–308.
- ¹⁰⁷ T. Schneider e P. Pytte, *Phys. Rev. B* **15**, 1519 (1977).
- ¹⁰⁸ A. Aharony, *Phys. Rev. B* **18**, 3318 (1978).
- ¹⁰⁹ S. R. Salinas e W. F. Wreszinski, *J. Stat. Phys.* **41**, 299 (1985).
- ¹¹⁰ D. C. Mattis, *Phys. Rev. Lett.* **55**, 3009 (1985).
- ¹¹¹ M. Kaufman, P. E. Klunzinger e A. Khurana, *Phys. Rev. B* **34**, 4766 (1986).
- ¹¹² H. Rieger e A. P. Young, *J. Phys. A* **26**, 5279 (1993).
- ¹¹³ H. Rieger, *Phys. Rev. B* **52**, 6659 (1995).
- ¹¹⁴ M. Gofman, J. Adler, A. Aharony, A. B. Harris e M. Schwartz, *Phys. Rev. B* **53**, 6362 (1996).

- ¹¹⁵ M. R. Swift, A. J. Bray, A. Maritan e J. R. Banavar, *Europhys. Lett.* **38**, 273 (1997).
- ¹¹⁶ E. Brézin e C. D. Dominicis, *Europhys. Lett.* **44**, 13 (1998).
- ¹¹⁷ E. Brézin e C. D. Dominicis, *C.R. Acad. Sci. II B327*, 383 (1999).
- ¹¹⁸ M. Mézard e A. P. Young, *Europhys. Lett.* **18**, 653 (1992).
- ¹¹⁹ C. D. Dominicis, H. Orland e T. Temesvári, *J. Phys. I (France)* **5**, 987 (1995).
- ¹²⁰ R. Pirc, B. Tadić e R. Blinc, *Z. Phys. B* **61**, 69 (1985).
- ¹²¹ R. Pirc, B. Tadić e R. Blinc, *Phys. Rev. B* **36**, 8607 (1987).
- ¹²² A. Levstik, C. Filipi, Z. Kutnjak, I. Levstik, R. Pirc, B. Tadić e R. Blinc, *Phys. Rev. Lett.* **66**, 2368 (1991).
- ¹²³ R. Pirc, B. Tadić e R. Blinc, *Physica A* **185**, 322 (1992).
- ¹²⁴ R. Pirc, R. Blinc e W. Wiotte, *Physica A* **182**, 137 (1992).
- ¹²⁵ Y. Ma, C. Gong e Z. Li, *Phys. Rev. B* **43**, 8665 (1991).
- ¹²⁶ R. F. Soares, F. D. Nobre e J. R. L. de Almeida, *Phys. Rev. B* **50**, 6151 (1994).
- ¹²⁷ E. Nogueira, F. D. Nobre, F. da Costa e S. Coutinho, *Phys. Rev. E* **57**, 5079 (1998),
errata: *Phys. Rev. E*, **60**, 2429 (1999).
- ¹²⁸ S. R. Vieira, F. D. Nobre e C. S. O. Yokoi, *Effects of Random Fields in an Antiferromagnetic Ising Spin Glass*, 1999, preprint.
- ¹²⁹ D. Bertrand, A. R. Fert, M. C. Schmidt e S. Legrand, *J. Phys. C* **15**, L883 (1982).
- ¹³⁰ P. zen Wong, S. von Molnar, T. T. M. Palstra, J. A. Mydosh, H. Yoshizawa, S. M. Shapiro e A. Ito, *Phys. Rev. Lett.* **55**, 2043 (1985).
- ¹³¹ P. zen Wong, H. Yoshizawa e S. M. Shapiro, *J. Appl. Phys.* **57**, 3462 (1985).

- ¹³² J. de Araújo, F. D. Nobre e F. A. da Costa, Phys. Rev. E, **aceito para publicação**, a saber (2000).
- ¹³³ I. D. Lawrie e S. Sarbach, em *Phase Transitions and Critical Phenomena*, editado por C. Domb e J. L. Lebowitz (Academic Press, London, 1984), Vol. 9.
- ¹³⁴ R. B. Griffiths, Phys. Rev. B **12**, 345 (1975).
- ¹³⁵ J. Kushhauer e W. Kleemann, J. Magn. Magn. Mat. **140-144**, 1551 (1995).
- ¹³⁶ K. Huang, *Statistical Mechanics*, 2nd ed. (John Wiley and Sons, Inc., New York, 1987).