

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
INSTITUTO DE FÍSICA

**ALEATORIEDADE EM MODELOS DE
ISING**

ROMERO TAVARES DA SILVA



Tese de Doutorado
submetida ao Instituto de Física
da Universidade de São Paulo

Silvio Roberto de Azevedo Salinas
Orientador: Prof. Dr. Silvio Roberto de Azevedo Salinas

Ebenezer R.C.

São Paulo
1993

SBI-IFUSP



305M810T1996

530 15
S586a
D
e.1

FICHA CATALOGRÁFICA

Preparada pelo Serviço de Biblioteca e Informação
do Instituto de Física da Universidade de São Paulo

Silva, Romero Tavares da
Aleatoriedade em modelos de Ising. São Paulo,
1992.

Tese (Doutorado) - Universidade de São Paulo. Insti-
tuto de Física. Departamento de Física Experimental.
Área de Concentração: Física do Estado Sólido
Orientador: Prof^o Dr^o Silvio Roberto Azevedo
Salinas

Unitermos: 1. Mecânica estatística; 2. Aleatorieda-
de; 3. Diluição de sítios e ligações; 4. Campo médio
dinâmico; 5. Vidros de spins.

USP/IF/SBI - 47/92

Para os meus filhos : Felipe , Juliana e Ana Carolina.

Quem não sonha o azul do vôo , perde o seu poder
de pássaro.

Thiago de Mello

Agradecimentos

◇ À minha companheira Mércia, por ter me incentivado e apoiado, desde antes que eu assumisse esse projeto, até a sua conclusão

◇ Ao meu filho Felipe, pelo amor que me deu em tempos difíceis; à minha filha Juliana, pela delicadeza e carinho que me dedicou e à minha filha Ana Carolina, por ter me impelido a inúmeras mudanças

◇ Aos irmãos Ana Cristina e Alexandre, e aos amigos Germana, Eduardo e Eugênio pela amizade fraterna e cúmplice

◇ Ao Jairo, pela confiança e incentivo

◇ À Vera Lúcia, que me ajudou a atravessar um rio de águas turbulentas

◇ Ao Prof Salinas pela orientação segura e competente

◇ Aos Profs Nestor Caticha, Carlos Yokoi e Mário de Oliveira pela disponibilidade e as discussões elucidativas

◇ Aos amigos que encontrei no IFUSP, pelo convívio agradável

◇ Aos colegas do DF/UFPB que apoiaram a minha permanência no IFUSP

◇ À CAPES pelo apoio financeiro

Resumo

Na primeira parte deste trabalho propomos uma aproximação de campo médio dinâmico para analisar modelos de Ising com elementos de aleatoriedade definidos por distribuições de probabilidades discretas. Analisamos o modelo com campo aleatório ($S = 1/2$), com interações aleatórias ($S = 1/2$), com diluição de sítios ($S = 1/2$) e com anisotropia aleatória ($S = 1$), obtendo os respectivos diagramas de fases.

Na segunda parte analisamos modelos de vidros de spin ($S = 3/2$) com anisotropia de campo cristalino. Estudamos o modelo de van Hemmen, e o modelo clássico *à la* Sherrington e Kirkpatrick dentro do esquema de réplicas simétricas, obtendo os diagramas de fases correspondentes.

Abstract

In the first part of this work we propose a dynamical mean field approximation to analyse Ising models with elements of randomness, defined by discrete probability functions. We have analysed the random field model ($S = 1/2$); the random bond model ($S = 1/2$); the site diluted model ($S = 1/2$) and the random crystal field model ($S = 1$), obtaining the respective phase diagrams.

In the second part we have analysed spin-glass models ($S = 3/2$) in the presence of a crystal field. We have studied the van Hemmen and the classic spin glass model *à la* Sherrington and Kirkpatrick, using replica symmetric scheme, to obtain the corresponding phase diagrams.

Índice

1	Introdução	1
2	Rede de Bethe	8
2.1	Campo aleatório	14
2.2	Anisotropia aleatória	17
3	Campo médio dinâmico	22
3.1	Modelo de Ising ferromagnético	24
3.2	Modelo de Ising com campo aleatório	29
3.3	Modelo de Ising com interações aleatórias . . .	34
3.4	Modelo de Ising com diluição aleatória de sítios	39
3.5	Modelo de Ising com anisotropia aleatória . . .	41
4	Modelo de Ising com spin $S = 3/2$	55
4.1	Caso puro - solução de campo médio	56
4.2	O modelo de van Hemmen	60
4.3	O modelo de Hopfield	67
4.4	Vidro de spins com réplicas simétricas	73
5	Sistemas desordenados de tamanho finito	89
5.1	Modelo com anisotropia aleatória	89
5.2	Modelo com interações aleatórias	91

6	Considerações finais	93
A	Rede de Bethe	96
A.1	Campo aleatório	96
A.2	Anisotropia aleatória	97
B	Modelo de Ising ferromagnético	100
B.1	Limite de coordenação infinita	100
C	Modelo de Ising com campo aleatório	103
C.1	Limite de coordenação infinita	103
D	Modelo de Ising com anisotropia aleatória	105
D.1	Limite de coordenação infinita	105
D.2	Expansão em série de potências de m	109

Capítulo 1

Introdução

Os sistemas magnéticos com elementos de aleatoriedade têm sido um grande desafio da Mecânica Estatística nos últimos tempos[51, 60].

Inicialmente procurou-se entender os efeitos da diluição de sítios magnéticos sobre o ordenamento de longo alcance. A motivação era estudar como se alteravam as propriedades críticas de um sistema à medida que se alterava concentração de íons magnéticos.

Neste trabalho iremos analisar modelos com elementos de aleatoriedade de vários tipos, com objetivo de traçar os respectivos diagramas de fases. Estudaremos hamiltonianos que envolvem a aleatoriedade definida por uma distribuição de probabilidades discreta (diluição de sítios, de ligações, etc.) e um modelo que tem uma distribuição de probabilidades contínua (Sherrington e Kirkpatrick).

No sentido de simular um sistema magnético diluído foram idealizadas várias propostas teóricas. A mais simples consiste em considerar uma matriz não magnética na qual diluimos, aleatoriamente, impurezas magnéticas, de modo que cada sítio

tem a probabilidade p de conter uma impureza magnética de spin S . Juntamente com a diluição de sítios mencionada, temos a diluição de ligações que é qualitativamente equivalente à primeira.

Um sistema ferromagnético com diluição, está intimamente relacionado ao problema de percolação. Mesmo a uma temperatura $T = 0$, existe uma concentração mínima p_c de íons magnéticos, abaixo da qual não existe ordem de longo alcance. Quando a concentração alcança a percolação crítica p_c , passam a existir aglomerados de sítios ligados entre si via interação magnética, com um tamanho da ordem das dimensões do sistema. Dizemos que o sistema percolou, e a partir desta concentração passa a existir um ordenamento magnético, pelo menos em $T = 0$.

Existem vários fenômenos com as características de um problema de percolação e passíveis de serem analisados por um aparato teórico similar: propagação de epidemias, abalos sísmicos, organizações humanas, etc. Eles têm como característica comum o fato de que a partir de determinadas circunstâncias prevalece a ordem de longo alcance. Um outro exemplo curioso é o *go*[19], um jogo oriental milenar. Nesse jogo as peças não se movem e vão sendo colocadas de modo a formarem aglomerados que dominam posições no tabuleiro. O objetivo do jogador é cercar as peças do adversário à medida que une e aumenta os seus aglomerados.

Apesar da simplicidade destes modelos, a sua solução envolve dificuldades técnicas em hamiltonianos com interação de curto alcance, ou cálculos tediosos quando se usa o grupo de renormalização no espaço real [51].

Dentro deste contexto, nós propomos neste trabalho a apro-

ximação de campo médio dinâmico, que alia elementos da simulação de Monte Carlo com a aproximação de campo médio. Essa aproximação é conveniente para se analisar tanto desordens dos tipos mencionados como outras que serão citadas adiante. Nesta proposta usamos o algoritmo do banho térmico para efetuar uma análise auto-consistente da dinâmica de um aglomerado de spins. Os parâmetros de ordem obedecem a equações polinomiais de ordem z , e são apresentados para z genérico.

No Capítulo III usamos a aproximação de campo médio dinâmico para analisar o modelo de Ising com diluição de sítios ($S = 1/2$) e comparamos os resultados com aqueles obtidos através de outras técnicas[22, 59].

Uma das fontes de interesse em sistemas com elementos de aleatoriedade é a possibilidade de analisar os fenômenos multicríticos que vários deles exibem. Analisamos o modelo de Ising com campo aleatório ($S = 1/2$) e o modelo com anisotropia aleatória ($S = 1$), que apresentam ponto tricrítico dependendo do número de coordenação da rede z e da concentração da aleatoriedade.

Estudamos estes dois modelos de duas maneiras. Devido à sua relevância teórica na análise de modelos com aleatoriedade, fazemos no Capítulo II um estudo sobre a rede de Bethe, onde analisamos o modelo com campo aleatório e o modelo com anisotropia aleatória. É conhecida a extrema dificuldade de se resolver numericamente problemas com elementos de aleatoriedade na rede de Bethe[7]. Nós obtivemos as relações de recorrência para z finito, mas o nosso objetivo principal foi encontrar o limite de coordenação infinita dessas equações, que iremos comparar com os resultados obtidos no Capítulo III.

No Capítulo III usamos a aproximação de campo médio dinâmico para estudar os dois modelos mencionados. Para z finito, comparamos os resultados obtidos com aqueles existentes na literatura [24]. No limite de coordenação infinita recuperamos os resultados obtidos no Capítulo II.

Ainda usando a aproximação de campo médio dinâmico analisamos o modelo de Ising com interações aleatórias ($S = 1/2$) também conhecido como modelo $\pm J$ e comparamos os nossos resultados com os existentes[9, 37, 38, 57].

A partir dos trabalhos de Mydosh e Canella[39, 40] houve um aumento no interesse por sistemas que envolvem elementos de aleatoriedade. Os resultados experimentais nesta área surpreenderam por apresentar características que não se enquadravam nos moldes dos materiais conhecidos de então.

As pesquisas nesta área abriram um campo vasto de interesses que vai de redes neurais[20] a problemas de otimização[32], passando por vidros de spins que é a motivação central desde as últimas duas décadas.

Mydosh e Canella encontraram um cúspide agudo na susceptibilidade c.a. em uma temperatura T_f , quando estudaram diversas matrizes metálicas dopadas com impurezas magnéticas (CuMn, AuMn e AuCr) em concentração de 1% até 10%. Chowdhury e Mookerjee[16] citam uma extensa lista de materiais que apresentam este comportamento. Um fato digno de nota é a ausência de qualquer singularidade no calor específico quando $T = T_f$, apesar de ser encontrado um máximo arredondado para temperaturas da ordem de 20% maior que T_f [11].

Experimentalmente esses materiais são obtidos pelo aquecimento da amostra a altas temperaturas e um posterior resfriamento brusco. Em analogia com processos metalúrgicos, este

material é dito temperado. Com um tratamento deste tipo, as impurezas magnéticas são congeladas em posições aleatórias da matriz metálica. Os momentos magnéticos quando em uma matriz metálica polarizam os elétrons de condução desta, que por sua vez influenciam os outros momentos, induzindo um acoplamento efetivo entre eles, chamado interação RKKY (Ruderman-Kittel-Kasuya-Yosida) que tem uma forma do tipo:

$$J(\vec{r}) = J_0 \frac{\cos(2k_F r + \varphi_0)}{(k_F r)^3}$$

quando $r \rightarrow \infty$, onde J_0 e φ_0 são constantes e \vec{k}_F é o vetor de onda de Fermi da matriz metálica.

Vidros de spins são sistemas magnéticos onde as interações entre os momentos magnéticos estão em conflito uma com as outras: as interações são frustradas. Após o trabalho de Toulouse[56] ficou claro que além da aleatoriedade, outro ingrediente fundamental é a frustração. A frustração impede que o sistema encontre a configuração de spins mais favorável, satisfazendo (simultaneamente) todas as interações. Como consequência direta deste fato existe uma infinidade de estados com aproximadamente a mesma energia, mesmo em baixas temperaturas.

Em altas temperaturas, esse sistema é um paramagneto típico, mas existe uma temperatura de congelamento T_f , abaixo da qual os spins estão alinhados ao acaso.

Para explicar o comportamento da susceptibilidade, Edwards e Anderson [23] argumentaram que existem algumas configurações de spins que fornecem um mínimo da energia livre. Estas orientações são tais que a média térmica $\langle S_i \rangle = 0$,

de modo que o sistema não é ferromagnético nem antiferromagnético. Entretanto, à medida que a temperatura diminui, abaixo de T_f , os spins notam a existência destes estados e se fixam em um deles.

Eles propuseram um modelo onde os spins interagem aos pares através de um acoplamento com distribuição de probabilidades gaussianas. Essa é uma maneira, tratável analiticamente, de considerar algumas facetas da interação RKKY e os requisitos fundamentais do vidro de spins: aleatoriedade e frustração.

O modelo de Edwards e Anderson foi resolvido no contexto da aproximação de campo médio por Sherrington e Kirkpatrick [34, 49]. Para contornar dificuldades operacionais eles usaram o método de réplicas, como será mostrado no Capítulo IV. Essa definição envolvia a introdução de parâmetros de ordem que relacionavam mais de uma réplica, e o entendimento mais claro destas questões só veio *a posteriori* com os trabalhos de Parisi[47]. Apesar deste modelo apresentar boa concordância com a experiência, ao reproduzir o cuspide da susceptibilidade, ele falha ao tentar analisar o comportamento do calor específico, fornecendo um comportamento similar ao da susceptibilidade.

Grande parte dos trabalhos em vidros de spins analisaram modelos com $S = 1/2$, pois o interesse maior era o desenvolvimento conceitual e o entendimento dos primeiros princípios desta área. Não obstante, alguns grupos analisaram modelos com $S = 1$ e anisotropia de campo cristalino[18, 25, 42].

Acredita-se que os resultados de um modelo de Ising com spin semi-inteiro na presença de um campo são qualitativamente equivalentes entre si; e o mesmo acontece quanto a um

modelo com spin inteiro em um hamiltoniano que contenha um termo de anisotropia de campo cristalino.

Deparamo-nos com um fato novo ao analisarmos, para spin $S = 3/2$, via campo médio, o hamiltoniano de Ising com interações ferromagnéticas e anisotropia de campo cristalino. Nesta situação esse modelo apresenta uma transição de fases de segunda ordem entre as regiões ferromagnética e paramagnética e de primeira ordem no interior da fase ordenada. O modelo de Ghatak e Sherrington[25] analisado também por Mottishaw e Sherrington[42], teve recentemente uma solução mais clara na região de baixas temperaturas onde ocorre uma transição de fases de primeira ordem[17, 18]. A possibilidade de analisar um modelo de vidro de spins com uma transição de primeira ordem nos motivou a estudar este hamiltoniano com $S = 3/2$ e anisotropia de campo cristalino. No Capítulo IV apresentamos os resultados da análise dos modelos de van Hemmen e de Hopfield, e do modelo de Sherrington e Kirkpatrick para $S = 3/2$, com interações aleatórias e anisotropia de campo cristalino. Fazemos a análise deste último modelo dentro do esquema de Sherrington e Kirkpatrick com simetria entre réplicas.

Capítulo 2

Rede de Bethe

O interesse da Mecânica Estatística na rede de Bethe está relacionado com a sua estrutura simples; esta simplicidade sugere que vários modelos possam ser mais facilmente resolvidos nesta rede do que em outras redes cristalinas mais realísticas. O conceito atual da rede de Bethe teve o seu fundamento na árvore de Cayley.

A árvore de Cayley pode ser imaginada como um sítio central ao qual estão ligados os sítios da primeira geração. Aos sítios desta geração estão ligados os da segunda geração e assim sucessivamente. Ela pode ser entendida como uma rede onde não existem circuitos fechados, como mostra o exemplo da figura 2.1, no qual o número de coordenação é $z = 4$.

Apesar desta característica unidimensional ela apresenta detalhes de uma rede de dimensionalidade maior. Por exemplo: existem z maneiras de sairmos de um certo sítio para o seu vizinho e existem $z - 1$ maneiras de irmos deste segundo sítio para um terceiro. Portanto existem $z(z - 1)^{L-1}$ cadeias de tamanho L que podem ser traçadas a partir de um dado sítio.

Usualmente ao se tomar o limite termodinâmico $N \rightarrow \infty$ em

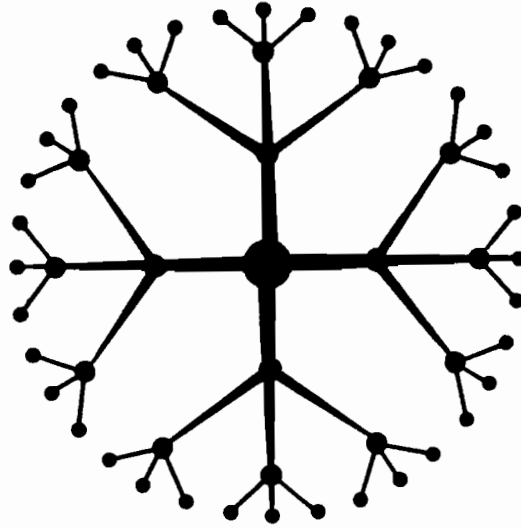


Figura 2.1: A árvore de Cayley.

um sistema físico, os efeitos de borda são desprezados, tendo em vista que o número de sítios da fronteira é muito menor que o número de sítios no interior do sistema. Pode ser mostrado que na árvore de Cayley a relação entre o número de sítios da fronteira e o número de sítios do interior é $(z - 2)/(z - 1)$ quando o número de camadas $\mathcal{N} \rightarrow \infty$. Ou seja: o número de sítios da superfície é comparável ao número de sítios do interior da rede. Este resultado inusitado dá origem a transições de fases peculiares [44].

Vamos mostrar que podemos obter uma relação de recorrência para a magnetização efetiva m_{i+1} da $(i + 1)$ -ésima camada, contada a partir da superfície, com a magnetização efetiva da (i) -ésima camada:

$$m_{i+1} = f(m_i).$$

À medida que i cresce estamos indo para o interior da árvore

de Cayley. Os pontos fixos desta relação, correspondentes a $i \rightarrow \infty$, podem ser entendidos como a magnetização no interior da árvore, ou ainda a magnetização local da árvore de Cayley. Ao analisarmos as propriedades locais da árvore de Cayley para o modelo de Ising obtemos resultados idênticos ao da conhecida aproximação de Bethe[55] - por isso rede de Bethe.

Seja o hamiltoniano definido na árvore de Cayley:

$$\mathcal{H} = - \sum_{(i,j)} J_{ij} S_i S_j - \sum_{i=1}^N H_i S_i,$$

onde N é o número de sítios, (i, j) é a soma sobre os vizinhos mais próximos, J_{ij} é a interação de troca e $S_i = \pm 1$. A função de partição terá a forma (Figura 2.2):

$$\mathcal{Z}_N = \sum_{\{S_0\}} \prod_{i_1=1}^z \sum_{\{S_{i_1}\}} \exp\{B S_0 + K_{0i_1} S_0 S_{i_1}\} Y^{(i_1)}(S_{i_1}),$$

onde $B = \beta H_0$; $K_{0i_1} = \beta J_{0i_1}$ e $Y^{(i_1)}(S_{i_1})$ é a função de partição reduzida, ou seja: é a função de partição de uma rede que engloba a parte da árvore de Cayley com início no sítio i_1 e suas ramificações até a superfície.

Se definirmos:

$$e^{2X_i} = \frac{Y^{(i)}(+1)}{Y^{(i)}(-1)},$$

ou seja:

$$\tanh X_i = \frac{Y^{(i)}(+1) - Y^{(i)}(-1)}{Y^{(i)}(+1) + Y^{(i)}(-1)},$$

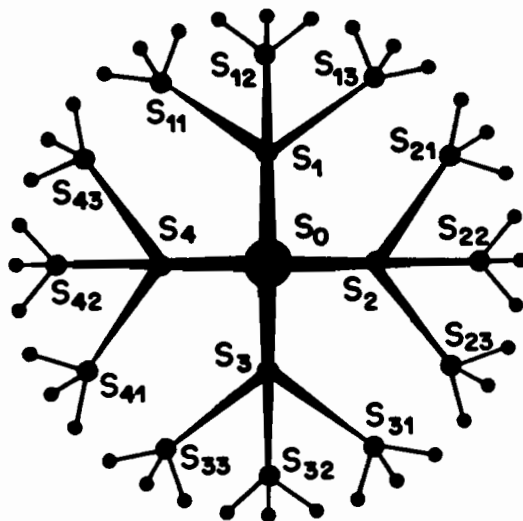


Figura 2.2: A árvore de Cayley onde os rótulos dos spins especificam a ramificação de seu sítio.

encontramos

$$X_{i_1} = B + \sum_{i_2=1}^{z-1} \arctanh\{\tanh(K_{i_1, i_1 i_2})[\tanh(X_{i_1 i_2})]\},$$

onde

$$e^{2X_{i_1 i_2}} = \frac{Y^{(i_1 i_2)}(+1)}{Y^{(i_1 i_2)}(-1)}.$$

Definindo a magnetização do sítio central como:

$$m_0 = \langle S_0 \rangle = \frac{\sum_{\{S_0\}} S_0 e^{-\beta \mathcal{H}}}{\sum_{\{S_0\}} e^{-\beta \mathcal{H}}},$$

teremos

$$m_0 = \tanh\left\{B + \sum_{i=1}^z \operatorname{arctanh}[\tanh(K_{0i}) \tanh(X_i)]\right\}.$$

Considerando as interações de troca uniformes ($J_{ij} = J$), as equações terão a forma:

$$m_0 = \tanh\left\{\beta H_0 + \sum_{i=1}^z \operatorname{arctanh}[\tanh(\beta J) \tanh(X_i)]\right\},$$

$$X_i = \beta H_0 + \sum_{i=1}^{z-1} \operatorname{arctanh}\{[\tanh(\beta J)][\tanh(X_{ii_2})]\}.$$

Neste mapeamento já fica patente a relação de recorrência quando observamos que:

$$m_i = \tanh(X_i),$$

$$m_{i_1 i_2} = \tanh(X_{i_1 i_2}).$$

e sintetizamos como

$$m_0 = \tanh\left\{\beta H_0 + \sum_{i=1}^z \operatorname{arctanh}[m_i \tanh(\beta J)]\right\}.$$

O efeito do campo aleatório pode ser traduzido como uma aleatoriedade na magnetização de cada sítio, e essa aleatoriedade é representada por uma distribuição de probabilidades. Através da relação de recorrência podemos perceber que essa distribuição de probabilidades vai depender do campo aleatório que atua num dado sítio e da interação do spin deste sítio com aqueles das camadas seguintes. Por isso a magnetização dos

sítios de uma mesma camada, apesar de poder ser diferente, devido ao campo aleatório que atua no sistema, tem a mesma distribuição de probabilidades.

A distribuição de probabilidades $\mathcal{P}_i(m_i)$ da magnetização de um sítio da primeira camada depende da distribuição de probabilidades da campo externo que atua nesse sítio e das distribuições de probabilidades $\mathcal{P}_{i_2}(m_{i_2})$ das magnetizações dos sítios da segunda camada, que são vizinhos a ele. Ela pode ser expressa como

$$\mathcal{P}_i(m_i) = \int \prod_{i_2=1}^{z-1} \delta(m_i - f(H_i, \{m_{i_2}\})) P(H_i) dH_i \mathcal{P}_{i_2}(m_{i_2}) dm_{i_2},$$

onde $m_i = f(H_i, \{m_{i_2}\})$ é a relação de recorrência entre as magnetizações e $P(H_i)$ é a distribuição de probabilidades do campo externo.

Um objetivo desse capítulo é sugerir os obstáculos encontrados quando se analisa numericamente o modelo de Ising com elementos de aleatoriedade na rede de Bethe.

Katsura[31] e colaboradores desenvolveram o método da distribuição de probabilidades de um campo efetivo que atua em cada sítio para analisar o modelo de Ising com interações aleatórias. Bernardes [7] usa este método para estudar o modelo de Ising com campo aleatório. O método parte de uma equação equivalente à equação anterior onde se considera o campo efetivo H_i^{ef} que atua no sítio i como $X_i = \beta H_i^{ef}$. Usando-se a transformada de Fourier da função delta de Dirac considerada, encontram-se duas equações integrais acopladas envolvendo o campo efetivo e a sua distribuição de probabilidades.

Como o campo efetivo em cada sítio é o resultado da in-

fluência dos seus vizinhos e do campo externo, as dificuldades de uma solução numérica aumentam quando z cresce. Katsura consegue apresentar resultados para um número de coordenação $z = 3$ e Bernardes para $z = 3$ e $z = 4$.

O segundo objetivo deste capítulo é calcular o limite de coordenação infinita dos modelos apresentados e comparar com os resultados obtidos na aproximação de campo médio dinâmico, quando consideramos esse limite.

2.1 Campo aleatório

Seja o modelo analisado no item anterior, onde o campo H_0 é uma variável aleatória com distribuição de probabilidades dada por:

$$\mathcal{P}(H_0) = \frac{1}{2} \{ \delta(H - H_0) + \delta(H + H_0) \},$$

onde estamos considerando implicitamente que os campos que atuam nos outros sítios têm a mesma distribuição de probabilidades.

No limite de coordenação infinita o valor esperado da magnetização local terá a forma (Apêndice A.1) $m = f(m)$, com

$$f(m) = \frac{1}{2} \left\{ \tanh \left(\frac{m + h}{t} \right) + \tanh \left(\frac{m - h}{t} \right) \right\},$$

onde $h = H/zJ$ e $t = (z\beta J)^{-1}$, que é a solução de campo médio deste modelo[1].

A partir da equação de estado anterior podemos traçar o diagrama de fases deste modelo. Para calcular a linha de transição

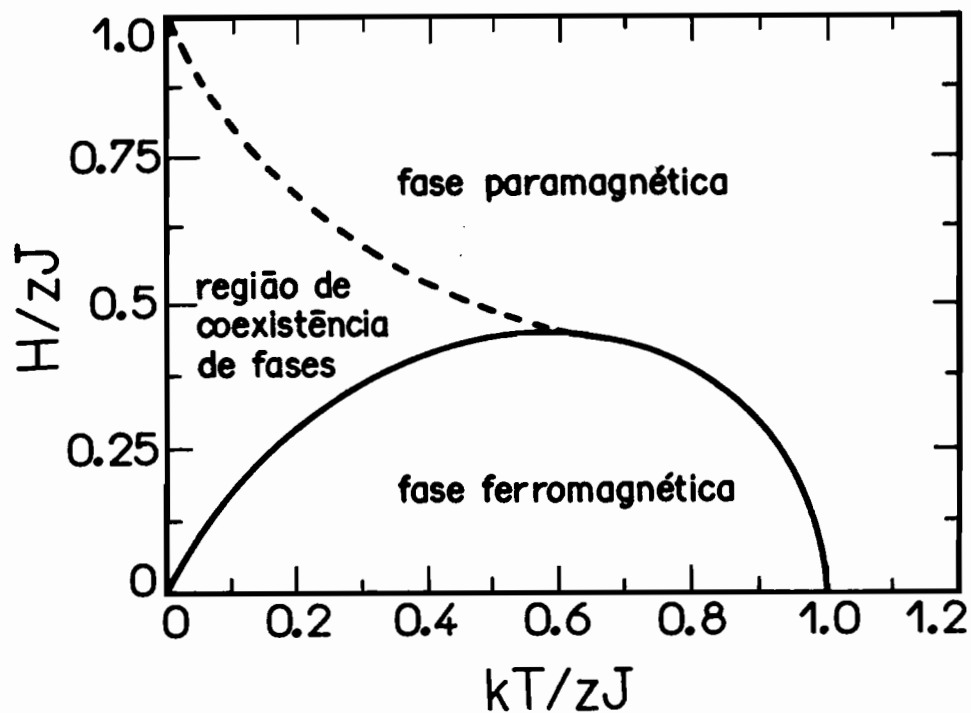


Figura 2.3: Diagrama de fases para o modelo de Ising com campo aleatório, no limite de coordenação infinita.

de segunda ordem entre as fases ordenada e desordenada, vamos expandir $f(m)$ em uma série de potências de m . Como $f(m)$ é ímpar em m a série tem a forma:

$$f(m) = \mathcal{A}_1 m + \mathcal{A}_3 m^3 + \mathcal{A}_5 m^5 + \dots$$

onde

$$\mathcal{A}_1 = \frac{\operatorname{sech}^2(h/t)}{t},$$

$$\mathcal{A}_3 = \frac{1 - 3\operatorname{senh}^2(h/t)}{6t^3 \cosh^4(h/t)}.$$

Na relação de recorrência pode-se perceber que $m = 0$ é sempre uma solução, que pode ser estável ou instável, dependendo da região de diagrama de fases. A condição $\mathcal{A}_1 = 1$ nos garante que os dois lados da relação $m = f(m)$ têm a mesma derivada em $m = 0$. Se analisarmos a solução gráfica e observarmos que para m pequeno podemos usar apenas os primeiros termos da série de potências, as condições $\mathcal{A}_1 = 1$ e $\mathcal{A}_3 < 0$ indicam que a solução $m \approx 0$ é estável. Quando $\mathcal{A}_3 > 0$ a concavidade da curva $f(m)$ se altera e passamos a ter uma solução com $m \neq 0$. Para uma análise formal e mais completa do significado físico dos coeficientes \mathcal{A}_i , sugerimos ao leitor o artigo de Carneiro, Henriques e Salinas[14]

Resumimos dizendo que a curva definida por $\mathcal{A}_1 = 1$ e $\mathcal{A}_3 < 0$ é a linha de transição de segunda ordem. A curva definida por $\mathcal{A}_1 = 1$ é o limite de estabilidade da fase desordenada. Na figura 2.3 esta curva é representada pela linha contínua. O limite de estabilidade da fase ordenada é obtido iterativamente através da relação de recorrência inicializando o processo com $m = 1$. Na figura mencionada esta curva é representada pela linha tracejada. Estes dois limites de estabilidade se encontram suavemente no ponto tricrítico definido por $\mathcal{A}_1 = 1$ e $\mathcal{A}_3 = 0$, ou seja $t_{tr} = 3/4$ e $h_{tr} = (3/8) \ln 3 \approx 0,41$, que coincide com o resultado de campo médio obtido por Aharony[1].

2.2 Anisotropia aleatória

Consideremos o hamiltoniano

$$\mathcal{H} = -J \sum_{(i,j)} S_i S_j + \sum_{i=1}^N D_i S_i^2,$$

onde $J > 0$ é a interação de troca, (i, j) é a soma sobre os vizinhos mais próximos, $S_i = 0, \pm 1$ e a anisotropia de campo cristalino é dada pelo conjunto $\{D_i\}$ de variáveis aleatórias independentes, com distribuição de probabilidades definida por

$$\mathcal{P}(D_i) = p\delta(D_i - D) + (1 - p)\delta(D_i)$$

Como já foram apresentados detalhes da álgebra envolvida na rede de Bethe, parte dela será omitida aqui. Vamos analisar a interação do spin central S_0 com os spins da primeira camada e a partir de então inferir as relações de recorrência de interesse.

O fator de Boltzmann que envolve diretamente a interação entre o spin central e os spins da primeira camada, e as interações deste último grupo com a anisotropia e um eventual campo externo é dado por

$$\begin{aligned} V = & \sum_{\{S_i\}} \exp\{\beta J S_0 S_1 + \cdots + \beta J S_0 S_z\} \times \\ & \exp\{-\beta D_1 S_1^2 - \cdots - \beta D_z S_z^2\} \times \\ & \exp\{+\beta H_1 S_1 + \cdots + \beta H_z S_z\}, \end{aligned}$$

ou seja,

$$V = \prod_{i=1}^z \sum_{\{S_i\}} \exp\{\beta J S_0 S_i - \beta D_i S_i^2 + \beta H_i S_i\}.$$

Se observarmos a função de partição \mathcal{Z}_N mostrada no item anterior tendo em mente a forma de V , iremos notar que V deve ser do tipo:

$$V = A \exp\{B S_0 + C S_0^2\},$$

onde A , B e C devem conter as interações do spin S_0 com o campo local produzido pelos sítios da primeira camada. Obviamente o campo local da primeira camada contém a influência da anisotropia D_i , do campo externo H_i e do campo local produzido pela segunda camada na primeira.

Calculando o traço de V , encontramos

$$A = \prod_{i=1}^z [2e^{-\beta D_i} \cosh(\beta H_i) + 1],$$

$$B = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^z \ln \left\{ \frac{2e^{-\beta D_i} \cosh(\beta J + \beta H_i) + 1}{2e^{-\beta D_i} \cosh(-\beta J + \beta H_i) + 1} \right\},$$

$$C = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^z \ln \left\{ \frac{[2e^{-\beta D_i} \cosh(\beta J + \beta H_i) + 1]}{[2e^{-\beta D_i} \cosh(\beta H_i) + 1]^2} \right\} + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^z \ln \left\{ \frac{[2e^{-\beta D_i} \cosh(-\beta J + \beta H_i) + 1]}{[2e^{-\beta D_i} \cosh(\beta H_i) + 1]^2} \right\}.$$

Podemos generalizar estas relações de recorrência para outras camadas se considerarmos nas equações anteriores

$B = B(B_i, C_i)$ e $C = C(B_i, C_i)$ onde consideramos B_i e C_i ao invés de βH_i e $-\beta D_i$. B_i e C_i relacionam a primeira e a segunda camadas e têm um significado equivalente a B_0 e C_0 que serão definidos adiante.

Sobre o sítio central atuam os efeitos da primeira camada além do campo externo e da anisotropia. Podemos escrever a relação de recorrência entre o sítio central e a primeira camada como:

$$\begin{aligned} B_0 &= +\beta H_0 + B(B_i, C_i), \\ C_0 &= -\beta D_0 + C(B_i, C_i). \end{aligned}$$

Vamos introduzir as variáveis m e Q definidas como:

$$m_0 = \langle S_0 \rangle = \frac{\sum_{\{S_0\}} S_0 e^{B_0 S_0 + C_0 S_0^2}}{\sum_{\{S_0\}} e^{B_0 S_0 + C_0 S_0^2}},$$

$$Q_0 = \langle S_0^2 \rangle = \frac{\sum_{\{S_0\}} S_0^2 e^{B_0 S_0 + C_0 S_0^2}}{\sum_{\{S_0\}} e^{B_0 S_0 + C_0 S_0^2}}.$$

Pode-se facilmente mostrar que para uma camada genérica ξ temos

$$m_\xi = \frac{2e^{C_\xi} \sinh(B_\xi)}{2e^{C_\xi} \cosh(B_\xi) + 1},$$

$$Q_\xi = \frac{2e^{C_\xi} \cosh(B_\xi)}{2e^{C_\xi} \cosh(B_\xi) + 1}.$$

Se analisarmos o sítio central teremos m_0 como função de $B_\xi = B_0$ e $C_\xi = C_0$, e se for um sítio da primeira camada teremos m_i como função de $B_\xi = B_i$ e $C_\xi = C_i$, onde B_i e C_i são funções dos parâmetros da segunda camada, que são obtidos de maneira equivalente a B_0 e C_0 .

Retomando o modelo original com campo externo nulo, teremos as seguintes equações:

$$m_0 = \frac{\sinh[B(B_i, C_i)]}{\cosh[B(B_i, C_i)] + \frac{1}{2} \exp\{\beta D_0 - C(B_i, C_i)\}}$$

e

$$Q_0 = \frac{\cosh[B(B_i, C_i)]}{\cosh[B(B_i, C_i)] + \frac{1}{2} \exp\{\beta D_0 - C(B_i, C_i)\}}$$

onde

$$B(B_i, C_i) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^z \ln \left\{ \frac{1 + [\cosh(\beta J) - 1]Q_i + m_i \sinh(\beta J)}{1 + [\cosh(\beta J) - 1]Q_i - m_i \sinh(\beta J)} \right\}$$

e

$$C(B_i, C_i) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^z \ln \left\{ [1 + (\cosh(\beta J) - 1)Q_i]^2 - m_i^2 \sinh^2(\beta J) \right\}.$$

Nas equações anteriores estão relacionadas diretamente a magnetização m_0 do sítio central e a magnetização m_i dos sítios da primeira camada.

As relações de recorrência podem ser expressas como

$$m_0 = f(D_0, \{m_i\}, \{Q_i\})$$

e

$$Q_0 = g(D_0, \{m_i\}, \{Q_i\})$$

e a anisotropia tem uma distribuição de probabilidades dada por

$$\mathcal{P}(D_0) = p\delta(D_0 - D) + (1 - p)\delta(D_0).$$

Considerando as propriedades locais da árvore de Cayley teremos $\overline{m_0} = \overline{m_i} = m$. No limite de coordenação infinita obtemos (Apêndice A.2) os resultados de campo médio:

$$m = 2\sinh(m/t) \left\{ \frac{pe^{-d/t}}{2e^{-d/t} \cosh(m/t) + 1} + \frac{1-p}{2 \cosh(m/t) + 1} \right\},$$
$$Q = 2 \cosh(m/t) \left\{ \frac{pe^{-d/t}}{2e^{-d/t} \cosh(m/t) + 1} + \frac{1-p}{2 \cosh(m/t) + 1} \right\}.$$

onde $t = (z\beta J)^{-1}$ e $d = D/zJ$. Os diagramas de fases correspondentes encontram-se na figura 3.5 .

Um fato curioso que acontece tanto na rede de Bethe quanto na aproximação de campo médio dinâmico (Capítulo III) é o desacoplamento das equações que definem m e Q . Enquanto z é finito temos um mapa bi-dimensional, que se transforma em um mapa uni-dimensional no limite de coordenação infinita.

Capítulo 3

Campo médio dinâmico

Nas últimas décadas a utilização de simulações numéricas vem crescendo de maneira intensa na Física[10, 27, 50].

Na Mecânica Estatística, o método de Monte Carlo, que designa genericamente as simulações neste campo, tem se tornado uma ferramenta mais poderosa desde os seus primórdios com o algoritmo de Metropolis[41].

Uma simulação de um modelo físico tenta preencher a ausência da sua solução exata.

Em uma simulação, o modelo é iniciado em um estado arbitrário e é permitido que ele evolua até o estado de equilíbrio. Essa evolução está associada com uma trajetória no espaço de fase. Na natureza quando um sistema evolui na direção do equilíbrio, ele também percorre uma trajetória no espaço de fase, e sua densidade de probabilidade obedece a uma equação de continuidade neste espaço.

Numa simulação, o algoritmo deve direcionar a evolução do modelo de maneira que ele também obedeça a uma equação do mesmo tipo - a equação mestra.

Um fato que limita a confiança nos resultados de uma si-

mulação é que ela, obviamente, considera um número N finito de constituintes (átomos, spins, etc). Pode-se trabalhar os resultados obtidos para N finito usando-se a teoria da escala de tamanho finito. Mas existe, também, um esforço contínuo em aperfeiçoar os algoritmos no sentido de trabalhar com N cada vez maiores.

Outra dificuldade a ser superada é a relaxação na criticalidade. Quando o sistema está em uma região do espaço de parâmetros (temperatura, campo externo, anisotropia, etc.) próximo a uma transição de fases, o tempo de relaxação é incrivelmente maior que longe dela. Como a situação de maior interesse é justamente a transição de fases, a relaxação na criticalidade é mais uma dificuldade a ser superada.

A aproximação de campo médio dinâmico contém elementos do conceito de campo médio e do método de Monte Carlo.

No algoritmo de Metropolis, por exemplo, o valor de cada spin, da configuração de spins num tempo t_{i+1} , depende do valor de cada spin num tempo t_i . Para que um spin mude de valor certas regras devem ser obedecidas, a evolução do sistema consiste destas mudanças.

Na aproximação de campo médio dinâmico usamos a idéia básica de campo médio; cada sítio é um sítio central, rodeado por seus z vizinhos. A partir do cálculo do campo local que atua no sítio central e do algoritmo do banho térmico nós encontramos um mapa que relaciona as características do sistema num tempo $t + 1$ com aquelas num tempo t . Este mapa representa a evolução temporal do sistema, e os seus pontos fixos significam que o sistema alcançou o equilíbrio. Como será visto a seguir, este mapa é uma equação polinomial. sem as inconveniências da relaxação na criticalidade.

3.1 Modelo de Ising ferromagnético

Consideremos o seguinte hamiltoniano:

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

onde $J > 0$ é a interação de troca, (i, j) é a soma sobre todos os pares de sítios e $S_i = \pm 1$. Chamaremos os vizinhos ao sítio central S_0 , de spins da borda. Teremos então

$$\mathcal{H} = -JS_0\sigma,$$

onde $\sigma = \sum_{i=1}^z S_i$ é a soma dos spins da borda. Supondo $\mathcal{H}^{(+)} = \mathcal{H}(S_0 = +1)$ e $\mathcal{H}^{(-)} = \mathcal{H}(S_0 = -1)$, poderemos definir

$$A^{(+)}(\sigma) = \frac{e^{-\beta\mathcal{H}^{(+)}}}{e^{-\beta\mathcal{H}^{(+)}} + e^{-\beta\mathcal{H}^{(-)}}},$$
$$A^{(-)}(\sigma) = \frac{e^{-\beta\mathcal{H}^{(-)}}}{e^{-\beta\mathcal{H}^{(+)}} + e^{-\beta\mathcal{H}^{(-)}}},$$

onde $A^{(+)}(\sigma)$ é a probabilidade do sítio central ter $S_0 = +1$ quando os spins da borda têm uma certa configuração definida por σ , e $A^{(-)}(\sigma)$ é a probabilidade do sítio central ter o valor $S_0 = -1$ quando a configuração de spins da borda for definida por σ . É fácil perceber que $A^{(+)}(\sigma) + A^{(-)}(\sigma) = 1$. Podemos expressar os fatores de campo local como

$$A^{(+)}(\sigma) = \frac{e^{+\beta J\sigma}}{e^{+\beta J\sigma} + e^{-\beta J\sigma}},$$

$$A^{(-)}(\sigma) = \frac{e^{-\beta J\sigma}}{e^{+\beta J\sigma} + e^{-\beta J\sigma}}.$$

Fica evidente que a probabilidade de um certo sítio assumir um dado valor (± 1) depende da configuração de seus vizinhos mais próximos, mais especificamente, depende de σ . É obvio que existe um certo número de configurações de spins para um mesmo σ . Consideremos uma configuração que tenha k spins com $S_i = +1$ e conseqüentemente $z - k$ spins com $S_i = -1$. O número de configurações $\mathcal{N}_c(z, k)$ com o mesmo $\sigma = -z + 2k$ é dado por

$$\mathcal{N}_c = \frac{z!}{k!(z-k)!} = C_z^k,$$

onde C_z^k são os coeficientes binomiais.

Seja P a probabilidade de um spin da borda ter o valor $S_i = +1$. Consideremos uma configuração de spins da borda tal que tenhamos k spins com $S_i = +1$ e $z - k$ spins com $S_i = -1$. A probabilidade do sistema se encontrar em um estado definido por esta configuração de spins da borda quando o spin central for $+1$ será dada por

$$P^k(1-P)^{z-k}A^{(+)}(-z+2k).$$

Se considerarmos o spin central -1 , teremos:

$$P^k(1-P)^{z-k}A^{(-)}(-z+2k).$$

A probabilidade $f(P)$ do spin central ser $+1$ será obtida somando-se, sobre todas as possíveis configurações de spins

da borda a probabilidade de que cada uma possibilidade (± 1) aconteça quando o spin central for $+1$,

$$f(P) = \sum_{k=0}^z C_z^k P^k (1-P)^{z-k} A^{(+)}(-z+2k).$$

De maneira equivalente, encontramos que a probabilidade $1 - f(P)$ do spin central ser -1 é dada por

$$1 - f(P) = \sum_{k=0}^z C_z^k P^k (1-P)^{z-k} A^{(-)}(-z+2k).$$

De maneira análoga ao método de Monte Carlo, nós introduzimos o sistema, que está em um certo estado inicial, em um banho térmico a uma temperatura absoluta T e submetido a condições externas (por exemplo: campo magnético). Permitimos que o sistema evolua neste banho térmico, sob a influência das condições externas até que ele alcance o estado de equilíbrio.

No estágio inicial t , cada um dos N spins tem a probabilidade P de ser $+1$.

Cada spin está rodeado por z vizinhos, e nós calculamos $f(P)$ que é a probabilidade do spin central ser $+1$ quando os seus vizinhos têm a probabilidade P de ser $+1$.

Em outras palavras, no tempo t os spins têm a probabilidade P de ser $+1$ e no tempo $t + 1$ eles têm a probabilidade $f(P)$ de ser $+1$.

Esta evolução temporal discreta tem uma certa semelhança com as sucessivas camadas na árvore de Cayley [55]. Aqui num dado tempo t todos os sítios têm a mesma magnetização. Lá todos os sítios de uma mesma camada têm a mesma magnetização. Em ambos os casos, as relações de recorrência sugerem

uma evolução, seja temporal (aqui) ou espacial (lá). Os pontos fixos aqui refletem o fato do sistema ter alcançado o equilíbrio. Os pontos fixos lá refletem as propriedades do interior da árvore de Cayley-conhecida nesta situação como rede de Bethe.

Então teremos

$$P_{t+1} = f(P_t).$$

Quando o sistema alcança o equilíbrio, temos

$$P^* = f(P^*).$$

Na aproximação de campo médio dinâmico este mapa é sempre uma equação polinomial, passível de solução numérica simples.

Neste modelo que estamos analisando, a magnetização m é definida com

$$m = (+1)P + (-1)(1 - P) = 2P - 1.$$

Pode ser mostrado facilmente que o mapa $P = f(P)$ é equivalente ao mapa $m = f(m)$ onde

$$f(m) = \frac{1}{2^z} \sum_{k=0}^z C_z^k (1+m)^k (1-m)^{z-k} \tanh[\beta J(-z+2k)].$$

O caso mais simples a ser analisado é a cadeia linear ($z = 2$). Obtemos que

$$f(m) = m \tanh(2\beta J),$$

ou seja, a única solução do mapa para β finito é $m = 0$. Já neste caso percebe-se a sensibilidade da aproximação à topologia da rede. Quando $z > 2$ passamos a encontrar soluções não

nulas para m quando β é finito. É fácil perceber que independentemente de z , $m = 0$ é sempre uma solução. Observando $f(m = 0)$ notamos que o somando é uma função ímpar em relação a $z/2$. Para calcularmos a temperatura de transição nós linearizamos $f(m)$ em torno de $m = 0$ e encontramos que β_c é a solução da equação

$$1 = \frac{1}{2^z} \sum_{k=0}^z C_z^k (-z + 2k) \tanh[\beta_c J(-z + 2k)]$$

Analisando redes neurais, onde os modelos em princípio consideram interações assimétricas ($J_{ij} \neq J_{ji}$), Derrida [21] encontrou a mesma solução deste modelo ferromagnético.

Quando z é grande nós recuperamos a forma usual da equação de estado na aproximação de campo médio (Apêndice B.1).

A ideia de considerar que o campo efetivo pode assumir vários valores com probabilidades apropriadas dependendo da configuração dos spins vizinhos já foi usada por Mamada e Takano[43]. Neste trabalho eles relacionam de maneira auto-consistente a distribuição de probabilidades do campo efetivo e a matriz densidade do aglomerado de spins considerado. Apesar de usar uma formulação diferente da nossa, os resultados são coincidentes em dois modelos que eles analisam, o modelo ferromagnético e o modelo com diluição de sítios que será mostrado adiante.

3.2 Modelo de Ising com campo aleatório

Ao longo das últimas décadas o modelo de Ising com campo aleatório (RFIM) tem sido estudado exhaustivamente. Consideremos o hamiltoniano

$$\mathcal{H} = -J \sum_{(i,j)} S_i S_j - \sum_{i=1}^N H_i S_i,$$

onde $J > 0$ é a interação de troca, (i, j) é a soma sobre todos os pares de sítios, $S_i = \pm 1$ e o campo aleatório H_i são variáveis aleatórias independentes com uma distribuição de probabilidades bimodal dada por

$$\mathcal{P}(H_i) = \frac{1}{2} \{ \delta(H_i - H) + \delta(H_i + H) \}.$$

Em um trabalho clássico Aharony[1] estudou este modelo usando a aproximação de campo médio. O diagrama de fases exibido em seu trabalho apresenta transições de fase de segunda ordem para $kT/zJ > 2/3$, e transições de fase de primeira ordem para $kT/zJ < 2/3$, sendo o campo tricrítico $H/zJ \approx 0,44$ e o campo crítico para o estado fundamental $H/zJ = 0,5$.

Salinas e Wreszinsky[52] usaram o método de van Hemmen para obter a energia livre de Gibbs do modelo e confirmaram os resultados obtidos por Aharony. Entin-Wohlman e Domb[24] estudaram numericamente este modelo na rede de Bethe e obtiveram os diagramas de fases para $z = 3$ e $z = 4$. Quando calcularam o campo crítico do estado fundamental eles encontraram para $z = 3$ um campo $H_c/J = 1$ e para $z = 4$ um campo $H_c/J = 2$. Como será mostrado posteriormente, nós obtemos esses mesmos resultados de forma muito mais simples, além de fazermos análises para outros valores de z .

Consideremos o nosso Hamiltoniano, onde o spin central S_0 interage com os seus z vizinhos e todos os spins interagem com o campo aleatório

$$\mathcal{H} = -S_0(J\sigma + H_0) - \sum_{i=1}^z H_i S_i,$$

onde H_0 é o campo que atua no sítio central.

Ao usarmos as definições dos fatores de campo $A^{(+)}(\sigma)$ e $A^{(-)}(\sigma)$ pode-se facilmente perceber que haverá um cancelamento do termo $\sum_{i=1}^z H_i S_i$. Isso acontece por que os 'campos' locais $\mathcal{H}^{(+)}$ e $\mathcal{H}^{(-)}$ têm a mesma dependência neste somatório. Ainda se poderia dizer que os fatores de campo consideram apenas o campo local que atua no sítio central. Tendo isso em mente, vamos redefinir o hamiltoniano como

$$-\beta\mathcal{H} = S_0(\sigma + h_0)/t,$$

onde $h_0 = H_0/J$ e $t = (\beta J)^{-1}$. Desse modo teremos

$$A^{(+)}(\sigma, h_0) = \frac{e^{(\sigma+h_0)/t}}{e^{(\sigma+h_0)/t} + e^{-(\sigma+h_0)/t}}.$$

Para uma dada escolha de h_0 , nós teremos uma situação equivalente à do item anterior,

$$f(P, h_0) = \sum_{k=0}^z C_z^k P^z (1-P)^{z-k} A^{(+)}(-z + 2k, h_0).$$

Ao considerarmos a distribuição de probabilidades, teremos uma média temperada

$$f(P) = \int dh_0 \mathcal{P}(h_0) f(P, h_0).$$

Definindo

$$B(\sigma, h) = \frac{1}{2} \{A^{(+)}(\sigma, h) + A^{(+)}(\sigma, -h)\},$$

onde $B(\sigma, h) + B(-\sigma, h) = 1$, obtemos finalmente que

$$f(P) = \sum_{k=0}^z C_z^k P^k (1-P)^{z-k} B(-z+2k, h),$$

que já inclui a média temperada sobre as variáveis aleatórias.

De maneira superficial, identifica-se como uma média temperada aquela realizada sobre o logaritmo da função de partição, ou seja sobre a energia livre. Como média recozida entende-se aquela realizada sobre a função de partição. É importante notar que no caso temperado os spins variam enquanto os elementos que definem a aleatoriedade permanecem fixos[11]. Assim, nós estamos observando a evolução da magnetização descrita pela mesma equação à medida que o tempo evolui. Consideremos a aleatoriedade caracterizada por um conjunto de parâmetros $\{\alpha_i\}$. No caso temperado teremos:

$$m(t+1) = F(m(t), \{\alpha_i\}).$$

No caso recozido, entretanto, nós teremos que considerar a evolução temporal tanto dos spins quanto dos parâmetros que caracterizam a aleatoriedade. Assim, neste caso, teremos equações acopladas do tipo:

$$\begin{aligned} m(t+1) &= F(m(t), \{\alpha_i(t)\}), \\ \alpha_j(t+1) &= G(m(t), \{\alpha_i(t)\}). \end{aligned}$$

Na média temperada a energia livre é minimizada considerando-se fixos os parâmetros que caracterizam a aleatoriedade.

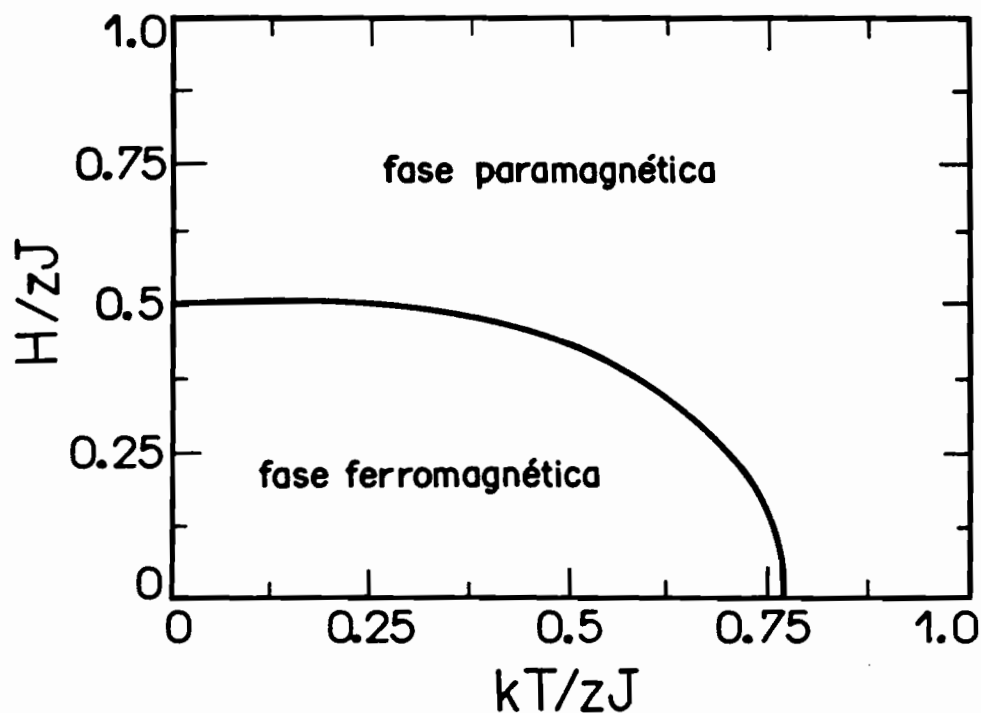


Figura 3.1: Diagrama de fases do modelo de Ising com campo aleatório para $z = 4$.

Na média recozida a aleatoriedade é um parâmetro a ser variado para minimizarmos a energia livre.

Pelo que foi enunciado fica óbvio o porquê de se considerar fisicamente relevante apenas a média temperada, pois uma amostra de laboratório ao ser produzida não altera, por si, a diluição ou a distribuição dos seus elementos de aleatoriedade.

Ao longo deste trabalho pode ser observado que a magnetização ($m = 2P - 1$) varia no tempo enquanto a aleatoriedade permanece fixa, ou seja: estaremos considerando unicamente médias temperadas.

Da análise dos pontos fixos da equação do mapeamento traçaremos os diagramas de fases mostrados nas figuras 3.1

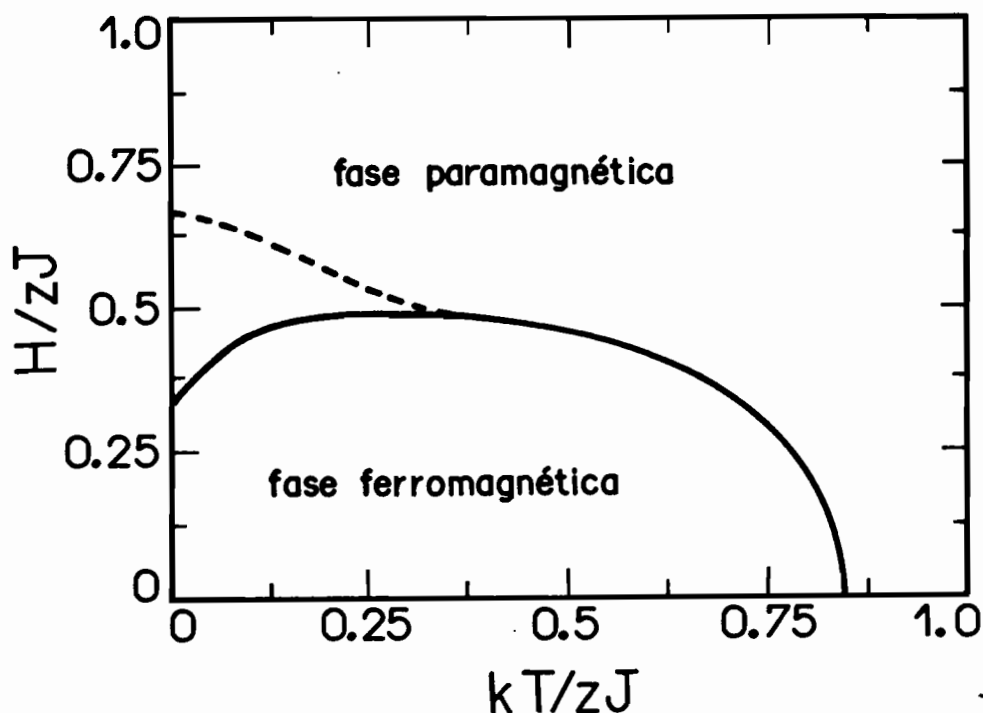


Figura 3.2: Diagrama de fases do modelo de Ising com campo aleatório para $z = 6$.

e 3.2.

Fizemos cálculos analíticos para vários valores de z e encontramos que para $z = 3$ e $z = 4$ existe apenas a linha de transição de segunda ordem, enquanto para $z \geq 5$ existe uma região no diagrama de fases em que os pontos fixos paramagnético ($P = 1/2$) e ferromagnético ($P \neq 1/2$) são estáveis. Neste caso, a linha de transição de primeira ordem pode ser determinada tanto pela construção de Maxwell quanto por uma expressão conveniente do funcional energia livre[55]. Quando z é grande recuperamos a solução de campo médio (Apêndice C.1 e Capítulo II).

É interessante observar a equação do mapa no limite $T = 0$.

Para $z = 3$, os pontos fixos ferromagnéticos $P^* = 0$ e $P^* = 1$ são estáveis no intervalo $0 \leq h \leq h_c = 1$. Para $h > h_c = 1$ o ponto fixo paramagnético $P^* = 1/2$ é estável. Esse mesmo fato acontece para $z = 4$ com $h_c = 2$ e para $z = 5$ com $h_c = 3$. Da análise do modelo de Ising com campo aleatório na rede de Bethe[24] foi conjecturado que $h_c = z - 2$ para $z > 2$. Para $z = 6$, entretanto, os pontos fixos paramagnético e ferromagnético são estáveis no intervalo $2 < h < 4$ com uma transição de primeira ordem em $h_c = 3$. Também para $z = 7, 8, 9, \dots$ detectamos regiões similares de coexistência dos pontos fixos estáveis paramagnético e ferromagnético. Estes resultados podem ser resumidos através das seguintes conjecturas: (i) $h_c = z/2$ para $z \geq 4$ e par; (ii) $h_c = (z + 1)/2$ para $z \geq 5$ e ímpar.

3.3 Modelo de Ising com interações aleatórias

Consideremos o hamiltoniano de interações aleatórias dado por

$$\mathcal{H} = - \sum_{(i,j)} J_{ij} S_i S_j,$$

onde (i, j) é a soma sobre todos os pares de sítios, $S_i = \pm 1$ e a interação de troca J_{ij} é uma variável aleatória com distribuição de probabilidades dada por

$$\mathcal{P}(J_{ij}) = p\delta(J_{ij} - J) + (1 - p)\delta(J_{ij} + J).$$

Considerando explicitamente em nosso hamiltoniano que o spin central S_0 interage com os seus z vizinhos, teremos

$$\begin{aligned}\mathcal{H} &= -S_0 \sum_{i=1}^z J_{0i} S_i, \\ &= -JS_0 \vec{\mathcal{J}} \cdot \vec{S},\end{aligned}$$

onde estamos considerando que cada configuração de spins $\{S_i\}$ define um vetor z -dimensional $\vec{S} = (S_1, S_2, \dots, S_z)$ e cada configuração de interações $\{J_{0i}\}$ define um vetor também z -dimensional $J\vec{\mathcal{J}} = (J_{01}, J_{02}, \dots, J_{0z})$.

Usando a definição do fator de campo, encontramos que

$$A^{(+)}(\vec{\mathcal{J}} \cdot \vec{S}) = \frac{e^{\vec{\mathcal{J}} \cdot \vec{S}/t}}{e^{\vec{\mathcal{J}} \cdot \vec{S}/t} + e^{-\vec{\mathcal{J}} \cdot \vec{S}/t}},$$

onde $t = (\beta J)^{-1}$. Como nos casos anteriores, e nos seguintes, a questão básica da aproximação de campo médio dinâmico é calcular o campo local no sítio central tendo em conta as possíveis configurações de spins e da aleatoriedade.

Consideremos uma configuração com n ligações $J_{0i} = +J$ e $z - n$ ligações $J_{0i} = -J$. Em outras palavras: o vetor $\vec{\mathcal{J}}$ tem n componentes $+1$ e $z - n$ componentes -1 . Consideremos também um vetor \vec{S} com k componentes $+1$ e $z - k$ componentes -1 . É fácil imaginar que $\alpha = \vec{\mathcal{J}} \cdot \vec{S}$ pode ter vários valores dependendo de como as componentes $+1$ e -1 de $\vec{\mathcal{J}}$ e \vec{S} estão distribuídas. Quando tivermos o maior número de componentes de mesmo sinal de $\vec{\mathcal{J}}$ e \vec{S} emparelhadas, teremos o maior valor possível para α . Se $n > k$ teremos $\alpha_{max} = z - 2(n - k)$ e se $k > n$ teremos $\alpha_{max} = z - 2(k - n)$; ou seja $\alpha_{max} = z - 2|n - k|$.

Para n e k fixos, quando desemparelhamos um par de componentes, α será diminuído de 4. Por exemplo, para $z = 4$, $n = 2$ e $k = 2$:

$$\begin{aligned}\vec{J} &= (+ + --) \\ \vec{S} &= (+ + --) \Rightarrow \vec{J} \cdot \vec{S} = 4\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\vec{J} &= (+ + --) \\ \vec{S} &= (+ - +-) \Rightarrow \vec{J} \cdot \vec{S} = 0\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\vec{J} &= (+ + --) \\ \vec{S} &= (- - ++) \Rightarrow \vec{J} \cdot \vec{S} = -4\end{aligned}$$

Pode-se perceber que este fato é genérico e, portanto, para uma escolha qualquer de n e k teremos

$$\alpha(z, n, k, l) = z - 2|n - k| - 4l,$$

onde $l = 0, 1, 2, \dots, k$. Como foi mencionado, existem várias configurações de \vec{J} e \vec{S} que resultam num mesmo α . Nós teremos C_z^n configurações, todas com n componentes de \vec{J} com valor $+1$. Se considerarmos apenas uma destas configurações de \vec{J} e ao mesmo tempo analisarmos uma configuração de spins com k componentes de \vec{S} com valor $+1$, teremos várias possibilidades onde $\alpha(z, n, k, l)$ tem valores diferentes, como foi

esquemático anteriormente. Na segunda situação esquematizada, $\vec{J} \cdot \vec{S} = 0$, existem quatro configurações (onde duas componentes estão desemparelhadas) para as quais $\vec{J} \cdot \vec{S} = 0$. Elas são:

$$\begin{array}{cc} (+ + --) & (+ + --) \\ (+ - +-) & (+ - -+) \end{array}$$

$$\begin{array}{cc} (+ + --) & (+ + --) \\ (- + +-) & (- + -+) \end{array}$$

Pode-se generalizar este resultado dizendo que o número de diferentes configurações possíveis para z, n, k e l fixos é $C_{z-n}^l C_n^{k-l}$. Um teste óbvio desta contagem de configurações seria somá-las, e o resultado desta soma deverá ser 2^{2z} . De fato, temos:

$$\sum_{n=0}^z C_z^n \sum_{k=0}^z \sum_{l=0}^k C_{z-n}^l C_n^{k-l} = \sum_{n=0}^z C_z^n \sum_{k=0}^z C_z^k = 2^{2z}.$$

Tendo recorrido sobre o argumento α do fator de campo e de sua degenerescência, podemos explicitar a probabilidade $f(P, p)$ do sítio central ser $S_0 = +1$ onde - como já foi usado - cada spin vizinho ao central tem uma probabilidade P de ser $S_i = +1$:

$$\begin{aligned} f(P, p) = & \sum_{n=0}^z C_z^n p^n (1-p)^{z-n} \sum_{k=0}^z P^k (1-P)^{z-k} \times \\ & \sum_{l=0}^k C_{z-n}^l C_n^{k-l} A^{(+)}(-z + 2|n - k| + 4l). \end{aligned}$$

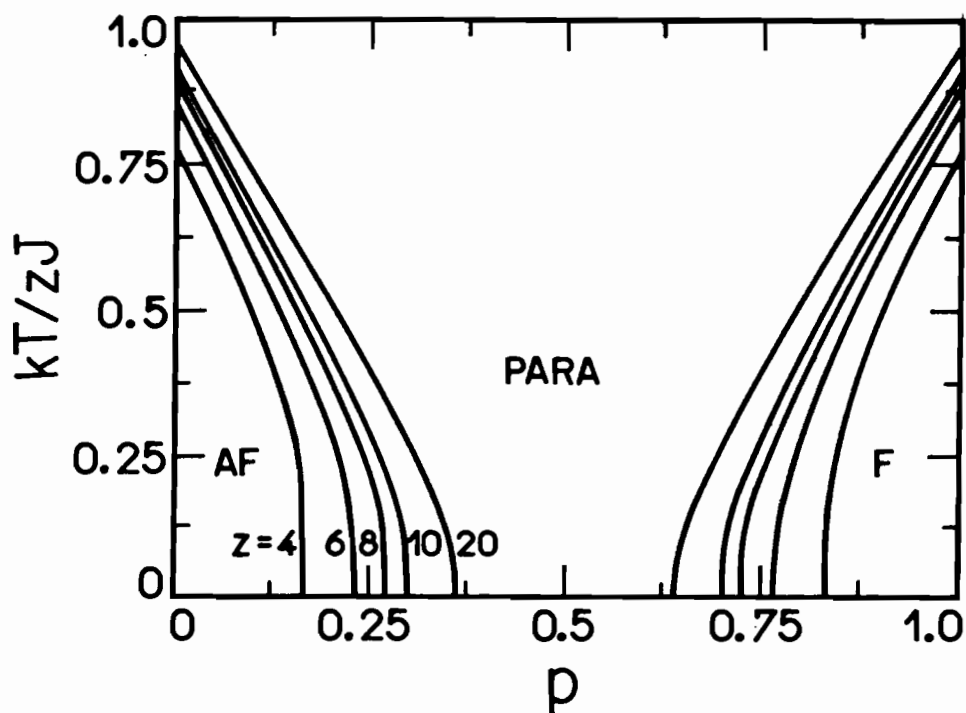


Figura 3.3: Diagrama de fases do modelo de Ising com interações aleatórias para diversos valores de z .

Analisamos esta relação de recorrência para diversos valores de z , conforme os resultados mostrados na figura 3.3.

Nós obtivemos linhas de transição de fases de segunda ordem simétricas em relação a $p = 1/2$, que separam respectivamente as regiões antiferromagnética e ferromagnética da região paramagnética. Para $z = 4$ obtivemos uma percolação crítica $p_c = 0,833 \dots$ em razoável concordância com vários resultados numéricos na rede quadrada [9, 37, 38, 57]. Para $z \geq 6$, entretanto, como no caso de outros esquemas aproximativos, a aproximação de campo médio dinâmico não é adequada para indicar a suposta existência de uma fase vidro de spin para p na vizinhança de $1/2$. É certamente necessário introduzir um

parâmetro de ordem adicional para caracterizar a fase vidro de spin. Uma saída possível seria uma proposta de Thouless usada por Oliveira e Salinas [45], que considera apenas duas réplicas do sistema.

3.4 Modelo de Ising com diluição aleatória de sítios

Consideremos o hamiltoniano com diluição aleatória de sítios, dado por

$$\mathcal{H} = -J \sum_{(i,j)} \varepsilon_i S_i \varepsilon_j S_j,$$

onde $S_i = \pm 1$, (i, j) é a soma sobre todos os pares de sítios, $J > 0$ é a interação de troca e os ε_i são variáveis aleatórias independentes e idênticamente distribuídas, com distribuição de probabilidades dada por

$$\mathcal{P}(\varepsilon_i) = p\delta(\varepsilon_i - 1) + (1 - p)\delta(\varepsilon_i),$$

onde p é a probabilidade do spin S_i do sítio i estar presente.

Este modelo, juntamente com o modelo de diluição aleatória de ligações, são exemplos típicos de percolação em Física Estatística [29]. Quando analisamos uma rede quadrada fica evidente a diferença entre eles: quando um sítio magnético está ausente ($p = 0$) teremos automaticamente quatro ligações ausentes.

Se em uma dada matriz não magnética introduzirmos aleatoriamente por substituição uma pequena quantidade de íons,

certamente a magnetização deste sistema será nula- mesmo em $T = 0$. À medida que aumentamos a concentração p de íons magnéticos, pequenos aglomerados serão formados. Quando p cresce ainda mais, estas ilhas magnéticas vão se unindo. Para $T = 0$, em $p = p_c$, estas ilhas estarão conectadas e teremos então um fenômeno coletivo, uma ordem de longo alcance. O sistema percolou, e p_c é a percolação crítica.

Considerando explicitamente o nosso hamiltoniano, teremos

$$\mathcal{H} = -JS_0 \sum_{i=1}^z \varepsilon_i S_i = -JS_0 \gamma,$$

onde $\varepsilon_0 = 1$, pois na ausência do sítio central teríamos um aglomerado de spins isolados e $\gamma = \sum_{i=1}^z \varepsilon_i S_i$.

O fator de campo é dado por:

$$A^{(+)}(\gamma) = \frac{e^{\gamma/t}}{e^{\gamma/t} + e^{-\gamma/t}},$$

onde $t = (\beta J)^{-1}$.

De maneira equivalente ao item anterior obtemos que

$$f(P, p) = \sum_{n=0}^z C_z^n p^{z-n} (1-p)^n \sum_{k=0}^z P^{z-k} (1-P)^k \times \\ \sum_{l=0}^k C_{z-n}^l C_n^{k-l} A^{(+)}(z-n-2l).$$

Na figura 3.4 mostramos os resultados da análise da relação de recorrência para vários valores de z . Para $z = 4$, obtivemos a percolação crítica $p_c = 0,428 \dots$ que pode ser comparado

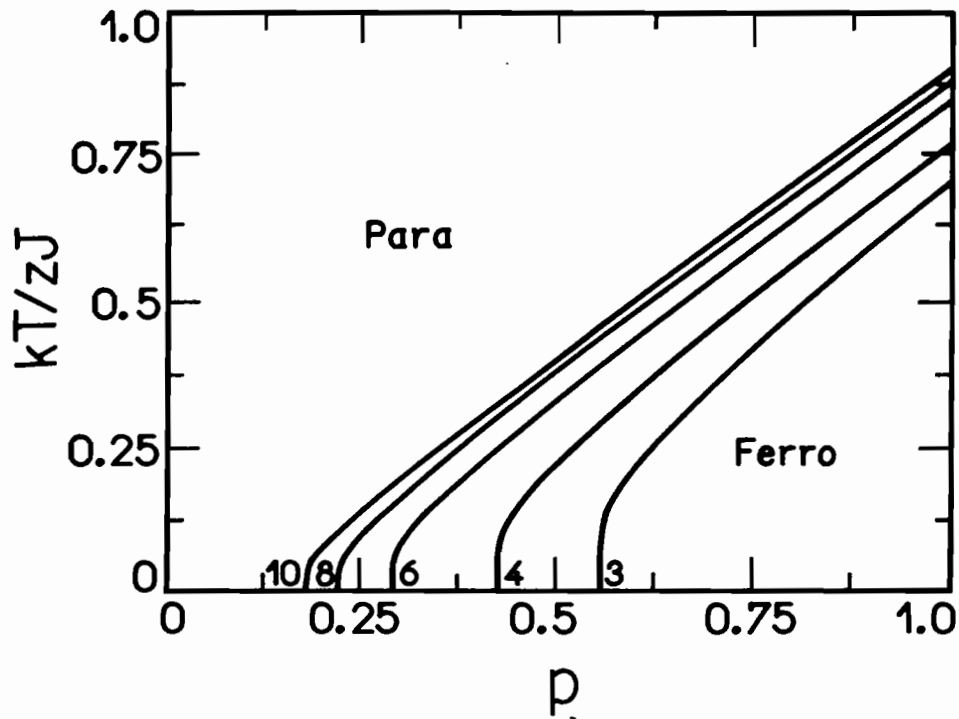


Figura 3.4: Diagrama de fases do modelo de Ising com diluição aleatória de sítios, para diversos valores de z .

com $p_c = 0,5927\dots$ obtido para a rede quadrada [22, 59]. Para $z = 6$ obtivemos $p_c = 0,292\dots$ numa razoável concordância com os resultados de Monte Carlo[36] numa rede cúbica simples, $p_c = 0,3116$.

3.5 Modelo de Ising com anisotropia aleatória

Consideremos o hamiltoniano dado por:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{(i,j)} S_i S_j + \sum_{i=1}^N D_i S_i^2,$$

onde $J > 0$ é a interação de troca, (i, j) é a soma sobre todos os pares de sítios; $S_i = 0, \pm 1$, e a anisotropia D_i são variáveis aleatórias independentes com uma distribuição de probabilidades dada por

$$p(D_i) = p\delta(D_i - D) + (1 - p)\delta(D_i).$$

O hamiltoniano pode ser escrito como:

$$\mathcal{H} = -JS_0\sigma + D_0S_0^2 + \sum_{i=1}^z D_i S_i^2,$$

onde $\sigma = \sum_{i=1}^z S_i$.

Os fatores de campo são definidos como anteriormente e têm as formas

$$\begin{aligned} A(\sigma) &= \frac{e^{(\sigma/z-d_0)/t}}{e^{(\sigma/z-d_0)/t} + e^{(-\sigma/z-d_0)/t} + 1}, \\ A^{(-)}(\sigma) &= \frac{e^{(-\sigma/z-d_0)/t}}{e^{(\sigma/z-d_0)/t} + e^{(-\sigma/z-d_0)/t} + 1}, \\ B(\sigma) &= \frac{1}{e^{(\sigma/z-d_0)/t} + e^{(-\sigma/z-d_0)/t} + 1}. \end{aligned}$$

onde $t = (z\beta J)^{-1}$, $d_0 = D_0/zJ$, $A(\sigma)$ e $A^{(-)}(\sigma)$ são os fatores de campo quando o sítio central for $S_0 = +1$ ou $S_0 = -1$ respectivamente, e $B(\sigma)$ é o fator de campo quando $S_0 = 0$; ou seja é a probabilidade do sítio central ter o valor $S_0 = 0$ quando os spins da borda tiverem um valor definido por σ . Obviamente deveremos ter que $A(\sigma) + A^{(-)}(\sigma) + B(\sigma) = 1$.

Como nos itens anteriores, estamos interessados em calcular a degenerescência do fator de campo. Ou seja: calcular quantas possíveis configurações de spins da borda existem para um dado σ . Consideremos uma dada configuração de spins que tenha n spins com $S_i = 0$; k spins com $S_i = +1$ e $z - n - k$ spins com $S_i = -1$. O número de configurações $\mathcal{N}_c(z, n, k)$ tal que tenhamos a mesma magnetização total σ é dado por

$$\mathcal{N}_c(z, n, k) = \frac{z!}{n!k!(z-n-k)!} = C_z^n C_{z-n}^k,$$

onde $\sigma = k - (z - n - k) = -z + n + 2k$.

Podemos então concluir que a probabilidade $f(P, P_0)$ do spin central ser positivo no tempo $t+1$ quando no tempo t os spins da borda têm a probabilidade P , P_- e P_0 de terem o valor $+1$, -1 e zero, respectivamente, é

$$f(P, P_0) = \sum_{n=0}^z C_z^n P_0^n \times \sum_{k=0}^{z-n} C_{z-n}^k P^k (1 - P - P_0)^{z-n-k} A(-z + n + 2k),$$

onde já estamos considerando que $P_- = 1 - P - P_0$ é uma variável dependente. De maneira similar, a probabilidade $f_0(P, P_0)$ do spin central ser nulo será:

$$f_0(P, P_0) = \sum_{n=0}^z C_z^n P_0^n \times \sum_{k=0}^{z-n} C_{z-n}^k P^k (1 - P - P_0)^{z-n-k} B(-z + n + 2k).$$

Seria redundante mencionar a probabilidade $f_-(P, P_0)$ do spin central ser $S_0 = -1$ pois:

$$f(P, P_0) + f_-(P, P_0) + f_0(P, P_0) = 1,$$

como pode ser comprovado facilmente usando-se a relação

$$A(\sigma) + A^{(-)}(\sigma) + B(\sigma) = 1.$$

Uma grandeza que tem um apelo intuitivo maior que P é a magnetização por spin m , onde

$$m \equiv P - P_- = 2P + P_0 - 1.$$

A grande vantagem de trabalhar com o parâmetro de ordem m e com P_0 é que este último é a probabilidade do spin ser nulo. Quando P_0 é nulo (ou pequeno) o sistema é do tipo Ising, pois neste caso os estados importantes são $S_i = \pm 1$.

Uma outra escolha, talvez mais usual, seria Q , onde,

$$Q \equiv P + P_- = 1 - P_0,$$

ou seja,

$$P = \frac{Q + m}{2},$$

$$P_- = \frac{Q - m}{2}.$$

Para concluir estas transformações, vamos considerar

$$g(m, Q) \equiv f_+(P, P_0) - f_-(P, P_0),$$

$$g_0(m, Q) \equiv f_+(P, P_0) + f_-(P, P_0),$$

onde $g(m, Q)$ é a magnetização de um sítio no tempo $t + 1$, quando num tempo t os seus z vizinhos tiverem $S_i = +1$ com probabilidade P e $S_i = 0$ com probabilidade P_0 .

Lembrando que $A^{(-)}(\sigma) = A(-\sigma)$ os fatores de campo terão a forma:

$$\tilde{A}(\sigma) \equiv A(\sigma) - A(-\sigma) = \frac{2e^{-d_0/t} \sinh(\sigma/zt)}{2e^{-d_0/t} \cosh(\sigma/zt) + 1},$$

$$\tilde{B}(\sigma) \equiv A(\sigma) + A(-\sigma) = \frac{2e^{-d_0/t} \cosh(\sigma/zt)}{2e^{-d_0/t} \cosh(\sigma/zt) + 1}.$$

Até agora fizemos considerações supondo apenas uma realização da anisotropia. Estamos portanto calculando a magnetização para valores fixos da anisotropia. Ao considerarmos a distribuição de probabilidades da anisotropia estamos calculando uma média temperada típica. Isso é feito facilmente pois

$$\tilde{A}(\sigma, p, d, t) = \int \prod_{i=1}^z dD_i p(D_i) \tilde{A}(\sigma, p, D_i, t),$$

$$\tilde{B}(\sigma, p, d, t) = \int \prod_{i=1}^z dD_i p(D_i) \tilde{B}(\sigma, p, D_i, t),$$

onde $d = D/zJ$. Obtemos

$$\tilde{A}(\sigma, p, d, t) = 2 \sinh(\sigma/zt) \times \left(\frac{pe^{-d/t}}{2e^{-d/t} \cosh(\sigma/zt) + 1} + \frac{1-p}{2 \cosh(\sigma/zt) + 1} \right),$$

$$\tilde{B}(\sigma, p, d, t) = 2 \cosh(\sigma/zt) \times \left(\frac{pe^{-d/t}}{2e^{-d/t} \cosh(\sigma/zt) + 1} + \frac{1-p}{2 \cosh(\sigma/zt) + 1} \right),$$

onde por simplicidade usaremos apenas $\tilde{A}(\sigma)$ e $\tilde{B}(\sigma)$.

Temos finalmente que

$$g(m, Q) = \sum_{n=0}^z \frac{C_z^n}{2^{z-n}} (1-Q)^n \times$$

$$\sum_{k=0}^{z-n} C_{z-n}^k (Q+m)^k (Q-m)^{z-n-k} \tilde{A}(-z+n+2k),$$

$$g_0(m, Q) = \sum_{n=0}^z \frac{C_z^n}{2^{z-n}} (1-Q)^n \times$$

$$\sum_{k=0}^{z-n} C_{z-n}^k (Q+m)^k (Q-m)^{z-n-k} \tilde{B}(-z+n+2k).$$

No limite de coordenação infinita nós recuperamos os resultados de campo médio (Apêndice D.1 e Capítulo II).

Para encontrar uma eventual linha de transição de segunda ordem, vamos expandir $g(m, Q)$ em uma série de potências de m em torno de $m = 0$.

Nós obtemos (Apêndice D.2)

$$g(m, Q) = \mathcal{A}_0 + \mathcal{A}_1 m + \mathcal{A}_2 m^2 + \mathcal{A}_3 m^3 + \mathcal{A}_4 m^4 + \mathcal{A}_5 m^5 + \dots$$

onde $\mathcal{A}_j = \mathcal{A}_j(Q)$.

A linha de segunda ordem é definida por:

$$Q^* = g_0(0, Q^*),$$

$$\mathcal{A}_1(Q^*) = 1,$$

$$\mathcal{A}_3(Q^*) < 0.$$

Para encontrar o ponto tricrítico sobre essa linha deveremos impor:

$$\begin{aligned}\mathcal{A}_3(Q^*) &= 0, \\ \mathcal{A}_5(Q^*) &> 0.\end{aligned}$$

Numa região em que a transição for de primeira ordem, a curva definida por $\mathcal{A}_1(Q^*) = 1$ e $\mathcal{A}_3(Q^*) > 0$ nos dará o limite de estabilidade da fase paramagnética. Encontramos o limite de estabilidade da solução ferromagnética usando iterativamente o mapa bidimensional, com um valor inicial que caracterize esta fase: $P = 1$ e $P_0 = 0$; que significa: $m = Q = 1$. Os limites de estabilidade se encontram suavemente em $T = T_{tr}$.

Este modelo já foi analisado na aproximação de campo médio [5, 15] considerando o limite de coordenação infinita. São obtidos quatro tipos de diagramas de fases qualitativamente distintos à medida que a diluição p varia.

Quando $p = 1$ existe uma linha de transição de primeira ordem para $T < T_{tr}$ e para $T > T_{tr}$ temos uma linha de transição de segunda ordem (tipo I).

Quando $0,982 < p < 1$ (tipo II), o diagrama é semelhante ao anterior, a diferença é que surge uma região com fase ordenada para T pequeno e D grande, separada da fase desordenada por uma linha de transição de segunda ordem. Quando $p = 1$ o campo cristalino atua em todos os sítios. Portanto se a energia térmica for pequena ($T \rightarrow 0$), quando D for grande, o estado de spin privilegiado em cada sítio será $S_i = 0$. Em campo médio - ou interação de alcance infinito - todos os spins interagem entre si. No limite de coordenação infinita, se a diluição for um infinitésimo diferente da unidade, existirá um número finito de sítios onde $D = 0$ e nestas circunstâncias (T pequeno e

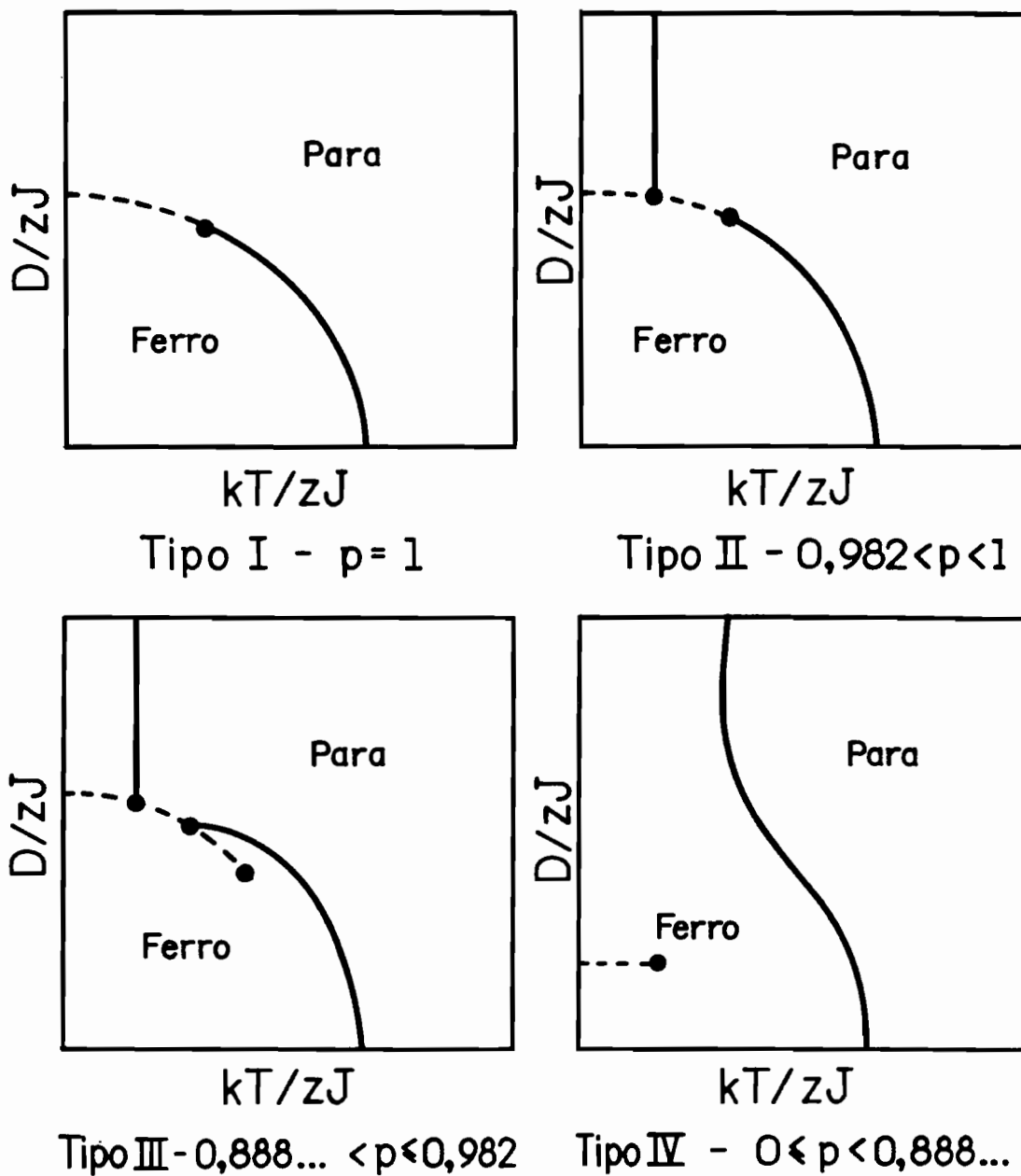


Figura 3.5: Diagramas de fases do modelo de Ising com anisotropia aleatória para diversos valores da concentração p , na aproximação de campo médio.

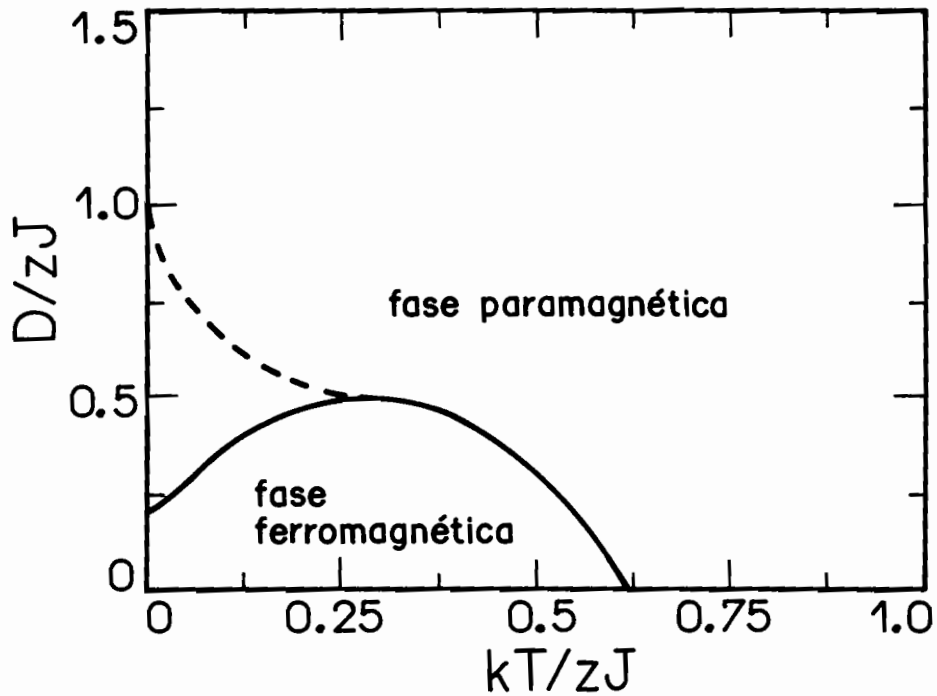


Figura 3.6: Diagrama de fases do modelo de Ising com anisotropia aleatória para $z = 3$ e $p = 1$.

D grande) os estados de spin privilegiados nestes sítios serão $S_i = \pm 1$. Essa é a razão da característica em comum dos diagramas de fases para $p < 1$.

Quando $0,888 \dots < p < 0,982$ (tipo III) temos um ponto crítico terminal duplo (DCEP) dentro da fase ordenada e dois pontos críticos terminais (CEP).

Quando $0 \leq p < 0,888 \dots$ (tipo IV) temos apenas uma linha de segunda ordem separando as fases ordenada e desordenada.

Como vamos usar a expansão de $g(m, Q)$ em série de potências de m , sempre que nos referirmos ao sinal de $\mathcal{A}_3(Q^*)$ ou $\mathcal{A}_5(Q^*)$ estará implícito que ele foi calculado sobre a curva

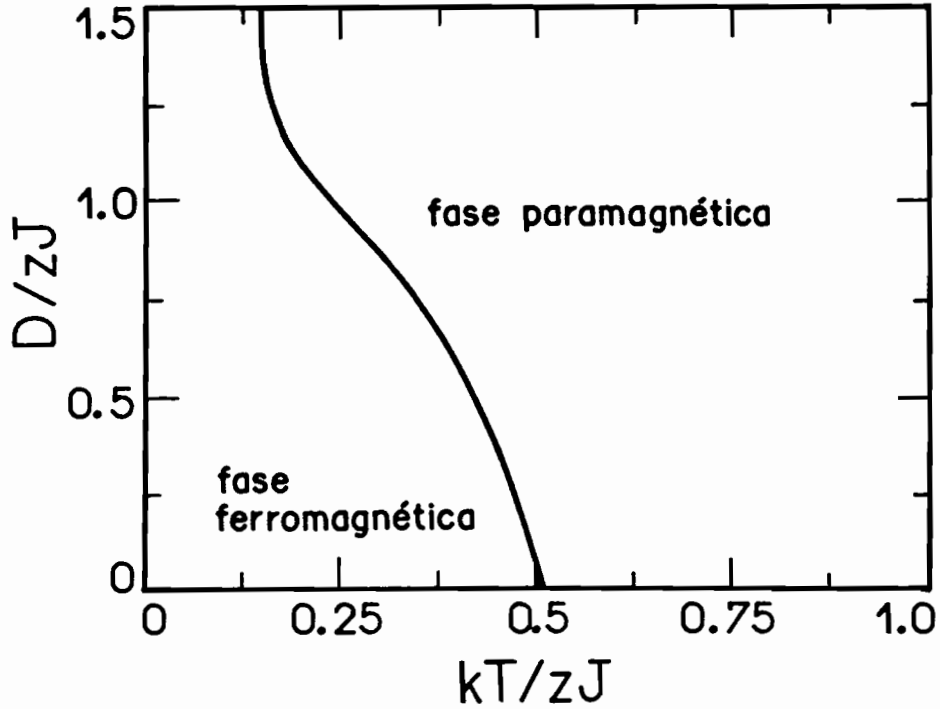


Figura 3.7: Diagrama de fases do modelo de Ising com anisotropia aleatória para $z = 3$ e $p = 0,45$.

$\mathcal{A}_1(Q^*) = 1$. Esta curva será uma linha contínua nas figuras de 3.6 até 3.10, enquanto os limites de estabilidade serão linhas tracejadas. Através da construção de Maxwell poderíamos construir a linha de transição de primeira ordem entre os limites de estabilidade calculados.

Para $z = 3$ obtivemos apenas os diagramas do tipo I e tipo IV. Quando $0,6667 \leq p \leq 1$ encontramos o diagrama do tipo I pois $\mathcal{A}_3(Q^*) > 0$ para $T < T_{tr}$ e $\mathcal{A}_3(Q^*) < 0$ para $T > T_{tr}$ (Figura 3.6). Quando $0,4842 \leq p < 0,6667$ o valor de $\mathcal{A}_3(Q^*)$ é sempre negativo, mas em baixas temperaturas a anisotropia crítica é sempre finita. Quando $0,4842 < p \leq 0$ o valor de $\mathcal{A}_3(Q^*)$ é sempre negativo, o que equivale a dizer

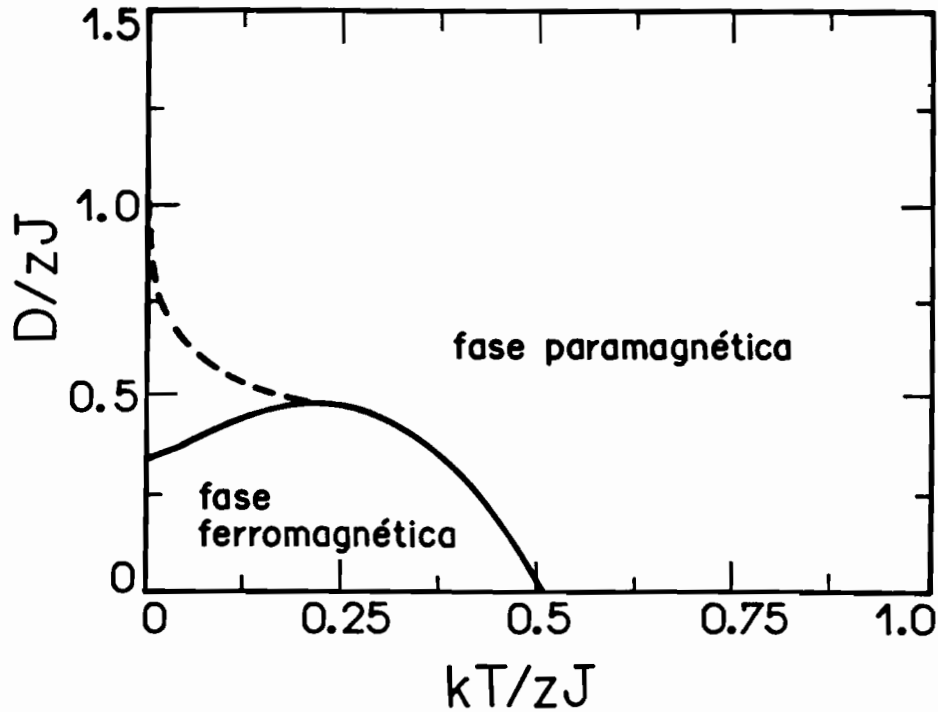


Figura 3.8: Diagrama de fases do modelo de Ising com anisotropia aleatória para $z = 10$ e $p = 0,95$.

que a transição é sempre de segunda ordem (tipo IV). Em baixas temperaturas o sistema é ferromagnético (Figura 3.7).

Para $3 \leq z < 8$ os diagramas de fases são qualitativamente equivalentes.

Nós analisamos numericamente sistemas com até vinte vizinhos. Encontramos resultados similares quando variamos o número de coordenação a partir de $z = 8$.

Vamos mostrar a seguir os resultados para $z = 10$, onde encontramos diagramas dos tipos I, II e IV. Quando $0,835 \leq p \leq 1$ encontramos o diagrama do tipo I, pois $\mathcal{A}_3(Q^*) > 0$ para $T < T_{tr}$ e $\mathcal{A}_3(Q^*) < 0$ para $T > T_{tr}$ (Figura 3.8). Quando $0,765 \leq p < 0,835$ encontramos o diagrama do tipo II.

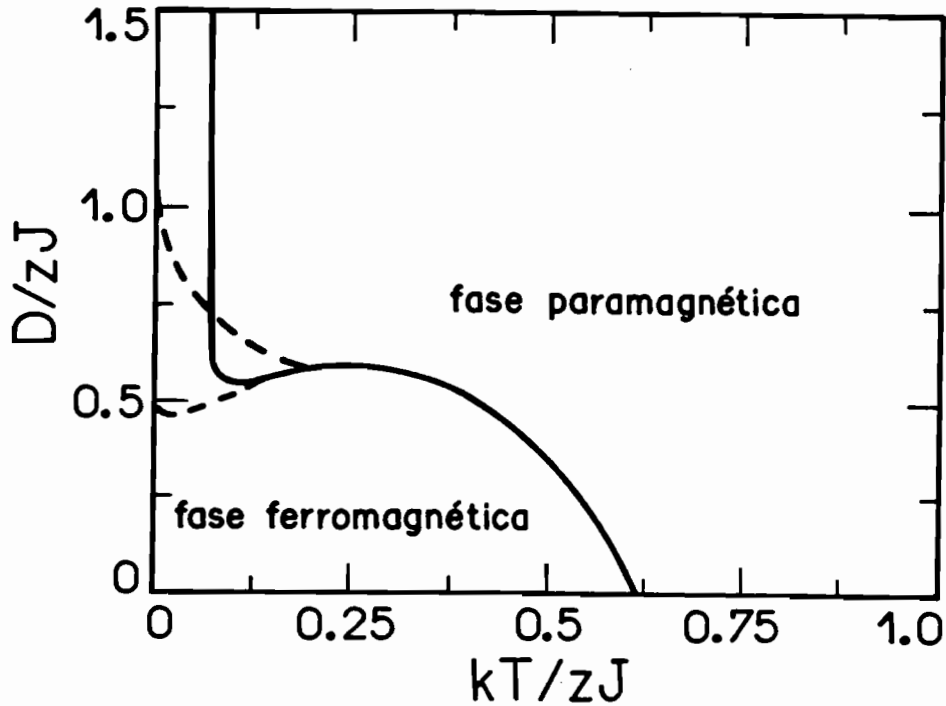


Figura 3.9: Diagrama de fases do modelo de Ising com anisotropia aleatória para $z = 10$ e $p = 0,80$.

Quando T é grande $\mathcal{A}_3(Q^*)$ é negativo. À medida que diminuimos a temperatura ele passa por um zero ($T = T_{tr}$) tornando-se positivo, e passa novamente por outro zero tornando-se negativo outra vez.

Como já foi dito $\mathcal{A}_3(Q^*) < 0$ é uma linha de segunda ordem. Na vizinhança da região onde $\mathcal{A}_3(Q^*) > 0$ nós temos diversas curvas que são limites de estabilidade. A própria curva $\mathcal{A}_3(Q^*) > 0$ é o limite de estabilidade da fase desordenada (Figura 3.9). Acima dela encontramos o limite de estabilidade da fase ordenada. No interior da fase ordenada encontramos os limites de estabilidade das fases ferro I e ferro II. Quando $0 \leq p < 0,765$ encontramos o diagrama do tipo IV pois $\mathcal{A}_3(Q^*)$

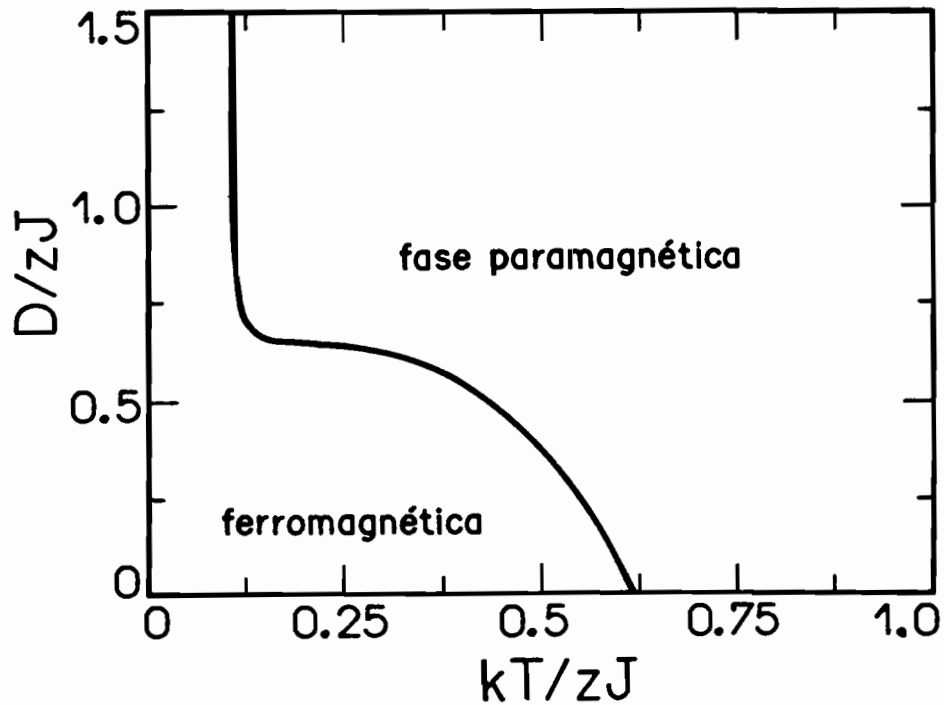


Figura 3.10: Diagrama de fases do modelo de Ising com anisotropia aleatória para $z = 10$ e $p = 0,75$.

é sempre negativo (Figura 3.10) e temos uma linha de transição de segunda ordem.

Quando $z < 8$ encontramos os diagramas do tipo I e IV. Analisamos até $z = 20$, e para $8 \leq z \leq 20$ encontramos os diagramas dos tipos I, II e IV.

Para z finito nós temos um mapeamento bidimensional onde m e Q são variáveis interdependentes. No limite de coordenação infinita temos um mapa unidimensional para m e $Q = Q(m)$. Certamente reside neste fato a diferença entre os resultados para z finito e z infinito, onde no último caso temos o diagrama do tipo III, ausente para z finito.

Quando analisamos este modelo no limite de coordenação

infinita ele apresenta uma enorme riqueza de nuances à medida que a diluição varia. À medida que N diminui, esta riqueza torna-se menor. Para uma dada diluição, o número de sítios com anisotropia não nula varia - obviamente - com N . O tamanho destes aglomerados anisotrópicos N_a define as propriedades do sistema. Quando N é grande, o tamanho relativo destes aglomerados N_a/N varia mais suavemente que quando N for pequeno.

Capítulo 4

Modelo de Ising com spin

$$S = 3/2$$

O modelo de Ising com $S = 1$, incluindo termos de troca bi-quadráticos e anisotropia de campo cristalino, conhecido como modelo de Blume, Emery e Griffiths [6] teve um papel importante no desenvolvimento da teoria do ponto tricrítico.

Um caso especial deste modelo, conhecido como modelo de Blume[8] e Capel[12] foi analisado anteriormente neste trabalho.

Tem havido poucos trabalhos sobre o modelo de Ising com spin semi-inteiro $S \geq 3/2$. Como nesse caso não temos o estado $S_i = 0$, imaginava-se que não existiriam fenômenos multicríticos na presença de uma anisotropia de campo cristalino. Considerando-se a aproximação de campo médio, a linha de transição ordem-desordem é inteiramente de segunda ordem. Mas só recentemente[33, 48] foi despertado o interesse para se analisar o interior da fase ordenada.

Como já foi mencionado, a possibilidade de analisar um modelo de vidro de spins com uma transição de fases de primeira

ordem nos motivou a estudar este hamiltoniano de Ising com $S = 3/2$ e anisotropia de campo cristalino, com interação de troca que envolvesse elementos de aleatoriedade.

Como veremos a seguir, no caso puro, no modelo de van Hemmen e no modelo de Hopfield encontramos uma transição de primeira ordem no interior da fase ordenada.

4.1 Caso puro - solução de campo médio

Recentemente este modelo foi objeto de estudo de vários autores[33, 48].

Consideremos o hamiltoniano:

$$\mathcal{H} = -\frac{J}{2N} \left(\sum_{i=1}^N S_i \right)^2 + D \sum_{i=1}^N S_i^2,$$

onde $J > 0$ é a interação de troca e N é o número de sítios.

A função de partição desse sistema tem a forma:

$$\mathcal{Z} = Tr \exp \left\{ \frac{\beta J}{2N} \left(\sum_{i=1}^N S_i \right)^2 - \beta D \sum_{i=1}^N S_i^2 \right\}.$$

Usando-se a identidade gaussiana

$$\exp \{ \lambda a^2 \} = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dx}{\sqrt{2\pi}} \exp \left\{ -\frac{x^2}{2} + \sqrt{2\lambda} a x \right\},$$

encontramos

$$\mathcal{Z} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \text{Tr} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp \left\{ -x^2 + 2x \sqrt{\frac{\beta J}{2N}} \sum_{i=1}^N S_i - \beta D \sum_{i=1}^N S_i^2 \right\}.$$

Definindo uma nova variável $m \equiv (2/\beta JN)^{1/2}x$ teremos

$$\begin{aligned} \mathcal{Z} &= \left(\frac{N\beta J}{2\pi} \right)^{1/2} \int_{-\infty}^{+\infty} dm \exp \left\{ -\frac{\beta JN}{2} m^2 \right\} \times \\ &\quad \text{Tr} \exp \left\{ \sum_{i=1}^N (\beta JmS_i - \beta DS_i^2) \right\}. \end{aligned}$$

Mas

$$\begin{aligned} \text{Tr} \exp \left[\sum_{i=1}^N (\beta JmS_i - \beta DS_i^2) \right] &= \\ &= \{ \text{Tr} \exp [\beta JmS_i - \beta DS_i^2] \}^N \\ &= \exp \{ N \ln [\text{Tr} \exp (\beta JmS_i - \beta DS_i^2)] \}. \end{aligned}$$

A função de partição poderá ser escrita como :

$$\mathcal{Z} = \left(\frac{N}{2\pi t} \right)^{1/2} \int_{-\infty}^{+\infty} dm \exp \left\{ -\frac{N}{t} f(m) \right\},$$

$$f(m) = \frac{m^2}{2} - t \ln \{ \text{Tr} \exp [(mS - dS^2)/t] \},$$

onde $t = (\beta J)^{-1}$ e $d = D/J$.

No limite termodinâmico, esta integral pode ser avaliada usando-se o método de Laplace[54]. O extremo de $f(m)$ acontece quando

$$m = \frac{\text{Tr}\{S \exp[(mS - dS^2/t)]\}}{\text{Tr}\{\exp[(mS - dS^2/t)]\}}.$$

Particularizando para $S = 3/2$, teremos:

$$f(m) = \frac{m^2}{2} - t \ln \left\{ 2e^{-d/4t} \left[e^{-2d/t} \cosh \left(\frac{3m}{2t} \right) + \cosh \left(\frac{m}{2t} \right) \right] \right\},$$

e o extremo de $f(m)$ será dado por

$$m = \frac{3e^{-2d/t} \sinh(3m/2t) + \sinh(m/2t)}{2e^{-2d/t} \cosh(3m/2t) + 2 \cosh(m/2t)}.$$

Para calcular a linha de transição ordem-desordem, vamos expandir $f(m)$ em uma série de potências em torno de $m = 0$. Como $f(m)$ é par em m , essa expansão só terá potências pares de m

$$f(m) = \mathcal{A}_0 + \mathcal{A}_2 m^2 + \mathcal{A}_4 m^4 + \dots$$

onde:

$$\mathcal{A}_0 = \frac{d}{4} - t \ln[2(e^{-2d/t} + 1)],$$

$$\mathcal{A}_2 = \frac{1}{2} - \frac{9e^{-2d/t} + 1}{8t(e^{-2d/t} + 1)},$$

$$\mathcal{A}_4 = \frac{32e^{-4d/t} + (7e^{-2d/t} + 1)^2}{192t^3(e^{-2d/t} + 1)^2}.$$

A curva $\mathcal{A}_2 = 0$ dá o limite de estabilidade da fase paramagnética. O eventual ponto tricrítico existirá quando ao longo da curva anterior tivermos $\mathcal{A}_4 = 0$. Como $\mathcal{A}_4 > 0$, a curva $\mathcal{A}_2 = 0$ é uma linha de transição de fases de segunda ordem. Essa curva pode ser expressa como

$$d = \frac{t}{2} \ln \left(\frac{9 - 4t}{4t - 1} \right).$$

Para analisar o estado fundamental, vamos considerar $f(m)$ em baixas temperaturas. Como $f(m)$ é uma função par de m , vamos analisar apenas $m > 0$. A energia livre terá a forma:

$$f(m) = \frac{m^2}{2} - \frac{m}{2} + \frac{d}{4} - t \ln [1 + e^{(m-2d)/t}].$$

Quando $t = 0$, estritamente, teremos:

i) para $m < 2d$

$$f(m) = \frac{m^2}{2} - \frac{m}{2} + \frac{d}{4},$$

$$\frac{\partial f}{\partial m} = 0 \Rightarrow \tilde{m} = \frac{1}{2}.$$

Logo para $d > 1/4$ a solução $m = 1/2$ é estável, com energia livre dada por :

$$f(m = 1/2) = -\frac{1}{8} + \frac{d}{4}.$$

ii) para $m > d$

$$f(m) = \frac{m^2}{2} - \frac{3m}{2} + \frac{9d}{4},$$

$$\frac{\partial f}{\partial m} = 0 \Rightarrow \tilde{m} = \frac{3}{2}.$$

Logo para $d < 3/4$ a solução $m = 3/2$ é estável, com energia livre dada por :

$$f(m = 3/2) = -\frac{9}{8} + \frac{9d}{4}.$$

Tendo em vista as formas de $m = 1/2$ e $m = 3/2$, percebe-se claramente que existirá em $t = 0$ uma transição de fases de primeira ordem para $d_c = 1/2$. Analisando numericamente a energia livre para outros valores de temperatura, nós traçamos a linha de transição de primeira ordem. O diagrama de fases completo deste modelo se encontra na figura 4.1 onde a fase ordenada se caracteriza por ter o parâmetro de ordem $m \neq 0$.

4.2 O modelo de van Hemmen

A partir dos trabalhos de Mydosh e Canella [39], houve um empenho muito grande dos físicos estatísticos para encontrar um modelo teórico que explicasse aquelas experiências. Concomitante ao trabalho de Thouless, Anderson e Palmer [53], houve a análise de Sherrington e Kirkpatrick [34] que será estudada no item seguinte. Devido às peculiaridades desta última análise, houve diversas propostas alternativas. Entre elas a de

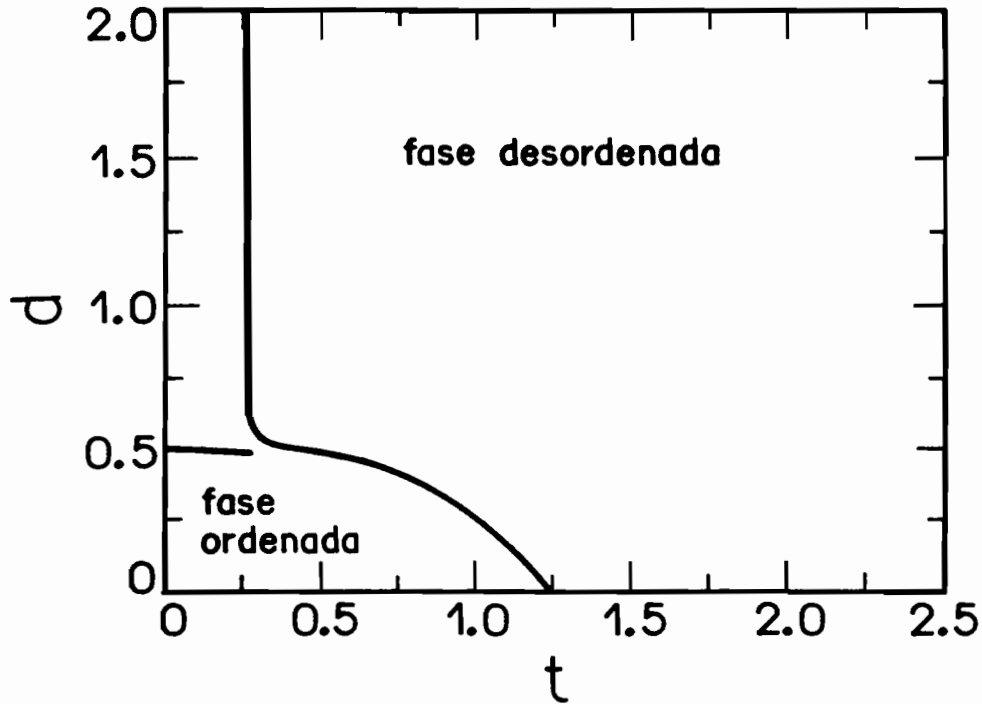


Figura 4.1: Diagrama de fases dos modelos de Ising (campo médio), de van Hemmen e de Hopfield.

van Hemmen [2, 26, 28], que propõe um modelo de solução muito mais simples que o de Sherrington e Kirkpatrick.

Curiosamente este modelo apresenta um diagrama de fases idêntico ao modelo puro (com variáveis adequadamente redefinidas). Neste modelo com elementos de aleatoriedade, a magnetização é nula. O parâmetro de ordem q será definido a seguir, e a fase ordenada se caracteriza por $q \neq 0$.

Consideremos o hamiltoniano

$$\mathcal{H} = -\frac{J}{N} \sum_{(i,j)} (\xi_i \eta_j + \xi_j \eta_i) S_i S_j + D \sum_{i=1}^N S_i^2,$$

onde $J > 0$ é a interação de troca, (i, j) é a soma sobre todos os

pares de sítios e ξ_i e η_j são variáveis aleatórias independentes com a mesma distribuição de probabilidades, definida por

$$\mathcal{P}(\mu_i) = \frac{1}{2} \{ \delta(\mu_i - 1) + \delta(\mu_i + 1) \}.$$

Vamos colocar o hamiltoniano em uma forma mais conveniente,

$$\mathcal{H} = -\frac{J}{2N} \left[\left(\sum_{i=1}^N \xi_i S_i \right) \left(\sum_{j=1}^N \eta_j S_j \right) + \left(\sum_{i=1}^N \eta_i S_i \right) \left(\sum_{j=1}^N \xi_j S_j \right) \right] + D \sum_{i=1}^N S_i^2.$$

Definindo

$$S_1 = \sum_{i=1}^N \xi_i S_i \quad e \quad S_2 = \sum_{i=1}^N \eta_i S_i,$$

encontramos

$$\mathcal{H} = -\frac{J}{N} S_1 S_2 + D \sum_{i=1}^N S_i^2.$$

Como

$$4S_1 S_2 = (S_1 + S_2)^2 - (S_1 - S_2)^2,$$

a função de partição terá a forma

$$\mathcal{Z} = Tr \exp \left[\frac{\beta J}{4N} (S_1 + S_2)^2 - \frac{\beta J}{4N} (S_1 - S_2)^2 - \beta D \sum_{i=1}^N S_i^2 \right].$$

Usando a identidade gaussiana, definida anteriormente, teremos

$$\mathcal{Z} = \frac{1}{\pi} \int dx \int dy Tr \exp \{ -x^2 - y^2$$

$$+2x \left(\frac{\beta J}{4N} \right)^{1/2} (S_1 + S_2) + 2iy \left(\frac{\beta J}{4N} \right)^{1/2} (S_1 - S_2) - \beta D \sum_{j=1}^N S_j^2 \Big\}.$$

Redefinindo as variáveis de integração ,

$$x = (\beta J N)^{1/2} q_1 \quad e \quad y = (\beta J N)^{1/2} q_2,$$

temos

$$\begin{aligned} \mathcal{Z} &= \frac{\beta J N}{4\pi} \int dq_1 \int dq_2 \text{Tr} \exp \{ -\beta J N (q_1^2 + q_2^2) \\ &+ \beta J q_1 (S_1 + S_2) + i\beta J q_2 (S_1 - S_2) - \beta D \sum_{j=1}^N S_j^2 \}. \end{aligned}$$

ou ainda

$$\begin{aligned} \mathcal{Z} &= \frac{\beta J N}{4\pi} \int dq_1 \int dq_2 \exp \{ -\beta J N (q_1^2 + q_2^2) \} \times \\ &\text{Tr} \prod_{j=1}^N \exp \{ \beta J q_1 (\xi_j + \eta_j) S_j + i\beta J q_2 (\xi_j - \eta_j) S_j - \beta D S_j^2 \}. \end{aligned}$$

Por outro lado

$$\text{Tr} \prod_{j=1}^N e^{a\xi_j S_j} = \text{Tr}_1 e^{a\xi_1 S_1} \text{Tr}_2 e^{a\xi_2 S_2} \dots \text{Tr}_N e^{a\xi_N S_N}.$$

Como os spins S_i aparecem de maneira idêntica e sem interação entre si, temos

$$\begin{aligned} \text{Tr} \prod_{j=1}^N e^{a\xi_j S_j} &= \text{Tr} \prod_{j=1}^N e^{a\xi_j S} \\ &= \exp \left\{ N \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \ln [\text{Tr} e^{a\xi_j S}] \right\}. \end{aligned}$$

No limite $N \rightarrow \infty$ podemos usar a lei dos grandes números e obter

$$\text{Tr} \prod_{j=1}^N e^{a\xi_j S_j} = \exp \left\{ N \langle \ln \text{Tr} e^{a\xi S} \rangle_{\xi} \right\}.$$

A função de partição terá então a forma

$$\mathcal{Z} = \frac{\beta J}{4N} \int dq_1 \int dq_2 \exp \{-\beta J N f(q_1, q_2)\},$$

onde

$$f(q_1, q_2) = q_1^2 + q_2^2$$

$$-\frac{1}{\beta J} \langle \ln \text{Tr} \exp \{ \beta J (\xi + \eta) q_1 S + i \beta J (\xi - \eta) q_2 S - \beta D S^2 \} \rangle_{\xi, \eta}.$$

A integração anterior será calculada pelo método de Laplace. O extremo de $f(q_1, q_2)$ acontece para

$$\tilde{q}_1 = \frac{1}{2} \left\langle \frac{\text{Tr}(\xi + \eta) S \exp \{ \beta J (\xi + \eta) \tilde{q}_1 S + i \beta J (\xi - \eta) \tilde{q}_2 S - \beta D S^2 \}}{\text{Tr} \exp \{ \beta J (\xi + \eta) \tilde{q}_1 S + i \beta J (\xi - \eta) \tilde{q}_2 S - \beta D S^2 \}} \right\rangle_{\xi, \eta},$$

$$\tilde{q}_2 = \frac{i}{2} \left\langle \frac{\text{Tr}(\xi - \eta) S \exp \{ \beta J (\xi + \eta) \tilde{q}_1 S + i \beta J (\xi - \eta) \tilde{q}_2 S - \beta D S^2 \}}{\text{Tr} \exp \{ \beta J (\xi + \eta) \tilde{q}_1 S + i \beta J (\xi - \eta) \tilde{q}_2 S - \beta D S^2 \}} \right\rangle_{\xi, \eta}.$$

Pode ser mostrado[26], para esse caso genérico, que no extremo de $f(q_1, q_2)$ teremos $\tilde{q}_2 = 0$.

Considerando a distribuição de probabilidades bimodal, encontramos

$$\begin{aligned} f(q_1, q_2) &= q_1^2 + q_2^2 - \frac{1}{2\beta J} \ln \text{Tr} \exp \{ 2\beta J q_1 S - \beta D S^2 \} \\ &\quad - \frac{1}{2\beta J} \ln \text{Tr} \exp \{ 2i\beta J q_2 S - \beta D S^2 \}. \end{aligned}$$

O extremo de $f(q_1, q_2)$ é dado por

$$\tilde{q}_1 = \frac{1 \operatorname{Tr} S \exp\{2\beta J \tilde{q}_1 S - \beta D S^2\}}{2 \operatorname{Tr} \exp\{2\beta J \tilde{q}_1 S - \beta D S^2\}},$$

$$\tilde{q}_2 = \frac{i \operatorname{Tr} S \exp\{2i\beta J \tilde{q}_2 S - \beta D S^2\}}{2 \operatorname{Tr} \exp\{2i\beta J \tilde{q}_2 S - \beta D S^2\}}.$$

Considerando $S = 3/2$, obtemos

$$f(\tilde{q}_1, \tilde{q}_2) = \tilde{q}_1^2 + \tilde{q}_2^2$$

$$-\frac{t}{2} \ln\{e^{-d/4t}[2e^{-2d/t} \cosh(3\tilde{q}_1/t) + 2 \cosh(\tilde{q}_1/t)]\}$$

$$-\frac{t}{2} \ln\{e^{-d/4t}[2e^{-2d/t} \cos(3\tilde{q}_2/t) + 2 \cos(\tilde{q}_2/t)]\}.$$

É fácil perceber que $f(\tilde{q}_1, \tilde{q}_2) = f_1(\tilde{q}_1) + f_2(\tilde{q}_2)$. Para investigar o limite de estabilidade da fase desordenada, vamos expandir $f_1(\tilde{q}_1)$ e $f_2(\tilde{q}_2)$ em uma série de potências em torno de zero. Como ambas são funções pares, teremos:

$$f_1(\tilde{q}_1) = \mathcal{A}_0 + \mathcal{A}_2 \tilde{q}_1^2 + \mathcal{A}_4 \tilde{q}_1^4 + \dots$$

$$f_2(\tilde{q}_2) = \mathcal{B}_0 + \mathcal{B}_2 \tilde{q}_2^2 + \mathcal{B}_4 \tilde{q}_2^4 + \dots$$

onde

$$\mathcal{A}_0 = \mathcal{B}_0 = \frac{d}{8} - \frac{t}{2} \ln[2(e^{-2d/t} + 1)],$$

$$\mathcal{A}_2 = 1 - \frac{9e^{-2d/t} + 1}{4t(e^{-2d/t} + 1)},$$

$$\mathcal{B}_2 = 1 + \frac{9e^{-2d/t} + 1}{4t(e^{-2d/t} + 1)},$$

$$\mathcal{A}_4 = \mathcal{B}_4 = \frac{32e^{-4d/t} + (7e^{-2d/t} + 1)^2}{24t^3(e^{-2d/t} + 1)^2}.$$

Como \mathcal{B}_2 e \mathcal{B}_4 são sempre positivos, a única solução possível é $\tilde{q}_2 = 0$, como já tínhamos antecipado.

Fazendo $\tilde{q}_1 \equiv q$, a energia livre toma a forma

$$\begin{aligned} f(q) = & q^2 + \frac{d}{4} - \frac{t}{2} \ln(2e^{-2d/t} + 2) \\ & - \frac{t}{2} \ln[2e^{-2d/t} \cosh(3q/t) + 2 \cosh(q/t)], \end{aligned}$$

onde

$$q = \frac{1}{2} \frac{3e^{-2d/t} \sinh(3q/t) + \sinh(q/t)}{2e^{-2d/t} \cosh(3q/t) + 2 \cosh(q/t)},$$

e ainda $t = (\beta J)^{-1}$ e $d = D/J$.

Como $\mathcal{A}_4 > 0$, a curva $\mathcal{A}_2 = 0$ é a linha de transição de segunda ordem entre as fases ordenada e desordenada, dada pela curva

$$d_c = \frac{t}{2} \ln \left(\frac{9 - 4t}{4t - 1} \right).$$

Analisando o estado fundamental, encontramos que em $t = 0$:

i) para $d > 1/4$ a solução $q = 1/4$ é estável, com uma energia livre dada por:

$$f(q = 1/4) = \frac{d}{4} - \frac{1}{16}.$$

ii) para $d < 3/4$ a solução $q = 3/4$ é estável, com uma energia livre dada por:

$$f(q = 3/4) = \frac{5d}{4} - \frac{9}{16}.$$

Comparando as energias livres destas duas soluções encontramos que existirá uma transição de fases de primeira ordem para $d_c = 1/2$.

Uma coincidência extremamente curiosa é que os diagramas de fases dos modelos de van Hemmen, de Hopfield (item seguinte) e da solução de campo médio (item anterior) são exatamente os mesmos, com as variáveis adequadamente redefinidas (Figura 4.1).

4.3 O modelo de Hopfield

O modelo de Hopfield[30] é analisado com a expectativa de explicar as funções cerebrais, e de possíveis aplicações em certas áreas de desenvolvimento da inteligência artificial[3]. A função biológica do cérebro é simplificada, de modo a considerar-se que cada neurônio responde a um impulso contínuo de duas maneiras possíveis: sim ou não. Essa resposta é considerada a atividade do neurônio, que pode ser descrita como uma variável binária: zero ou um, ou como uma variável de spin $S_i = \pm 1$.

Os neurônios interagem entre si via um mecanismo representado por J_{ij} , definido por:

$$J_{ij} = \sum_{\mu=1}^p \xi_i^\mu \xi_j^\mu,$$

onde $\{\xi^\mu\} \equiv (\xi_1^\mu, \xi_2^\mu, \dots, \xi_N^\mu)$ representa um padrão memorizado; μ rotula as diferentes memórias e ξ_i^μ são variáveis aleatórias independentes com mesma distribuição de probabilidades.

O modelo de Mattis com interação de longo alcance é um caso particular deste modelo para $p = 1$ padrão.

Como o modelo de Hopfield para p finito pode ser resolvido sem a utilização do truque de réplicas, nos sentimos motivados a analisar este modelo para $S = 3/2$ e $p = 2$ padrões.

Consideremos o hamiltoniano definido por:

$$\mathcal{H} = -\frac{J}{N} \sum_{(i,j)} (\xi_i \xi_j + \eta_i \eta_j) S_i S_j + D \sum_{i=1}^N S_i^2,$$

onde $J > 0$ é a interação de troca, (i, j) é a soma sobre todos os pares de sítios e as variáveis ξ_i e η_i definidas anteriormente têm distribuição de probabilidades dada por:

$$\mathcal{P}(\mu_i) = \frac{1}{2} \{ \delta(\mu_i - 1) + \delta(\mu_i + 1) \}.$$

O hamiltoniano pode tomar a forma:

$$\mathcal{H} = -\frac{J}{2N} \left(\sum_{i=1}^N \xi_i S_i \right)^2 - \frac{J}{2N} \left(\sum_{i=1}^N \eta_i S_i \right)^2 + D \sum_{i=1}^N S_i^2.$$

Usando a identidade gaussiana, podemos expressar a função de partição do seguinte modo:

$$\mathcal{Z} = \frac{1}{\pi} \int dx \int dy \exp \{-x^2 - y^2 + 2x \left(\frac{\beta J}{2N}\right)^{1/2} \sum_{i=1}^N \xi_i S_i + 2y \left(\frac{\beta J}{2N}\right)^{1/2} \sum_{i=1}^N \eta_i S_i - \beta D \sum_{i=1}^N S_i^2\}.$$

Fazendo uma nova mudança de variáveis, teremos:

$$\mathcal{Z} = \frac{N\beta J}{2\pi} \int dQ_1 \int dQ_2 \exp \left\{ -\frac{N\beta Q_1^2}{2} - \frac{N\beta Q_2^2}{2} \right\} \times \text{Tr} \exp \left\{ +\beta J Q_1 \sum_{i=1}^N \xi_i S_i + \beta J Q_2 \sum_{i=1}^N \eta_i S_i - \beta D \sum_{i=1}^N S_i^2 \right\}.$$

Usando a lei dos grandes números de maneira equivalente ao que foi feito no item anterior, encontramos:

$$\mathcal{Z} = \frac{N\beta J}{2\pi} \int dQ_1 \int dQ_2 \exp \{-N\beta J f(Q_1, Q_2)\},$$

onde

$$f(Q_1, Q_2) = \frac{Q_1^2}{2} + \frac{Q_2^2}{2}$$

$$-\frac{1}{\beta J} \langle \ln \text{Tr} \exp \{ \beta J Q_1 \xi S + \beta J Q_2 \eta S - \beta D S^2 \} \rangle_{\xi, \eta}.$$

Finalmente, fazendo uma última mudança de variáveis :

$$q_1 = \frac{Q_1 + Q_2}{2},$$

$$q_2 = \frac{Q_1 - Q_2}{2},$$

encontramos

$$f(q_1, q_2) = q_1^2 + q_2^2$$

$$-\frac{1}{\beta J} \left\langle \ln \text{Tr} \exp\{\beta J(\xi + \eta)q_1 S + \beta J(\xi - \eta)q_2 S - \beta D S^2\} \right\rangle_{\xi, \eta}.$$

Como nas situações anteriores, vamos usar o método de Laplace para avaliar a integral da função de partição. Os valores \tilde{q}_1 e \tilde{q}_2 que extremizam $f(q_1, q_2)$ são:

$$\tilde{q}_1 = \frac{1}{2} \left\langle \frac{\text{Tr}(\xi + \eta)S \exp\{\beta J(\xi + \eta)\tilde{q}_1 S + \beta J(\xi - \eta)\tilde{q}_2 S - \beta D S^2\}}{\text{Tr} \exp\{\beta J(\xi + \eta)\tilde{q}_1 S + \beta J(\xi - \eta)\tilde{q}_2 S - \beta D S^2\}} \right\rangle_{\xi, \eta},$$

$$\tilde{q}_2 = \frac{1}{2} \left\langle \frac{\text{Tr}(\xi - \eta)S \exp\{\beta J(\xi + \eta)\tilde{q}_1 S + \beta J(\xi - \eta)\tilde{q}_2 S - \beta D S^2\}}{\text{Tr} \exp\{\beta J(\xi + \eta)\tilde{q}_1 S + \beta J(\xi - \eta)\tilde{q}_2 S - \beta D S^2\}} \right\rangle_{\xi, \eta}.$$

Considerando a distribuição de probabilidades bimodal, definida anteriormente, encontramos:

$$\begin{aligned} f(q_1, q_2) = & q_1^2 + q_2^2 \\ & - \frac{1}{2\beta J} \ln \text{Tr} \exp\{2\beta J q_1 S - \beta D S^2\} \\ & - \frac{1}{2\beta J} \ln \text{Tr} \exp\{2\beta J q_2 S - \beta D S^2\}. \end{aligned}$$

onde é fácil perceber que a energia livre é composta de duas funções iguais e somadas, uma de q_1 e a outra de q_2 .

O extremo de $f(q_1, q_2)$ acontece para:

$$q = \frac{1 \text{Tr} S \exp\{2\beta J q S - \beta D S^2\}}{2 \text{Tr} \exp\{2\beta J q S - \beta D S^2\}},$$

onde $q \equiv \tilde{q}_1 = \tilde{q}_2$, e neste extremo a energia livre tem a forma:

$$f(q) = 2q^2 - \frac{1}{\beta J} \ln \text{Tr} \exp\{2\beta J q S - \beta D S^2\}.$$

Particularizando para $S = 3/2$, encontramos:

$$f(q) = 2q^2 + \frac{d}{4} - t \ln \left\{ 2e^{-2d/t} \cosh\left(\frac{3q}{t}\right) + \cosh\left(\frac{q}{t}\right) \right\},$$

$$q = \frac{1}{2} \frac{3e^{-2d/t} \sinh(3q/t) + \sinh(q/t)}{2e^{-2d/t} \cosh(3q/t) + 2 \cosh(q/t)},$$

onde $t = (\beta J)^{-1}$ e $d = D/J$.

Para encontrarmos o limite de estabilidade da fase desordenada, faremos uma expansão de $f(q)$ em uma série de potências em torno de $q = 0$.

$$f(q) = \mathcal{A}_0 + \mathcal{A}_2 q^2 + \mathcal{A}_4 q^4 + \dots$$

onde

$$\mathcal{A}_0 = \frac{d}{4} - t \ln[2(e^{-2d/t} + 1)],$$

$$\mathcal{A}_2 = 4 - \frac{9e^{-2d/t} + 1}{t(e^{-2d/t} + 1)},$$

$$\mathcal{A}_4 = \frac{32e^{-4d/t} + (7e^{-2d/t} + 1)^2}{6t^3(e^{-2d/t} + 1)^2}.$$

De maneira idêntica aos dois itens anteriores, como $\mathcal{A}_4 > 0$, a curva $\mathcal{A}_2 = 0$ é a linha de transição de segunda ordem entre as fases ordenada e desordenada, dada pela curva:

$$d_c = \frac{t}{2} \ln \left(\frac{9 - 4t}{4t - 1} \right).$$

Analisando o estado fundamental, encontramos que em $t = 0$

i) para $d > 1/4$ a solução $q = 1/4$ é estável, com uma energia livre dada por

$$f(q = 1/4) = \frac{d}{4} - \frac{1}{8},$$

ii) para $d < 3/4$ a solução $q = 3/4$ é estável, com uma energia livre dada por

$$f(q = 3/4) = \frac{9d}{4} - \frac{9}{8}.$$

Comparando as energias livres destas duas soluções, encontramos que existirá uma transição de fases de primeira ordem em $t = 0$ para $d_c = 1/2$.

O restante desta linha de transição foi obtida de uma análise numérica, e o diagrama de fases encontra-se na figura 4.1 .

4.4 Vidro de spins com réplicas simétricas

Os resultados obtidos com a aproximação de campo médio, com os modelos de van Hemmen e de Hopfield, nos sugeriram a possibilidade da existência de uma transição de fases de primeira ordem, em baixas temperaturas, no interior da região ordenada, quando analisássemos um modelo de vidros de spins *à la* Sherrington e Kirkpatrick.

A partir do final da década de 70, com o trabalho de Kirkpatrick e Sherrington [49, 34] o conceito de réplicas passou a fazer parte do arsenal de técnicas da Mecânica Estatística para lidar com problemas que envolvem aleatoriedade.

Apesar das fragilidades diagnosticadas por de Almeida e Thouless [4] em um trabalho clássico, Parisi [47] indicou um caminho para solucioná-las, inevitavelmente o primeiro passo para resolver o problema usando réplicas.

Dentro do esquema de simetria entre réplicas Kirkpatrick e Sherrington [34] estudaram o modelo de Ising para spin $S = 1/2$. Ainda dentro deste esquema Ghatak e Sherrington [25] e mais tarde da Costa, Yokoi e Salinas [18], estudaram o modelo de Ising com $S = 1$ e anisotropia de campo cristalino.

Consideremos o hamiltoniano:

$$\mathcal{H} = - \sum_{(i,j)} J_{ij} S_i S_j + D \sum_{i=1}^N S_i^2,$$

onde (i, j) é a soma sobre todos os pares de sítios e a interação de troca J_{ij} é uma variável aleatória com distribuição de probabilidades dada por:

$$\mathcal{P}(J_{ij}) = \left(\frac{N}{2\pi J^2} \right)^{1/2} \exp \left(-\frac{N J_{ij}^2}{2J^2} \right),$$

onde N é o número de sítios e J é a variância. Como é de praxe, vamos analisar o caso temperado, que tem maior relevância física, simbolizado pela média:

$$-\beta F = \langle \ln \mathcal{Z} \rangle_J,$$

onde $\langle \dots \rangle_J$ representa a média sobre a distribuição de probabilidades de J_{ij}

Na essência o truque das réplicas consiste em supor que

$$\langle \ln \mathcal{Z} \rangle_J = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{\langle \mathcal{Z}^n \rangle_J - 1}{n}$$

e

$$\langle \mathcal{Z}^n \rangle_J = \langle \prod_{\alpha=1}^n \mathcal{Z}^{(\alpha)} \rangle_J,$$

onde $\mathcal{Z}^{(\alpha)}$ é a função de partição da réplica α , definida por

$$\mathcal{Z}^{(\alpha)} = \text{Tr} e^{-\beta \mathcal{H}^{(\alpha)}},$$

e $\mathcal{H}^{(\alpha)}$ é o hamiltoniano da réplica α . Ou seja ,

$$\begin{aligned} \mathcal{Z}^n &= \prod_{\alpha=1}^n \mathcal{Z}^{(\alpha)} \\ &= \text{Tr}_1 e^{-\beta \mathcal{H}^{(1)}} \text{Tr}_2 e^{-\beta \mathcal{H}^{(2)}} \dots \text{Tr}_n e^{-\beta \mathcal{H}^{(n)}} \\ &= \text{Tr} \prod_{\alpha=1}^n e^{-\beta \mathcal{H}^{(\alpha)}}. \end{aligned}$$

Como temos $N(N - 1)/2$ pares de sítios podemos escrever

$$\langle Z^n \rangle_J = \left(\frac{N}{2\pi J^2} \right)^{N(N-1)/4} \text{Tr} \int \left\{ \prod_{(i,j)} dJ_{ij} \exp \left[-\frac{NJ_{ij}}{2J^2} \right] \right\} \times \\ \exp \left[\beta \sum_{\alpha=1}^n \sum_{(i,j)} J_{ij} S_i S_j \right] \exp \left[-\beta D \sum_{\alpha=1}^n \sum_{i=1}^N (S_i^\alpha)^2 \right].$$

Temos então $N(N - 1)/2$ integrais independentes do tipo

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dJ_{ij} \exp \left\{ -\frac{NJ_{ij}^2}{2J^2} + \beta J_{ij} \sum_{\alpha=1}^n S_i^\alpha S_j^\alpha \right\} = \\ = \left(\frac{2\pi J^2}{N} \right)^{1/2} \exp \left[\frac{\beta^2 J^2}{2N} \left(\sum_{\alpha=1}^n S_i^\alpha S_j^\alpha \right)^2 \right].$$

Logo

$$\langle Z^n \rangle_J = \text{Tr} \exp \left[\frac{\beta^2 J^2}{2N} \sum_{(i,j)} \left(\sum_{\alpha=1}^n S_i^\alpha S_j^\alpha \right)^2 - \beta D \sum_{\alpha=1}^n \sum_{i=1}^N (S_i^\alpha)^2 \right].$$

Pode-se mostrar que

$$\sum_{(i,j)} \left(\sum_{\alpha=1}^n S_i^\alpha S_j^\alpha \right)^2 = \sum_{(\alpha,\beta)} \left[\sum_{i=1}^N S_i^\alpha S_i^\beta \right]^2 - \sum_{(\alpha,\beta)} \sum_{i=1}^N (S_i^\alpha S_i^\beta)^2 \\ + \frac{1}{2} \sum_{\alpha=1}^n \left[\sum_{i=1}^N (S_i^\alpha)^2 \right]^2 - \frac{1}{2} \sum_{\alpha=1}^n \sum_{i=1}^N (S_i^\alpha)^4.$$

Usando-se esta igualdade, teremos

$$\begin{aligned}
\langle Z^n \rangle_J = & \text{Tr} \exp \left\{ \frac{\beta^2 J^2}{4N} \sum_{\alpha=1}^n \left[\sum_{i=1}^N (S_i^\alpha)^2 \right]^2 - \frac{\beta^2 J^2}{4N} \sum_{\alpha=1}^n \sum_{i=1}^N (S_i^\alpha)^4 \right. \\
& + \frac{\beta^2 J^2}{2N} \sum_{(\alpha,\beta)} \left[\sum_{i=1}^N S_i^\alpha S_i^\beta \right]^2 - \frac{\beta^2 J^2}{2N} \sum_{(\alpha,\beta)} \sum_{i=1}^N (S_i^\alpha S_i^\beta)^2 \\
& \left. - \beta D \sum_{\alpha=1}^n \sum_{i=1}^N (S_i^\alpha)^2 \right\}.
\end{aligned}$$

Usando-se a identidade gaussiana

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

obtemos

$$\begin{aligned}
\langle Z \rangle_J = & \left[\int \prod_{\alpha=1}^n \frac{dx_\alpha}{\sqrt{2\pi}} e^{-x_\alpha^2/2} \right] \left[\int \prod_{(\alpha,\beta)} \frac{dy_{\alpha\beta}}{\sqrt{2\pi}} e^{-y_{\alpha\beta}^2/2} \right] \times \\
& \text{Tr} \exp \left\{ \left(\frac{\beta^2 J^2}{2N} \right)^{1/2} \sum_{\alpha=1}^n \sum_{i=1}^N x_\alpha (S_i^\alpha)^2 \right. \\
& + \left(\frac{\beta^2 J^2}{N} \right)^{1/2} \sum_{(\alpha,\beta)} \sum_{i=1}^N y_{\alpha\beta} S_i^\alpha S_i^\beta \\
& - \frac{\beta^2 J^2}{4N} \sum_{\alpha=1}^n \sum_{i=1}^N (S_i^\alpha)^4 - \frac{\beta^2 J^2}{2N} \sum_{(\alpha,\beta)} \sum_{i=1}^N (S_i^\alpha S_i^\beta)^2 \\
& \left. - \beta D \sum_{\alpha=1}^n \sum_{i=1}^N (S_i^\alpha)^2 \right\}.
\end{aligned}$$

Fazendo as mudanças de variáveis:

$$x_\alpha = \left(\frac{\beta^2 J^2 N}{2} \right)^{1/2} p_\alpha,$$

$$y_{\alpha\beta} = (\beta^2 J^2 N)^{1/2} q_{\alpha\beta},$$

e desprezando termos da ordem de N^{-1} frente aos da ordem de $N^{-1/2}$, teremos

$$\langle Z \rangle_{J=0} = \left(\frac{\beta^2 J^2 N}{2} \right)^{n/2} (\beta^2 J^2 N)^{n(n-1)/4} \times$$

$$\left[\int \prod_{\alpha=1}^n \frac{dp_\alpha}{\sqrt{2\pi}} \exp \left\{ -\frac{\beta^2 J^2 N}{4} p_\alpha^2 \right\} \right] \left[\int \prod_{(\alpha,\beta)} \frac{dq_{\alpha\beta}}{\sqrt{2\pi}} \exp \left\{ -\frac{\beta^2 J^2 N}{2} q_{\alpha\beta}^2 \right\} \right] \times$$

$$\text{Tr} \exp \left\{ \frac{\beta^2 J^2}{2} \sum_{\alpha=1}^n \sum_{i=1}^N p_\alpha (S_i^\alpha)^2 \right.$$

$$\left. + \beta^2 J^2 \sum_{(\alpha,\beta)} \sum_{i=1}^N q_{\alpha\beta} S_i^\alpha S_i^\beta - \beta D \sum_{\alpha=1}^n \sum_{i=1}^N (S_i^\alpha)^2 \right\}.$$

Os somatórios sobre os sítios i aparecem de maneira equivalente em todos os termos, significando que teremos um produto de N termos com a mesma dependência no sítio i . Chamaremos cada um desses termos de z_n e usaremos que

$$z_n^N = \exp\{N \ln z_n\}.$$

A energia livre por spin é dada por

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

Assim temos :

$$-\beta f = \lim_{N \rightarrow \infty} \lim_{n \rightarrow 0} (nN)^{-1} \left[\int \prod_{\alpha=1}^n \frac{dp_{\alpha}}{\sqrt{2\pi}} \right] \times \\ \left[\int \prod_{(\alpha,\beta)} \frac{dq_{\alpha\beta}}{\sqrt{2\pi}} \right] \{ \exp [-N F_n(p_{\alpha}, q_{\alpha\beta})] - 1 \},$$

onde

$$F_n(p_{\alpha}, q_{\alpha\beta}) = \frac{\beta^2 J^2}{4} \sum_{\alpha=1}^n p_{\alpha}^2 + \frac{\beta^2 J^2}{2} \sum_{(\alpha,\beta)} q_{\alpha\beta}^2 - \ln z_n$$

e

$$z_n = Tr \exp \left\{ \frac{\beta^2 J^2}{2} \sum_{\alpha=1}^n p_{\alpha} (S^{\alpha})^2 + \beta^2 J^2 \sum_{(\alpha,\beta)} q_{\alpha\beta} S^{\alpha} S^{\beta} \right. \\ \left. - \beta D \sum_{\alpha=1}^n (S^{\alpha})^2 \right\}.$$

A maneira padrão de continuar esta álgebra (e que causou controvérsias durante certa época) é inverter os limites $N \rightarrow \infty$ e $n \rightarrow 0$. Quando N tende a infinito o integrando é dominado pelo seu máximo, ou seja um mínimo de $F_n(p_{\alpha}, q_{\alpha\beta})$:

$$-\beta f = \lim_{n \rightarrow 0} \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\exp\{-N F_n\} - 1}{nN}.$$

Quando tomarmos o limite $n \rightarrow 0$, F_n terá termos da ordem de n , e devemos considerar que nN é finito e muito pequeno. Portanto

$$-\beta f = \lim_{n \rightarrow 0} \left(-\frac{F_n}{n} \right).$$

O *Ansatz* de simetria entre réplicas impõe que

$$\begin{aligned} p_\alpha &= p, \\ q_{\alpha\beta} &= q. \end{aligned}$$

Então

$$\beta f = \frac{\beta^2 J^2}{4} (p^2 - q^2) - \lim_{n \rightarrow 0} \left(\frac{\ln z_n}{n} \right).$$

Através de uma álgebra direta, mas longa, onde usamos novamente a transformação gaussiana, encontramos:

$$\beta f = \frac{\beta^2 J^2}{4} (p^2 - q^2) - \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dx}{\sqrt{2\pi}} e^{-x^2/2} \ln Z(x),$$

onde

$$Z(x) = \text{Tr} e^{-\beta \mathcal{H}_{ef}},$$

$$-\beta \mathcal{H}_{ef} = \beta J \sqrt{q} x S + \left[-\beta D + \frac{\beta^2 J^2}{2} (p - q) \right] S^2.$$

Ao calcularmos o extremo de f encontramos que

$$q = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dx}{\sqrt{2\pi}} e^{-x^2/2} [\Phi_1(x)]^2,$$

$$p = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dx}{\sqrt{2\pi}} e^{-x^2/2} \Phi_2(x),$$

onde

$$\Phi_k(x) = \frac{\text{Tr} S^k e^{-\beta \mathcal{H}_{ef}}}{\text{Tr} e^{-\beta \mathcal{H}_{ef}}}.$$

Particularizando esses resultados para $S = 3/2$, encontramos

$$\Phi_1(x) = \frac{3e^{2\delta} \sinh(3\sqrt{q}x/2t) + \sinh(\sqrt{q}x/2t)}{2e^{2\delta} \cosh(3\sqrt{q}x/2t) + 2 \cosh(\sqrt{q}x/2t)},$$

$$\Phi_2(x) = \frac{9e^{2\delta} \cosh(3\sqrt{q}x/2t) + \cosh(\sqrt{q}x/2t)}{4e^{2\delta} \cosh(3\sqrt{q}x/2t) + 4 \cosh(\sqrt{q}x/2t)},$$

$$Z(x) = 2e^{\delta/4} \left[e^{2\delta} \cosh\left(\frac{3\sqrt{q}x}{2t}\right) + \cosh\left(\frac{\sqrt{q}x}{2t}\right) \right],$$

$$\delta = -\frac{d}{t} + \frac{p-q}{2t^2},$$

onde $t = (\beta J)^{-1}$ e $d = D/J$.

As equações acopladas $q = Q(q, p)$ e $p = P(q, p)$ têm uma solução que chamaremos de paramagnética, dada por

$$q^* = 0,$$

$$p^* = \frac{9e^{2\delta^*} + 1}{4(1 + e^{2\delta^*})},$$

onde

$$\delta^* = -\frac{d}{t} + \frac{p^*}{2t^2}.$$

Vamos analisar em que regiões a solução paramagnética é estável. Iremos reescrever a equação de p^* de uma forma mais conveniente:

$$p^* - \frac{5}{4} = \tanh\left(\frac{p^* - 2td}{2t^2}\right),$$

na qual é possível perceber que quando $t < 1/\sqrt{2}$ nós teremos três soluções.

Os soluções serão estáveis quando os auto-valores da matriz $\mathbf{M}(p, q)$ forem, em módulo, menor que a unidade.

$$\mathbf{M}(p, q) = \begin{pmatrix} \left(\frac{\partial P}{\partial p}\right)^* & \left(\frac{\partial P}{\partial q}\right)^* \\ \left(\frac{\partial Q}{\partial p}\right)^* & \left(\frac{\partial Q}{\partial q}\right)^* \end{pmatrix},$$

onde * simboliza que as derivadas estarão sendo calculadas para $q = q^* = 0$ e $p = p^*$.

Encontramos

$$M_{11} = \frac{32e^{2\delta^*}}{[4t(1 + e^{2\delta^*})]^2},$$

$$M_{12} = \frac{5e^{2\delta^*}}{[4t(1 + e^{2\delta^*})]^2},$$

$$M_{21} = 0,$$

$$M_{22} = \left[\frac{9e^{2\delta^*}}{4t(1 + e^{2\delta^*})} \right]^2.$$

Os auto-valores desta matriz quando explicitados em função de p^* , têm a forma:

$$\lambda_1 = \frac{1}{2t^2} \left(\frac{9}{4} - p^* \right) \left(p^* - \frac{1}{4} \right),$$

$$\lambda_2 = \left(\frac{p^*}{t} \right)^2.$$

Na figura 4.2 observa-se que para $q^* = 0$ o sistema apresenta três soluções quando $t < 1/\sqrt{2}$.

A região de estabilidade da solução paramagnética é determinada por $|\lambda_1| < 1$ e $|\lambda_2| < 1$. Não é difícil mostrar que $\lambda_2 \geq \lambda_1$, conseqüentemente a condição de estabilidade é $|\lambda_2| < 1$. Vale a pena ressaltar que as condições de estabilidade de Lage e de Almeida [35] fornecem condições iguais às encontradas anteriormente. O limite de estabilidade da solução paramagnética é dado por $|\lambda_2| = 1$, que implica em $d = d_c$ onde :

$$d_c = \frac{1}{2} \left[1 + t \ln \left(\frac{9 - 4t}{4t - 1} \right) \right],$$

que neste caso define a linha de transição de segunda ordem entre as fases ordenada ($q^* \neq 0$) e desordenada ($q^* = 0$).

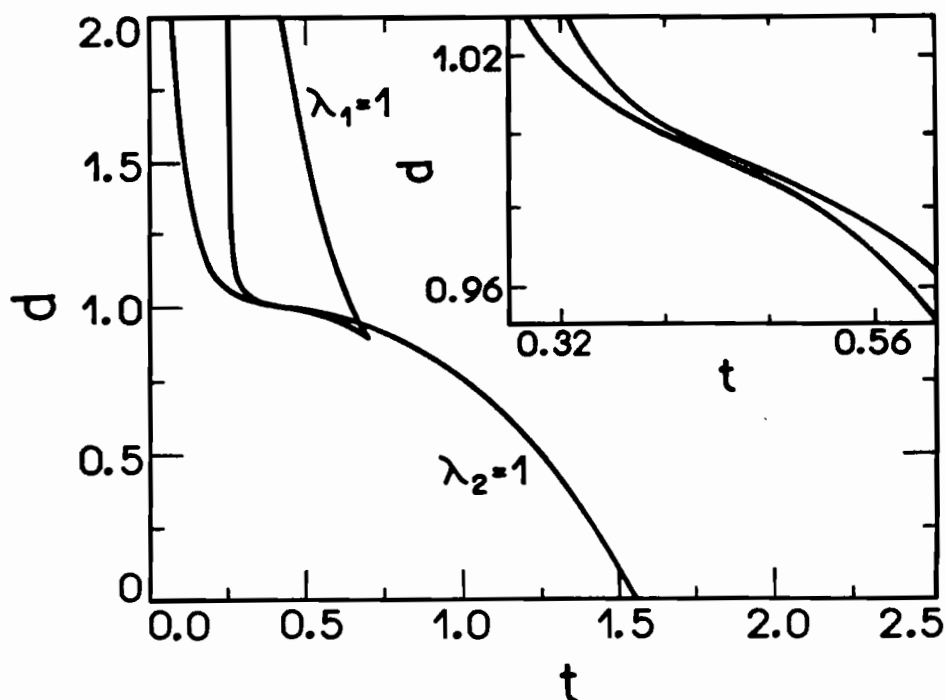


Figura 4.2: Curvas definidas pela matriz de estabilidade. A curva $\lambda_1 = 1$ forma um bico, e no detalhe observa-se que as curvas não se tocam.

A despeito da expectativa que tínhamos, não encontramos nenhuma transição de fases no interior da região ordenada, quando analisamos numericamente o mapeamento para diversos valores de d e t .

Recentemente da Costa, Yokoi e Salinas [18] analisaram este modelo para $S = 1$ e encontraram que em baixas temperaturas $p - q = at$, de modo que $(p - q)/t$ é finito. Esse resultado e as conclusões deste trabalho solucionaram de maneira plausível a controvérsia que existia no caso da anisotropia crítica da transição de primeira ordem em $t \rightarrow 0$ deste modelo.

No nosso trabalho encontramos que $p - q$ vai a zero mais rapidamente que t , ou seja que $(p - q)/t \rightarrow 0$ quando a tempe-

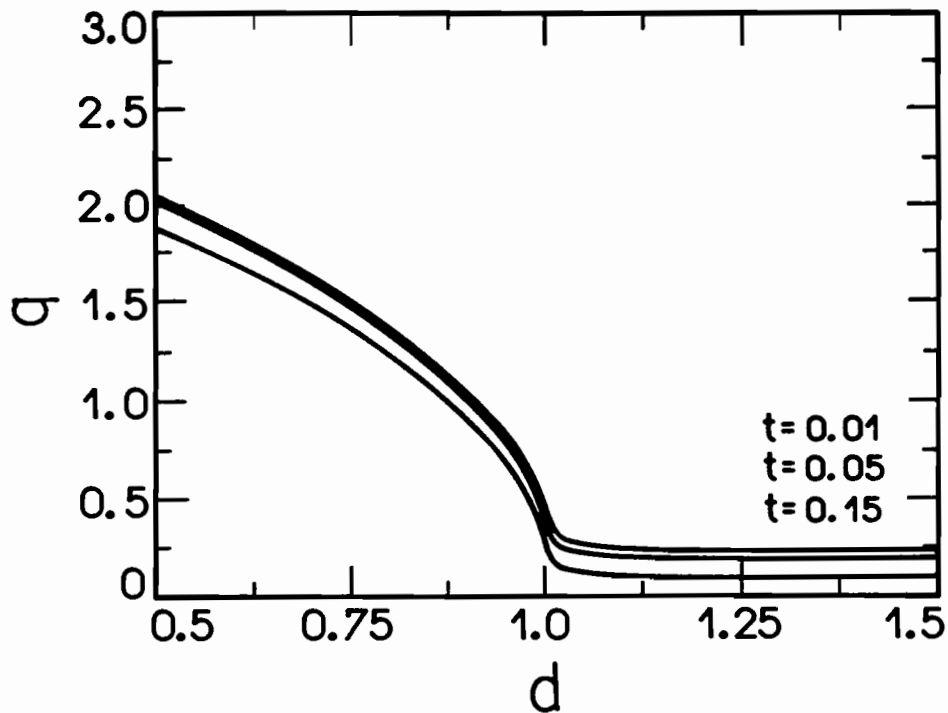


Figura 4.3: Vidro de spin de Ising: o parâmetro de ordem q versus a anisotropia, para diversos valores de temperatura.

ratura vai a zero.

Uma análise das equações para p e q , nesta região de temperaturas, nos dá que em $t = 0$

$$p = q = \frac{9}{4} - 2\text{erf} \left(\frac{2d}{\sqrt{2q}} \right),$$

resultado que coincide com a nossa análise numérica.

Essa análise numérica foi feita de maneira cuidadosa, pois em baixas temperaturas $\Phi_1(x)$ e $\Phi_2(x)$ apresentam um comportamento similar à função degrau.

Nós utilizamos um artifício desenvolvido por da Costa, Yokoi e Salinas [18], definindo uma variável x_0 , onde

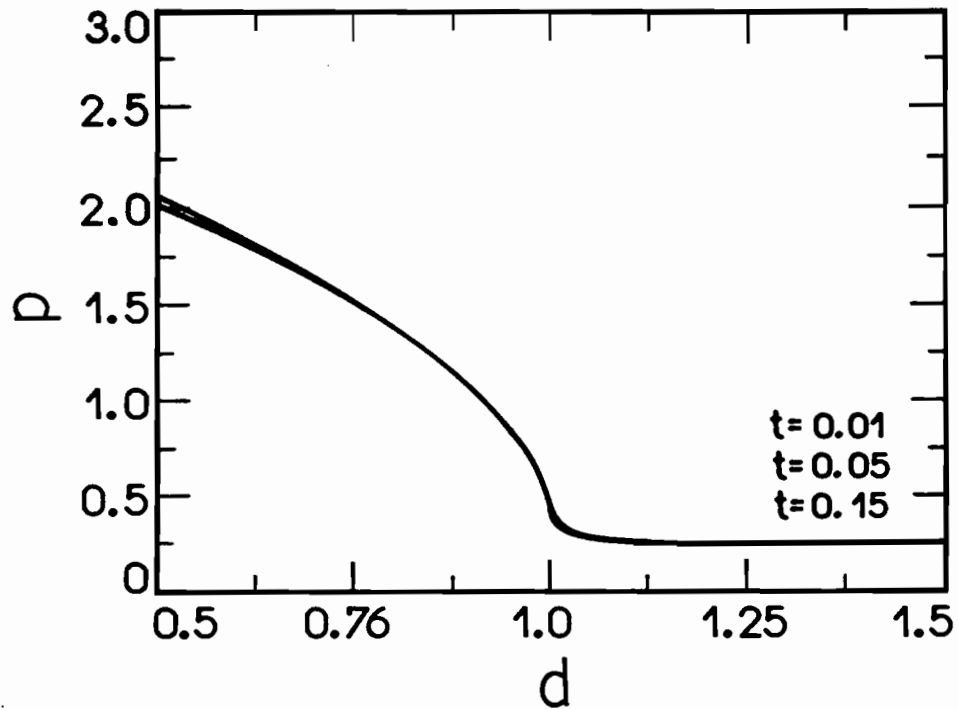


Figura 4.4: Vidro de spin de Ising: em baixas temperaturas o parâmetro p varia suavemente com a temperatura. Os gráficos para $t = 0,05$ e $t = 0,01$ são coincidentes.

$$x_0 = \frac{1}{\sqrt{q}} \left(2d - \frac{p - q}{t} \right).$$

Desse modo $\Phi_1(x)$ e $\Phi_2(x)$ ficam com a forma:

$$\Phi_1(x) = g_1(x, q, x_0, t),$$

$$\Phi_2(x) = g_2(x, q, x_0, t).$$

Numericamente podemos analisar o mapa bi-dimensional como um mapa unidimensional do tipo $q = Q(q, x_0, t)$ e encontrar $p = P(q, x_0, t)$.

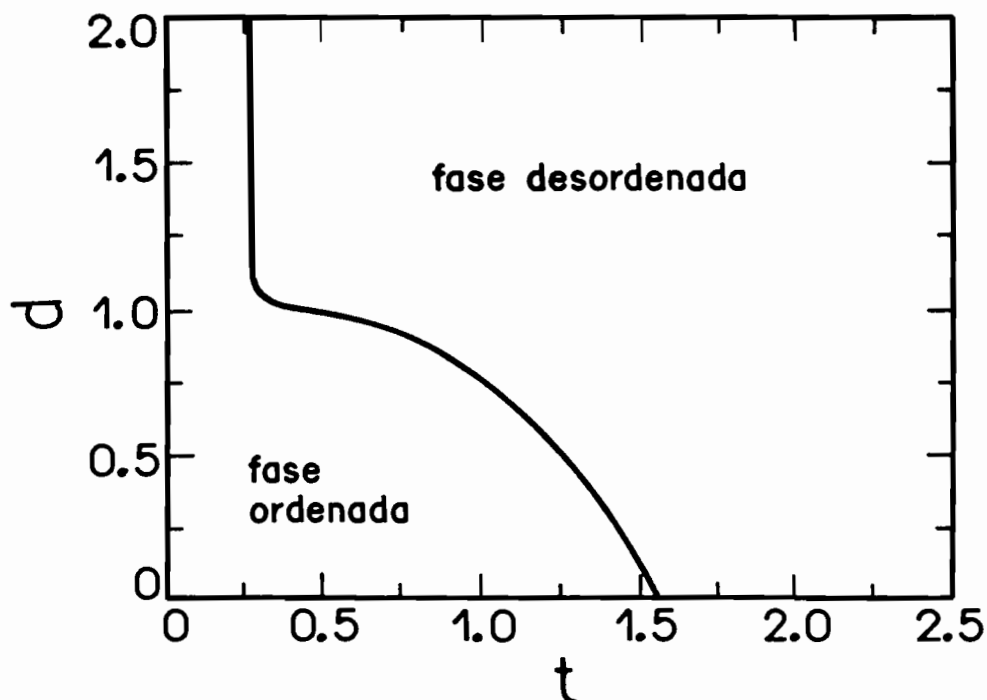


Figura 4.5: Diagrama de fases para o vidro de spins de Ising com $S = 3/2$.

Para cada par x_0 e t encontramos q de maneira auto-consistente, então calculamos p e através da definição de x_0 encontramos d . Este artifício é conveniente pois podemos resolver uma integral (com um integrando tipo função degrau) de cada vez, obtendo resultados confiáveis de uma maneira mais simples, que corroboraram os resultados analíticos apresentados anteriormente.

Na figura 4.3 traçamos o comportamento de q versus d e na figura 4.4 traçamos o comportamento de p versus d , em ambos os casos para vários valores da temperatura t . Como pode-se perceber, numa região o sistema tem um comportamento do tipo $S_i = \pm 3/2$ e em outra um comportamento do

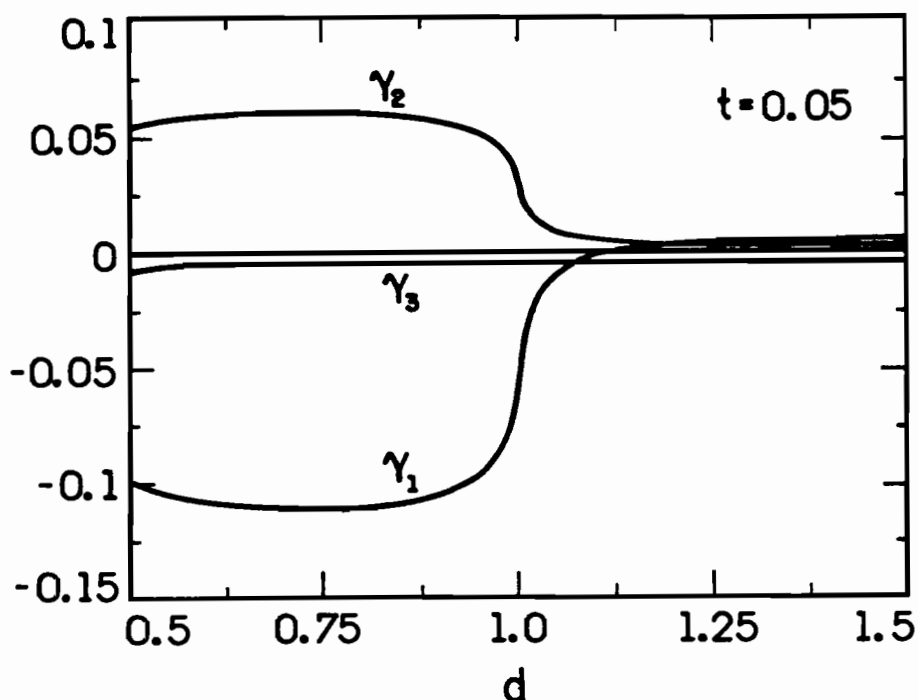


Figura 4.6: Condições de estabilidade de Lage e de Almeida.

tipo $S_i = \pm 1/2$. Apesar da mudança de um tipo de comportamento para o outro ser relativamente brusca, não existe nada que caracterize uma transição, como por exemplo uma região em que tivéssemos mais que uma solução.

Na figura 4.5 traçamos o diagrama de fases deste modelo. Na fase ordenada existe uma região estreita para $d > 1$ onde o sistema é do tipo $S_i = \pm 1/2$. No restante da região ordenada (principalmente em baixas temperaturas) o sistema é do tipo $S_i = \pm 3/2$.

As condições de estabilidade de Lage e de Almeida[35], mencionadas anteriormente, são definidas como $\gamma_i \geq 0$, onde:

$$\gamma_1 = 2t^2 - \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dx}{\sqrt{2\pi}} e^{-x^2/2} [\Phi_4(x) - \Phi_2^2(x)]^2,$$

$$\gamma_2 = t^2 - \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dx}{\sqrt{2\pi}} e^{-x^2/2} [\Phi_2^2(x) - 4\Phi_1^2(x)\Phi_2(x) + 3\Phi_1^4(x)],$$

$$\gamma_3 = t^2 - \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dx}{\sqrt{2\pi}} e^{-x^2/2} [\Phi_2(x) - \Phi_1^2(x)]^2,$$

em que os $\Phi_i(x)$ foram definidos anteriormente. Quando analisamos estas condições na fase vidro de spin percebemos que, tal como no modelo de Sherrington e Kirkpatrick, uma delas ($\gamma_3 \geq 0$) é sempre violada. Para todas as temperaturas que analisamos (0,01; 0,05; 0,15; 0,50;) a condição $\gamma_2 \geq 0$ é sempre satisfeita. Na figura 4.6 apresentamos um comportamento típico dos γ_i , onde se percebe que para certos valores de t e d a condição $\gamma_1 \geq 0$ é satisfeita. Como já foi mencionado, na fase paramagnética estas condições são satisfeitas e produzem resultados iguais aos obtidos através da análise da matriz de estabilidade $\mathbf{M}(p, q)$.

Capítulo 5

Sistemas desordenados de tamanho finito

A Física Estatística tem usado várias técnicas para analisar sistemas com aleatoriedade. Algumas delas estão presentes ou foram mencionadas neste trabalho. Young e Kirkpatrick [58] utilizaram uma técnica extremamente simples que fornece resultados surpreendentes. Considera-se um sistema com um número N finito de spins e calcula-se exatamente a grandeza f_N de interesse, por exemplo a energia interna. A partir do conhecimento de como essa grandeza escala com N , ajustam-se os pares de pontos f_N e N^α com uma reta, onde α é o expoente de escala. Quando extrapolamos esta reta para $N \rightarrow \infty$ temos (em princípio) o limite termodinâmico de f_N .

Nós estudamos o estado fundamental de dois modelos mostrados a seguir.

5.1 Modelo com anisotropia aleatória

Consideremos o hamiltoniano

$$\mathcal{H} = -J \sum_{(i,j)} S_i S_j + \sum_{i=1}^N D_i S_i^2,$$

onde $J > 0$ é a interação de troca, (i, j) é a soma sobre todos os pares de sítios, $S_i = 0, \pm 1$ e as interações de campo cristalino D_i são variáveis aleatórias independentes com distribuição de probabilidades dada por

$$\mathcal{P}(D_i) = p\delta(D_i - D) + (1 - p)\delta(D_i).$$

Como todos os spins interagem entre si, para um dado valor da concentração p todas as possíveis escolhas da matriz $\{D_i\}$ são equivalentes no cálculo do estado fundamental. Isso é fácil de perceber se considerarmos que a um dado valor de p teremos $n = pN$ sítios com $D_i = 0$. A diferença entre duas matrizes $\{D_i\}$ com a mesma diluição p é que trocamos a posição relativa de alguns dos D_i . Como todos os spins interagem entre si do mesmo modo, não existe nenhuma diferença topológica entre o sítio i e o sítio k . Portanto não alteramos a energia interna do sistema se trocarmos D_i por D_k desde que mantenhamos p fixo. É então suficiente efetuar os cálculos para apenas uma escolha de $\{D_i\}$.

Encontramos que a energia interna escala com N^{-1} [58].

É conhecido [14] que temos uma transição de primeira ordem em $T = 0$ e a anisotropia crítica $d_c = D_c/NJ$ é dada por

$$d_c = 1 - \frac{p}{2}.$$

Nós analisamos este modelo para $2 \leq N \leq 15$, e ajustamos uma reta para os pares de pontos $d_c(N)$ versus N^{-1} , usando o método dos mínimos quadrados. Extrapolando os resultados para $N \rightarrow \infty$, encontramos d_c e o erro associado a essa extrapolação.

Nós obtivemos $d_c = 0,7497 \pm 0,0008$ para $p = 1/2$ e $d_c = 0,8321 \pm 0,0003$ para $p = 1/3$ em ótima concordância com o resultado analítico mencionado.

5.2 Modelo com interações aleatórias

As propriedades dos vidros de spins em baixas temperaturas são difíceis de estudar e as características do modelo a seguir têm gerado controvérsias[17]. No entanto obtivemos resultados compatíveis com o trabalho de da Costa e colaboradores[18].

Consideremos o hamiltoniano

$$\mathcal{H} = - \sum_{(i,j)} J_{ij} S_i S_j + D \sum_{i=1}^N S_i^2,$$

onde (i, j) é a soma sobre todos os pares de sítios, $S_i = 0, \pm 1$ e as interações de troca são variáveis aleatórias independentes com distribuição de probabilidades gaussiana dada por

$$\mathcal{P}(J_{ij}) = \left(\frac{N}{2\pi J^2} \right)^{1/2} \exp \left\{ - \frac{N J_{ij}^2}{2J^2} \right\},$$

onde N é o número de sítios e J é a variância.

O estado fundamental consiste da configuração de spins com a qual se obtém a menor energia livre em $T = 0$. Para uma dada escolha da matriz $\{J_{ij}\}$ e de um valor da anisotropia D ,

procuramos entre todas as configurações de spins qual a que corresponde a menor energia interna.

É sabido que o sistema apresenta uma transição de fases de primeira ordem em baixas temperaturas. Em $T = 0$ quando $d < d_c$ o sistema está ordenado e seus spins se encontram em um dos dois estados $S_i = \pm 1$, onde $d = D/J$. Se $d > d_c$ o sistema está na fase desordenada, que nessa temperatura se caracteriza pelo fato dos spins estarem no estado $S_i = 0$.

Nós analisamos este modelo para $5 \leq N \leq 12$, e para cada valor de N tomamos uma média sobre seiscentas matrizes $\{J_{ij}\}$ definidas anteriormente.

Como no item anterior, ajustamos os pares de pontos $d_c(N)$ versus $N^{-1/2}$ com uma reta, usando o método dos mínimos quadrados.

Para cada N calculamos a média da anisotropia crítica, considerando as seiscentas matrizes $\{J_{ij}\}$ e o correspondente desvio médio padrão. Com a extrapolação das médias e do desvio médio padrão encontramos d_c quando $N \rightarrow \infty$.

Encontramos que a energia interna escala com $N^{-1/2}$ [58] e obtivemos

$$d_c = 0,958 \pm 0,095$$

em concordância com os resultados mais recentes obtido por da Costa[18] considerando réplicas simétricas, $d_c = 0,8999003\dots$ e $d_c = 0,8843\dots$ considerando o primeiro estágio de quebra de simetria entre réplicas proposto por Parisi. Esses resultados se afastam daquele obtido por Ghatak e Sherrington [25], $d_c = 1/\sqrt{2\pi} = 0,39894\dots$. Na realidade Lage e de Almeida [35] através de um raciocínio heurístico já haviam proposto um valor bem maior, $d_c = \sqrt{2/\pi} = 0,79788\dots$

Capítulo 6

Considerações finais

Na primeira parte deste trabalho estudamos diversos modelos de Ising com campos ou anisotropias aleatórios, associados a uma distribuição discreta de variáveis aleatórias independentes e identicamente distribuídas.

Na rede de Bethe, estudamos o modelo de Ising com campo aleatório ($S = 1/2$) e o modelo de Ising com anisotropia aleatória ($S = 1$). Apresentamos relações de recorrência e encontramos as equações que definem os diagramas de fases no limite de coordenação infinita da rede.

Propomos uma aproximação de campo médio dinâmico para estudar o modelo de Ising ferromagnético ($S = 1/2$), com campo aleatório ($S = 1/2$), com interações aleatórias ($S = 1/2$), com diluição de sítios ($S = 1/2$) e com anisotropia aleatória ($S = 1$). Nesta proposta usamos o algoritmo de banho térmico para efetuar uma análise auto-consistente da dinâmica de um aglomerado de spins. A partir dos pontos fixos de uma relação de recorrência para os parâmetros de ordem, obtemos os diagramas de fases dos modelos mencionados. Os parâmetros de ordem obedecem a equações polinomiais de ordem z que são

apresentadas para coordenação z genérica. Calculamos o limite de coordenação infinita recuperando os resultados de campo médio. Apesar dos bons resultados obtidos por esta proposta, ela se ressentia da ausência de um parâmetro de ordem que sinalize a fase vidro de spin. Uma possível saída seria uma proposta de Thouless, usada por Oliveira e Salinas[45], que considera apenas duas réplicas do sistema.

Vale a pena ressaltar a relativa facilidade de obtermos os resultados da aproximação de campo médio dinâmico para z finito, em comparação com as dificuldades encontradas ao se utilizar a aproximação de Bethe.

Na segunda parte analisamos modelos de Ising com $S = 3/2$ e anisotropia de campo cristalino. Na aproximação de campo médio obtivemos o diagrama de fases, com uma linha de transição de segunda ordem separando as fase ordenada e desordenada. No interior da região ordenada encontramos, em baixas temperaturas, uma linha de transição de primeira ordem que nos motivou a estudar os modelos de vidro de spin correspondentes. No modelo de van Hemmen com spin $S = 3/2$ encontramos um diagrama de fases de mesma natureza, com a diferença óbvia de que neste caso a fase vidro de spin é entendida como ordenada. Usando a interação de troca com distribuição de probabilidades gaussiana, estudamos o vidro de spin clássico, via truque de réplicas simétricas. O diagrama de fases consiste apenas de uma linha de transição ordem-desordem de segunda ordem. Apesar de obtermos um diagrama de fases bastante diverso dos seus equivalentes para $S = 1/2$ e $S = 1$, não encontramos nenhum indício de uma transição de primeira ordem, mesmo em baixas temperaturas, no interior da região ordenada.

É possível que encontremos a linha de primeira ordem quando considerarmos a quebra de simetria dentro do esquema proposto por Parisi [47].

No último capítulo utilizamos uma técnica simples sugerida por Young e Kirkpatrick [58], para calcular as propriedades do estado fundamental de dois modelos que envolvem elementos de aleatoriedade. Tanto no modelo com anisotropia aleatória quanto no modelo com interações aleatórias, encontramos resultados em concordância com trabalhos recentes para estes modelos.

Apêndice A

Rede de Bethe

A.1 Campo aleatório

Limite de coordenação infinita

No Capítulo II obtivemos a relação de recorrência

$$m_0 = \tanh\left\{\beta H_0 + \sum_{i=1}^{z-1} \operatorname{arctanh}[m_i \tanh(\beta J)]\right\},$$

onde m_0 é a magnetização do sítio central e m_i é a magnetização de um sítio da primeira camada. No limite de coordenação infinita temos $z \rightarrow \infty$ e $J \rightarrow 0$ com zJ fixo. Nesse limite podemos escrever a equação anterior como

$$m_0 = \tanh\left\{\beta H_0 + z\beta J \frac{1}{z} \sum_{i=1}^z m_i\right\}.$$

Não é difícil perceber que duas camadas vizinhas quaisquer, têm entre si uma relação equivalente a essa.

Considerando que

$$\bar{m}_0 = \int dH_0 \mathcal{P}(H_0) \tanh(\beta H_0 + z\beta J \bar{m}_i)$$

e que $\mathcal{P}(H_0)$ é bimodal, temos

$$\bar{m}_0 = \frac{1}{2} \{ \tanh(\beta H + z\beta J \bar{m}_i) + \tanh(-\beta H + z\beta J \bar{m}_i) \}$$

Chamando $\bar{m}_i = m$ e $\bar{m}_0 = m'$ temos o mapeamento

$$m' = f(m) = \frac{1}{2} \{ \tanh(\beta H + z\beta J m) + \tanh(-\beta H + z\beta J m) \}$$

O ponto fixo deste mapeamento é obtido através da equação de estado $m = f(m)$ que corresponde às propriedades locais da árvore de Cayley (rede de Bethe).

A.2 Anisotropia aleatória

Limite de coordenação infinita

$$f(D_0, \{m_i\}, \{Q_i\}) = \frac{\sinh[B(B_i, C_i)]}{\cosh[B(B_i, C_i)] + \frac{1}{2} \exp\{\beta D_0 - C(B_i, C_i)\}}$$

$$g(D_0, \{m_i\}, \{Q_i\}) = \frac{\cosh[B(B_i, C_i)]}{\cosh[B(B_i, C_i)] + \frac{1}{2} \exp\{\beta D_0 - C(B_i, C_i)\}}$$

No limite de coordenação infinita temos:

$$\cosh(\beta J) = 1 + \frac{1}{2}(\beta J)^2 + \dots$$

$$\sinh(\beta J) = \beta J + \frac{1}{6}(\beta J)^3 + \dots$$

portanto retendo apenas os termos da ordem de βJ

$$\begin{aligned} B(B_i, C_i) &= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^z \ln \left\{ \frac{1 + m_i(\beta J) + \dots}{1 - m_i(\beta J) + \dots} \right\} \\ &= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^z \ln \{ 1 + 2m_i(\beta J) + \dots \} \end{aligned}$$

$$B(B_i, C_i) \approx z\beta J \left\{ \frac{1}{z} \sum_{i=1}^z m_i \right\}$$

Usando a lei dos grandes números:

$$\bar{m}_i = \lim_{z \rightarrow \infty} \frac{1}{z} \sum_{i=1}^z m_i$$

logo

$$B(B_i, C_i) = z\beta J \bar{m}_i$$

De maneira equivalente

$$\begin{aligned} C(B_i, C_i) &= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^z \ln \{ [1 + \frac{1}{2}(\beta J)^2 Q_i + \dots]^2 - m_i^2 [(\beta J)^2 + \dots] \} \\ &= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^z \ln \{ 1 + (Q_i - m_i^2)(\beta J)^2 + \dots \} \end{aligned}$$

$$C(B_i, C_i) \approx \frac{1}{2}(\beta J)^2 \sum_{i=1}^z (Q_i - m_i^2)$$

Usando novamente a lei dos grandes números

$$C(B_i, C_i) = \frac{1}{2} z(\beta J)^2 [\overline{Q_i} - \overline{m_i^2}] \rightarrow 0$$

Como estamos considerando as propriedades locais da árvore da Cayley temos $\overline{m_0} = \overline{m_i} \equiv m$, e portanto

$$f(d_0, m) = \frac{2e^{-d_0/t} \sinh(m/t)}{2e^{-d_0/t} \cosh(m/t) + 1}$$

$$g(d_0, m) = \frac{2e^{-d_0/t} \cosh(m/t)}{2e^{-d_0/t} \cosh(m/t) + 1}$$

onde $t = (z\beta J)^{-1}$ e $d_0 = D_0/J$. Ao longo desta álgebra fica óbvio que houve um desacoplamento das equações de recorrência para m e Q , de modo que as funções f e g passam a não depender de Q , pelo menos até a ordem considerada nas expansões.

Apêndice B

Modelo de Ising ferromagnético

B.1 Limite de coordenação infinita

$$f(m) = \frac{1}{2^z} \sum_{k=0}^z C_z^k (1+m)^k (1-m)^{z-k} \tanh\left(\frac{-z+2k}{zt}\right)$$

onde $t = (z\beta J)^{-1}$. Quando $z \rightarrow \infty$ o somatório transforma-se em integral e nós teremos:

$$f(m) = \lim_{z \rightarrow \infty} \int_{k=0}^z dk \frac{1}{2^z} C_z^k (1+m)^k (1-m)^{z-k} \tanh\left(\frac{-z+2k}{zt}\right)$$

Devemos observar que:

- i) $\tanh\left(\frac{-z+2k}{zt}\right)$ é uma função suave e limitada entre -1 e $+1$
- ii) $(1+m)^k (1-m)^{z-k}$ é uma função limitada entre 0 e 1
- iii) C_z^k tem um pico pronunciado em $k = \tilde{k}$

Vamos considerar que no limite $z \rightarrow \infty$ a integral pode ser substituída pelo máximo do integrando.

Considerando



$$F(k) = \frac{1}{2^z} C_z^k (1+m)^k (1-m)^{z-k}$$

vamos calcular

$$f(m) = F(k_0) \tanh\left(\frac{-z + 2k_0}{zt}\right)$$

onde $F(k)$ tem o seu máximo em $k = k_0$.

Usando que

$$\lim_{y \rightarrow \infty} \ln y! = y \ln y - y$$

temos

$$\begin{aligned} \ln F(k) &= z \ln(z/2) - k \ln k - (z-k) \ln(z-k) \\ &\quad + k \ln(1+m) + (z-k) \ln(1-m) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial k} \ln F(k) &= -\ln k + \ln(z-k) \\ &\quad + \ln(1+m) - \ln(1-m) \end{aligned}$$

$$\frac{\partial}{\partial k} \ln F(k) = 0 \Rightarrow k_0 = \frac{z(1+m)}{2}$$

Como

$$\frac{-z + 2k_0}{zt} = \frac{m}{t}$$

e

$$F(k_0) = 1$$

nós teremos

$$m = \tanh(m/t)$$

que é a solução de campo médio.

Apêndice C

Modelo de Ising com campo aleatório

C.1 Limite de coordenação infinita

$$f(P) = \sum_{k=0}^z C_z^k P^k (1-P)^{z-k} B(-z+2k, h)$$

Considerando $m = 2P - 1$, teremos

$$f(m) = \frac{1}{2^z} \sum_{k=0}^z C_z^k (1+m)^k (1-m)^{z-k} B(-z+2k, h)$$

Definindo $g(m) = 2f(m) - 1$ e lembrando que:

$$1 = \frac{1}{2^z} \sum_{k=0}^z C_z^k (1+m)^k (1-m)^{z-k}$$

obtemos

$$g(m) = \frac{1}{2^z} \sum_{k=0}^z C_z^k (1+m)^k (1-m)^{z-k} \{2B(-z+2k, h) - 1\}$$

Usando-se a definição de $B(\sigma, h)$, encontramos que $B(\sigma, h) + B(-\sigma, h) = 1$, logo

$$D(\sigma, h) \equiv B(\sigma, h) - B(-\sigma, h) = 2B(\sigma, h) - 1$$

$$D(\sigma, h) = \frac{1}{2} \left\{ \tanh \left(\frac{\sigma/z + h}{t} \right) + \tanh \left(\frac{\sigma/z - h}{t} \right) \right\}$$

onde $t = (z\beta J)^{-1}$ e $h = H/zJ$. Finalmente

$$g(m) = \frac{1}{2^z} \sum_{k=0}^z C_z^k (1+m)^k (1-m)^{z-k} D(-z+2k, k)$$

Como no Apêndice B.1 vamos considerar que no limite $z \rightarrow \infty$

$$g(m) = F(k_0) D(-z+2k_0, h)$$

onde $F(k)$ tem o seu máximo em $k = k_0$. Do apêndice anterior temos que

$$k_0 = \frac{z(1+m)}{2}$$

e

$$g(m) = \frac{1}{2} \left\{ \tanh \left(\frac{m+h}{t} \right) + \tanh \left(\frac{m-h}{t} \right) \right\}$$

A equação $m = g(m)$, neste limite, é a conhecida equação de estado, na aproximação de campo médio, para este modelo.

Apêndice D

Modelo de Ising com anisotropia aleatória

D.1 Limite de coordenação infinita

$$g(m, Q) = \sum_{n=0}^z \frac{C_z^n}{2^{z-n}} (1-Q)^n \times \sum_{k=0}^{z-n} C_{z-n}^k (Q+m)^k (Q-m)^{z-n-k} \tilde{A}(-z+n+2k)$$
$$g_0(m, Q) = \sum_{n=0}^z \frac{C_z^n}{2^{z-n}} (1-Q)^n \times \sum_{k=0}^{z-n} C_{z-n}^k (Q+m)^k (Q-m)^{z-n-k} \tilde{B}(-z+n+2k)$$

Quando $z \rightarrow \infty$ as somatórias se transformam em integrais e nós teremos:

$$g(m, Q) = \lim_{z \rightarrow \infty} \int_0^z \frac{C_z^n}{2^{z-n}} (1-Q)^n dn \times \int_0^{z-n} C_{z-n}^k (Q+m)^k (Q-m)^{z-n-k} \tilde{A}(-z+n+2k) dk$$

Seja $F(n, k)$ definido por

$$F(n, k) = C_{z-n}^k (Q + m)^k (Q - m)^{z-n-k}$$

Como \tilde{A} é uma função suave e limitada, e quando $z - n$ for grande o termo binomial tem um pico pronunciado, vamos usar que neste limite

$$\int_0^{z-n} F(n, k) \tilde{A}(-z + n + 2k) dk = F(n, k_0) \tilde{A}(-z + n + 2k_0)$$

onde $F(n, k_0)$ é o máximo da função. Usando que

$$\lim_{y \rightarrow \infty} \ln y! = y \ln y - y$$

nós teremos

$$\ln C_{z-n}^k = (z - n) \ln(z - n) - k \ln k - (z - n - k) \ln(z - n - k)$$

É mais conveniente analisar o logaritmo de $F(n, k)$

$$\begin{aligned} \ln F(n, k) &= (z - n) \ln(z - n) - k \ln k \\ &\quad - (z - n - k) \ln(z - n - k) \\ &\quad + k \ln(Q + m) + (z - n - k) \ln(Q - m) \end{aligned}$$

$$\frac{\partial \ln F(n, k)}{\partial k} = -\ln \left(\frac{k}{z - n - k} \right) + \ln \left(\frac{Q + m}{Q - m} \right)$$

O extremo é obtido para

$$\left. \frac{\partial \ln F(n, k)}{\partial k} \right|_{k=k_0} = 0$$

ou seja, quando

$$k_0 = (z - n) \frac{Q + m}{2Q}$$

Este extremo é um máximo pois

$$\left. \frac{\partial^2 \ln F(n, k)}{\partial k^2} \right|_{k=k_0} = -\frac{2Q}{Q-m}$$

e $Q \geq |m|$. Consequentemente

$$\ln F(n, k_0) = (z-n) \ln(2Q)$$

De maneira equivalente vamos definir $G(n)$ como

$$G(n) = \frac{C_z^n}{2^{z-n}} (1-Q)^n F(n, k_0)$$

Usando os argumentos anteriores vamos considerar que

$$\begin{aligned} g(m, Q) &= \lim_{z \rightarrow \infty} \int_0^z G(n) \tilde{A}(-z+n+2k_0) dn \\ &= G(n_0) \tilde{A}(-z+n_0+2k_0) \end{aligned}$$

onde $G(n_0)$ é o máximo da função.

$$\begin{aligned} \ln G(n) &= -(z-n) \ln 2 + z \ln z - n \ln n \\ &\quad -(z-n) \ln(z-n) \\ &\quad + n \ln(1-Q) + (z-n) \ln(2Q) \\ \frac{\partial \ln G(n)}{\partial n} &= \ln \frac{2(z-n)}{n} - \ln \frac{2Q}{1-Q} \end{aligned}$$

O extremo é obtido para

$$\left. \frac{\partial \ln G(n)}{\partial n} \right|_{n=n_0} = 0$$

ou seja, quando

$$n_0 = z(1-Q)$$

Este extremo é um máximo pois

$$\left. \frac{\partial^2 \ln G(n)}{\partial n^2} \right|_{n=n_0} = -\frac{1}{zQ(1-Q)}$$

consequentemente

$$\ln G(n_0) = 0$$

e

$$G(n_0) = 1$$

Como

$$-z + n_0 + 2k_0 = zm$$

teremos

$$g(m, Q) = \tilde{A}(zm)$$

e

$$g_0(m, Q) = \tilde{B}(zm)$$

Os pontos fixos são obtidos através das equações

$$m^* = 2\sinh(m^*/t) \left(\frac{pe^{-d/t}}{2e^{-d/t} \cosh(m^*/t) + 1} + \frac{1-p}{2 \cosh(m^*/t) + 1} \right)$$

$$Q^* = 2 \cosh(m^*/t) \left(\frac{pe^{-d/t}}{2e^{-d/t} \cosh(m^*/t) + 1} + \frac{1-p}{2 \cosh(m^*/t) + 1} \right)$$

onde $t = (z\beta J)^{-1}$ e $d = D/zJ$.

A penúltima das equações é a conhecida equação de estado na aproximação de campo médio, para este modelo.

D.2 Expansão em série de potências de m .

Para colocar $g(m, Q)$ em termos de uma série de potências de m , vamos desenvolver inicialmente, em termos de uma série binomial, os termos $(1 - Q)^n$, $(Q + m)^k$ e $(Q - m)^{z-n-k}$. Ao fazermos este desenvolvimento, teremos termos em m e Q , com várias ordens de potência. Iremos agrupar estes termos de acordo com o nosso objetivo, ou seja,

$$g(m, Q) = \mathcal{A}_0 + \mathcal{A}_1 m + \mathcal{A}_2 m^2 + \mathcal{A}_3 m^3 + \mathcal{A}_4 m^4 + \mathcal{A}_5 m^5 + \dots$$

onde $\mathcal{A}_j(Q)$ deverá conter uma série de potências em Q , cuja potência mais alta será $z - j$.

Iniciaremos desenvolvendo $g(m, Q)$ em uma série de Taylor:

$$\begin{aligned} g(m, Q) = & g(0, 0) + \left(m \frac{\partial g}{\partial m} \Big|_0 + Q \frac{\partial g}{\partial Q} \Big|_0 \right) + \\ & + \frac{1}{2!} \left(m^2 \frac{\partial^2 g}{\partial m^2} \Big|_0 + 2mQ \frac{\partial^2 g}{\partial m \partial Q} \Big|_0 + Q^2 \frac{\partial^2 g}{\partial Q^2} \Big|_0 \right) + \dots \end{aligned}$$

De maneira mais compacta:

$$g(m, Q) = \sum_{r=0}^z \frac{1}{r!} \sum_{s=0}^r C_r^s m^{r-s} Q^s \frac{\partial^r g}{\partial m^{r-s} \partial Q^s} \Big|_0$$

No caso de expandirmos uma função genérica, teríamos o somatório em r indo até o infinito. Mas neste caso, estamos trabalhando com um polinômio de grau z em m e Q .

O termo independente de m é encontrado fazendo-se $s = r$ no somatório,

$$\mathcal{A}_0 = \sum_{r=0}^z \frac{Q^r}{r!} \frac{\partial^r g}{\partial Q^r} \Big|_0.$$

Para encontrar \mathcal{A}_1 , fazemos $r - s = 1$,

$$\begin{aligned}\mathcal{A}_1 &= \sum_{r=1}^z \frac{C_r^{r-1}}{r!} Q^{r-1} \frac{\partial^r g}{\partial m \partial Q^{r-1}} \Big|_0 \\ &= \sum_{r=0}^{z-1} \frac{C_{r+1}^r}{(r+1)!} Q^r \frac{\partial^{r+1} g}{\partial m \partial Q^r} \Big|_0.\end{aligned}$$

De maneira equivalente, encontramos \mathcal{A}_2 , para $r - s = 2$,

$$\begin{aligned}\mathcal{A}_2 &= \sum_{r=2}^z \frac{C_r^{r-2}}{r!} Q^{r-2} \frac{\partial^r g}{\partial m^2 \partial Q^{r-2}} \Big|_0 \\ &= \sum_{r=0}^{z-2} \frac{1}{(r+2)!} C_{r+2}^r Q^r \frac{\partial^{r+2} g}{\partial m^2 \partial Q^r} \Big|_0.\end{aligned}$$

Teremos genericamente,

$$\mathcal{A}_j = \frac{1}{j!} \sum_{r=0}^{z-j} \frac{Q^i}{i!} \frac{\partial^{j+i} g}{\partial m^j \partial Q^i} \Big|_0,$$

onde usamos que $C_{i+j}^i / (i+j)! = (i!j!)^{-1}$.

Para calcular mais facilmente as derivadas de $g(m, Q)$ vamos usar as séries binomiais:

$$\begin{aligned}(1 - Q)^n &= \sum_{l_1=0}^n C_n^{l_1} (-1)^{l_1} Q^{l_1} \\ (Q + m)^k &= \sum_{l_2=0}^k C_n^{l_2} Q^{k-l_2} m^{l_2} \\ (Q - m)^{z-n-k} &= \sum_{l_3=0}^{z-n-k} C_{z-n-k}^{l_3} Q^{z-n-k-l_3} (-1)^{l_3} m^{l_3}\end{aligned}$$

Introduzindo esta expansão em $g(m, Q)$, teremos:

$$g(m, Q) = \sum_{n=0}^z \frac{C_z^n}{2^{z-n}} \sum_{k=0}^{z-n} C_{z-n}^k \tilde{A}(-z + n + 2k) \times$$

$$\sum_{l_1=0}^n C_n^{l_1} \sum_{l_2=0}^k C_k^{l_2} \sum_{l_3=0}^{z-n-k} C_{z-n-k}^{l_3} (-1)^{l_1+l_2} Q^{z-l_1-l_2-l_3} m^{l_2+l_3}$$

Logo:

$$\left. \frac{\partial^{j+i} g}{\partial m^j \partial Q^i} \right|_0 = i! j! \sum_{n=0}^z \frac{C_z^n}{2^{z-n}} \sum_{k=0}^{z-n} C_{z-n}^k \tilde{A}(-z+n+2k) \times \\ \sum_{l_1=0}^n C_n^{l_1} \sum_{l_2=0}^k C_k^{l_2} \sum_{l_3=0}^{z-n-k} C_{z-n-k}^{l_3} (-1)^{l_1+l_2}$$

onde $l_2 + l_3 = j$ e $z - l_1 - l_2 - l_3 = i$. Consequentemente:

$$A_j = \sum_{i=0}^{z-j} \alpha_{ji} Q^i$$

onde

$$\alpha_{ji} = \sum_{n=0}^z \frac{C_z^n}{2^{z-n}} \sum_{k=0}^{z-n} C_{z-n}^k \tilde{A}(-z+n+2k) \times \\ \sum_{l_1=0}^n C_n^{l_1} \sum_{l_2=0}^k C_k^{l_2} \sum_{l_3=0}^{z-n-k} C_{z-n-k}^{l_3} (-1)^{l_1+l_2}$$

condicionado a $l_2 + l_3 = j$ e $l_1 + l_2 + l_3 = z - i$.

Para mostrar que vários A_j são nulos, vamos definir $\mathcal{E}_j(z, n, k)$:

$$\mathcal{E}_j(z, n, k) = \sum_{l_1=0}^n C_n^{l_1} \sum_{l_2=0}^k C_k^{l_2} \sum_{l_3=0}^{z-n-k} C_{z-n-k}^{l_3} (-1)^{l_1+l_2}$$

condicionado à $l_2 + l_3 = j$ e $l_1 + l_2 + l_3 = z - i$. Como $\tilde{A}(\sigma) = -\tilde{A}(-\sigma)$, se $\mathcal{E}_j(z, n, k) = \mathcal{E}_j(z, n, z - n - k)$, nós teremos:

$$\sum_{k=0}^{z-n} C_{z-n}^k \tilde{A}(-z+n+2k) \mathcal{E}_j(z, n, k) = 0$$

ou seja: se $\mathcal{E}_j(z, n, k)$ tiver o comportamento indicado anteriormente isso implicará em $\alpha_{ji} = 0$ e conseqüentemente $\mathcal{A}_j = 0$. É fácil mostrar que:

$$\mathcal{E}_0(z, n, k) = 1$$

$$\mathcal{E}_1(z, n, k) = C_k^1 - C_{z-n-k}^1 = -\mathcal{E}_1(z, n, z - n - k)$$

$$\mathcal{E}_2(z, n, k) = C_k^2 - C_k^1 C_{z-n-k}^1 + C_{z-n-k}^2 = \mathcal{E}_2(z, n, z - n - k)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_3(z, n, k) &= C_k^3 - C_k^2 C_{z-n-k}^1 + C_k^1 C_{z-n-k}^2 - C_{z-n-k}^3 \\ &= -\mathcal{E}_3(z, n, z - n - k) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_4(z, n, k) &= C_k^4 - C_k^3 C_{z-n-k}^1 + C_k^2 C_{z-n-k}^2 - C_k^1 C_{z-n-k}^3 + C_{z-n-k}^4 \\ &= \mathcal{E}_4(z, n, z - n - k) \end{aligned}$$

De maneira genérica:

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_{2j}(z, n, k) &= \mathcal{E}_{2j}(z, n, z - n - k) \\ \mathcal{E}_{2j+1}(z, n, k) &= -\mathcal{E}_{2j+1}(z, n, z - n - k) \end{aligned}$$

ou seja: $\mathcal{A}_{2j} = 0$ e portanto

$$g(m, Q) = \mathcal{A}_1 m + \mathcal{A}_3 m^3 + \mathcal{A}_5 m^5 + \dots$$

onde $\mathcal{A}_j = \mathcal{A}_j(Q)$. De maneira equivalente, podemos mostrar que

$$g_0(m, Q) = B_0 + B_2 m^2 + B_4 m^4 + \dots$$

onde $B_j = B_j(Q)$.

Bibliografia

- [1] Aharony,A
Phys Rev **B18**,3318(1978)
- [2] de Almeida,JRL e Moreira,FGB
Z Phys **B63**,365(1986)
- [3] Amit,Daniel J
Modeling brain function
Cambridge University Press-1989
- [4] de Almeida,JRL e Thouless,D
J Phys **A11**,983(1978)
- [5] Bennyoussef,A; Biaz,T; Saber,M e Touzani,M
J Phys **C20**,5349(1987)
- [6] Blume,M ; Emery,VJ e Griffiths,RB
Phys Rev **A4**,1071(1971)
- [7] Bernardes,Américo Tristão
Tese de Doutorado
Instituto de Física/USP-1989
- [8] Blume,M
Phys Rev **141**,517(1966)

- [9] Bieche,I; Maynard,R; Rammal,R e Uhry,JP
J Phys **A13**,2253(1980)
- [10] Binder,K e Stauffer,D
Application of Monte Carlo Methods in Statistical Physics
Springer Verlag-1984
- [11] Binder,K e Young,AP
Rev Mod Phys **58**,801(1986)
- [12] Capel,HW
Physica **31**,966(1966)
- [13] Carneiro,CEI; Henriques,VB e Salinas,SR
J Phys **Cond Matter** **1**,3687(1989)
- [14] Carneiro,CEI; Henriques,VB e Salinas,SR
Physica **A162**,88(1989)
- [15] Carneiro,CEI; Henriques,VB e Salinas,SR
J Phys **A23**,3383(1990)
- [16] Chowdhury,D e Mookerjee,A
Phys Rep **114**,1(1984)
- [17] da Costa,FA
Tese de Doutorado
Instituto de Física/USP-1990
- [18] da Costa,FA ;Yokoi,CSO e Salinas,SR
IFUSP-Preprint-1992
- [19] Cusak,NE
The Physics of Structurally Disordered Matter
University of Sussex Press-1987

- [20] Derrida, Bernard
Nonlinear Evolution and Chaotic Phenomena
Eds Gallavotti, G e Zweifel, PF
Plenum Publishing Co-1988
- [21] Derrida, Bernard
Fundamental Problems in Statistical Mechanics VII
Ed van Beijeren, H
Elsevier Science Publishers-1990
- [22] Derrida, B e de Sèze, L
J Physique **43**,475(1982)
- [23] Edwards, SF e Anderson, PW
J Phys **F5**,965(1975)
- [24] Entin-Wohlman, O e Domb, C
J Phys **A17**,2247(1984)
- [25] Ghatak, SK e Sherrington, D
J Phys **C10**,3149(1977)
- [26] van Hemmen, JL ; van Enter, ACD e Canisius, J
Z Phys **B50**,311(1983)
- [27] Heermann, DW
Computer Simulation Methods in Theoretical Physics
Springer Verlag-1986
- [28] van Hemmen, JL
Phys Rev Lett **49**,409(1982)
- [29] Hertz, J
Phys Scripta **T10**,1(1985)

- [30] Hopfield, JJ
Proc Natl Acad Sci USA **79**,2554(1982)
- [31] Katsura, Shigetoshi
Prog Theor Phys Supp **87**,139(1986)
- [32] Kirkpatrick, S; Gelatt, CD e Vecchi, MP
Science **220**,671(1983)
- [33] Kaneyoshi, T e Jascur, M
Phys Rev **B46**,3374(1992)
- [34] Kirkpatrick, S e Sherrington, D
Phys Rev **B17**,4384(1978)
- [35] Lage, EJS e de Almeida, JRL
J Phys **C15**,L1187(1982)
- [36] Landau, DP
Phys Rev **B22**,2450(1980)
- [37] Lin, JC
Phys Rev **B43**,13638(1991)
- [38] Morgerstern, I e Binder, K
Phys Rev **B22**,288(1980)
- [39] Mydosh, JJ e Canella, V
Phys Rev **B6**,4220(1972)
- [40] Mydosh, JJ; Canella, V e Budnick, JI
J Appl Phys **42**,1689(1971)

- [41] Metropolis,N;Rosenbluth,AW;Rosenbluth,MN;Teller,AW
e Teller,J
J Chem Phys **21**,1087(1953)
- [42] Mottishaw,PJ e Sherrington,D
J Phys **C18**,5201(1985)
- [43] Mamada,Hiroshi e Takano,Fumihiko
J Phys Soc Japan **25**,675(1968)
- [44] Muller-Hartmann,E e Zitzartz,J
Z Phys **B22**,59(1975)
- [45] Oliveira,MJ e Salinas,SR
Phys Rev **B35**,2005(1987)
- [46] Parisi,Giorgio
Phys Rev Lett **43**,1754(1979)
- [47] Parisi,Giorgio
J Phys **A13**,1101(1980)
- [48] Sá Barreto,FC e Bonfim,OF de A
Physica **A172**,387(1991)
- [49] Sherrington,D e Kirkpatrick,S
Phys Rev Lett **35**,1972(1975)
- [50] Sokal,AD
Monte Carlo Methods in Statistical Physics
New York University-Preprint-1989
- [51] Stinchcombe,RB
Phase Transition and Critical Phenomena-Vol 7

Eds Domb,C e Lebowitz,JL
Academic Press-1983

- [52] Salinas,SR e Wreszinsky,WF
J Stat Phys **41**,229(1985)
- [53] Thouless,DJ ; Anderson,PW e Palmer,RG
Phil Mag **35**,593(1977)
- [54] Thompson,Colin J
Mathematical Statistical Mechanics
Princeton University Press-1972
- [55] Thompson,Colin J
J Stat Phys **27**,441(1982)
- [56] Toulouse,G
Commun Phys **2**,115(1977)
- [57] Vannimenus,J e de Sèze,L
J App Phys **50**,7342(1979)
- [58] Young,AP e Kirkpatrick,S
Phys Rev **B25**,440(1982)
- [59] Ziff,RM e Sapoval,B
J Phys **A19**,L1169(1986)
- [60] Ziman,JM
Models of Disorder
Cambridge University Press-1979