

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA
TESE DE DOUTORADO

**Transições de fases em sistemas magnéticos com frustração e
desordem em grafos aleatórios[‡]**

**Phase transitions in magnetic systems with frustration and
disorder in random graphs**

Alexandre Silveira

Orientador: Rubem Erichsen Junior

Coorientador: Sérgio Garcia Magalhães

Porto Alegre, 20 de dezembro de 2021

[‡]Trabalho financiado pelas agências de pesquisa Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) e Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES)

Sumário

1	Introdução	3
1.1	Conteúdos abordados	5
2	Grafos, Frustração e Desordem	6
2.1	Grafos	6
2.1.1	Transições entre regimes	8
2.1.2	Subgrafos	9
2.1.3	Similaridades com redes reais	10
2.2	Frustração e Desordem	11
2.2.1	Vidros de Spin	11
2.2.2	Desordem	12
2.2.3	Frustração	12
2.2.4	Gelo de Spin	16
2.2.5	Modelos de Vidro de Spin e quebra de Ergodicidade	17
2.2.6	Modelo de Campo Aleatório	23
3	Modelo de van Hemmen	25
3.1	Formalismo com Réplicas	25
3.2	Resultados	34
3.3	Observações finais	40
4	Modelo de Vidros de Spin com campo aleatório	42
4.1	Modelo com campo aleatório	42
4.2	Método de duas réplicas	44
4.3	Resultados	44
4.4	Observações Finais	52
5	Frustração Geométrica, Aglomerados de Spin em grafos aleatórios	54
5.1	Modelo de Aglomerados	54
5.1.1	Susceptibilidade linear	57
5.2	Resultados e discussões	59
5.2.1	Aglomerados Triangulares	60
5.2.2	Aglomerados de Tetraedros	64
5.3	Observações Finais	66
6	Conclusões	69
	Apêndices	71

A	<i>Ansatz</i> de SR para spins com múltiplos estados	71
B	Equações de ponto de sela para modelo de aglomerados	73
C	Funções para aglomerados de 3 spins	76
D	Funções para aglomerados de 4 spins	77
E	Publicações	78

Lista de Figuras

2.1	Grafo completo com 12 nós.	6
2.2	Representação do número de nós entre dois sítios e do caminho médio. Figura retirada de [1].	7
2.3	Representação do coeficiente de aglomeração do sítio i . Figura retirada de [1].	7
2.4	Fração de sítios pertencendo a uma CG N_G/N em função de c	8
2.5	Grafo com $N = 100$ sítios (a) $c = 0.5$ (b) $c = 1.0$ (c) $c = 2.0$ (d) $c = 2.5$ (e) $c = 3.0$ (f) $c = \sqrt{N}$	9
2.6	Formação de subgrafos com mudanças na escala de $p(N)$. Figura retirada de [1].	10
2.7	Caminho médio em função do número de nós para uma rede unidimensional, uma rede quadrada, uma rede cúbica e um grafo aleatório acima do limite de percolação.	11
2.8	(a) Ocorrência de frustração por desordem. (b) Ocorrência de frustração geométrica. Figura retirada de [2].	13
2.9	6 possíveis estados degenerados de um triângulo com interações antiferromagnéticas. Figura retirada de [3].	14
2.10	Rede do <i>Pirocloro</i> composta por tetraedros onde os vértices partilham o mesmo spin. Figura retirada de [4].	15
2.11	Estado de <i>gelo de spin</i> exibindo $\nabla \cdot \mathbf{b} = 0$. Figura retirada de [3]	17
2.12	Energia livre em função do espaço de configurações evoluindo com a temperatura. Figura retirada de [5].	19
2.13	Diagrama de fases no plano H/J contra T/J representando a linha de Almeida-Thouless. Figura retirada de [6].	22
2.14	Mudança de curvatura do diagrama no plano H contra T no antiferromagneto $\text{Fe}_{0.31}\text{Zn}_{0.69}\text{F}_2$. Figura retirada de [7]	24
3.1	Duas soluções coexistentes para a distribuição marginal de campos locais para $T = 0.03$, $h_0 = 0.2$, $D = 0.464$. Solução de baixa ocupação (painel esquerdo) e solução de ocupação alta (painel direito).	35
3.2	Parâmetros de ordem e energia livre em função do campo cristalino para $h_0 = 0.2$, $T = 0.03$ e $c = 12$. Linhas sólidas (tracejadas) correspondem à fase vidro de alta (baixa) ocupação SG_H (SG_L). Linha fina sólida pertence a fase NM. A flecha à esquerda na curva da energia livre sinaliza a transição entre as duas fases vidro e a flecha a direita sinaliza a transição $\text{SG}_L \rightarrow \text{NM}$	36
3.3	Diagrama de fase D contra h_0 no estado fundamental para $c = 4$ (topo esquerda); $c = 6$ (topo direita); $c = 8$ (abaixo esquerda); $c = 12$ (abaixo direita). Linhas solidas (tracejadas) correspondem a transições contínuas (descontínuas). Círculo aberto (fechado) sinalizam pontos bicríticos (trícritos).	37

3.4	Diagramas de fase T contra h_0 para $c = 4$ em alguns valores representativos do campo cristalino: $D = 0,6$ (esquerda); $D = 0,72$ (meio); $D = 0,75$ (direita). Linhas solidas (tracejadas) correspondem à transições contínuas (descontínuas).	38
3.5	Diagramas de fase T contra h_0 para $c = 8$ em dois valores representativos do campo cristalino: $D = 0,6$ (esquerda); $D = 0,7$ (direita). Linhas sólidas (tracejadas) correspondem à transições contínuas (descontínuas).	38
3.6	Diagramas de fase T contra h_0 para $c = 12$, em dois valores representativos do campo cristalino: $D = 0$ (esquerda); $D = 0,6$ (direita). Linhas sólidas (tracejadas) correspondem a transições contínuas (descontínuas).	38
3.7	Acoplamento efetivo em função da temperatura para $c = 4$ com $D = 0,25$ (linha sólida), $D = 0,5$ (linha tracejada) e $D = 0,75$ (linha tracejada e pontilhada).	39
4.1	Distribuição conjunta para $c = 4$, $h_0/J = 0.2$ e $\Delta/J = 0.0$. Acima: $T/J = 0.8$, fase PM, distribuição diagonal onde SR é estável. Abaixo: $T/J = 0.6$, fase VS, distribuição não diagonal onde SR é instável.	45
4.2	q (linhas grossas) e q' (linhas finas) contra T/J para $c = 4$, $h_0 = 0.15$, $\Delta = 0$, $J_0 = 0.5$ (linhas cheias) e $h_0 = 0$, $\Delta = 0.2$ e $J_0 = 0$ (linhas tracejadas).	46
4.3	Diagramas de fase T/J contra J_0/J para $h_0/J = 0.0$, $\Delta/J = 0.0$ (linhas grossas) e $\Delta/J = 0.2$ (linhas finas), para $c = 4$ (topo), $c = 8$ (meio) e conectividade infinita (baixo).	47
4.4	Topo: Diagramas de fase T/J versus h_0/J para $c = 4$ e $J_0 = 0$ para valores diferentes de Δ/J . Abaixo: o mesmo, mas para $c = 8$.	48
4.5	Temperatura reduzida contra amplitude do CA h_0/J para $\Delta/J = 0,00$ e $\Delta/J = 0,01$, para $c = 4$, $c = 8$ e $c = 16$. As linhas solidas servem apenas de guia. Na linha tracejada à esquerda a declividade é $\phi = 2$ e à direita a $\phi = 1$.	49
4.6	Topo: Susceptibilidade não-linear contra temperatura para $c = 4$ e alguns valores de Δ/J . Abaixo: o mesmo, porém para $c = 8$.	50
4.7	Diagramas de fase T/J contra Δ/J para $h_0 = 0$. Topo esquerda: $J_0/J = 0$; $c = 4$ (linhas solidas) e $c = 8$ (linhas tracejadas). Topo direita: $J_0/J = 1.22$ e $c = 4$ (linhas solidas); $J_0/J = 1.15$ e $c = 8$ (linhas tracejadas). Abaixo: $J_0/J = 1.4$; $c = 4$ (linhas solidas) e $c = 8$ (linhas tracejadas). Todas as transições de fase são de segunda ordem.	51
4.8	Fronteira h_0/J da fase VS contra c em $T = 0$, para $\Delta/J = 0.0$ e $\Delta/J = 0.2$. Abaixo e acima das linhas estão localizadas as fases VS (não-ergódica) e PM (ergódica), respectivamente.	52
5.1	Geometria dos aglomerados (a) Triangular (b) Tetraédrica.	60
5.2	Distribuições marginais para cada componente de campo do aglomerado triangular, para $T/J = 0.1$, $c = 4$ e $J_0/J = -5.0$, onde os efeitos de frustração são grandes (veja discussão abaixo). Populações de tamanho $\mathcal{N} = 10^5$ foram utilizadas. (a) Distribuição marginal em relação a componente h_1 de campos, (b) distribuição ao longo da componente h_2 e (c) distribuição marginal ao longo de h_3 .	61
5.3	Diagramas de fase para T/J contra J_0/J , quando consideramos aglomerados como triângulos. A linha fina representa a temperatura T^*/J do <i>crossover</i> entre CSL para PM.	62
5.4	(a) Calor específico magnético C_m contra T/J para valores dos acoplamentos intra-aglomerado $J_0/J = -5.0$ e $J_0/J = -3.0$, para $c = 4$. A miniatura mostra a entropia correspondente a cada valor de J_0/J . (b) Calor específico magnético C_m contra T/J para $c = 4$ e $c = 8$, para $J_0/J = -3.0$.	63

5.5	(a) Curvas do inverso da susceptibilidade magnética χ^{-1} contra T/J para um valor fixo das interações intra-aglomerado $J_0/J = -5.0$ e valores de conectividade $c = 2, c = 4, c = 8$ e $c = 12$. A miniatura mostra as cúspides em detalhe. (b) Curvas do inverso da susceptibilidade magnética χ^{-1} contra T/J para um valor fixo de $c = 8$ e dois valores de interação intra-aglomerado: $J_0/J = -3.0$ e $J_0/J = -5.0$. A miniatura mostra as cúspides em detalhe. As linhas finas representam um ajuste de uma lei de Curie-Weiss na região linear de χ^{-1}	65
5.6	Parâmetro de frustração f_p contra c^{-1} para alguns valores de J_0/J	66
5.7	(a) Número de ocupação de estado do aglomerado Q , parâmetro de VS q e energia livre f contra J_0/J para $T/J = 0.10$ e $c = 8$. (b) O mesmo, porém para $T/J = 0.15$. Linhas sólidas (tracejadas) indicam aquecendo (resfriando). As flechas marcam o local das transições de primeira ordem.	67
5.8	Diagramas de fase T/J contra J_0/J para aglomerados de tetraedros para $c = 4, c = 8$ e $c = 12$. Linhas finas representam transições de primeira ordem e linhas grossas transições de segunda ordem.	68

Nomenclatura

Notações:

- Θ_{CW} : Temperatura de Curie-Weiss
- T_c : Temperatura de congelamento
- T_N : Temperatura de Néel
- k_B : Constante de Boltzmann

Siglas:

- ER: Erdős-Rényi
- EA: Edwards-Anderson
- SK: Sherrington-Kirkpatrick
- SR: Simetria de Réplicas
- AT: Almeida-Thouless
- TAP: Thouless-Anderson-Palmer
- BC: Blume-Capel
- GK: Ghatak-Sherrington
- i.i.d: Independentes e identicamente distribuídas
- CG: Componente Gigante
- RKKY: Ruderman-Kittel-Kasuya-Yosida
- FG: Frustração geométrica
- CSL: Classical Spin Liquid
- PM: Paramagnética
- NM: Não-magnética
- FM: Ferromagnética
- VS: Vidro de Spin
- SG: Spin Glasses
- VSA: Vidro de Spin de Aglomerados
- CSG: Cluster Spin Glass
- SG_L : Low Occupation Spin Glass
- SG_H : High Occupation Spin Glass

- RNFIM: Random Network Random Field Ising Model
- CA: Campo Aleatório

Agradecimentos

Gostaria de agradecer aos meus orientadores, professor Rubem e professor Sérgio pela paciência e dedicação em me orientar.

Agradeço aos meus pais por todo apoio e carinho.

Aos colegas e amigos do curso de física.

Resumo

Nesta tese, estudamos sistemas magnéticos com frustração e desordem em redes com conectividade finita. Especificamente, nos concentramos em grafos aleatórios, onde a existência de uma conexão entre dois sítios da rede é dada a partir de uma distribuição de probabilidade. No limite termodinâmico, a distribuição do número de vizinhos de um sítio é dada por uma distribuição de Poisson. O desenvolvimento de ferramentas teóricas para o estudo de sistemas desordenados teve origem no estudo do problema de Vidros de Spin. Uma das ferramentas que utilizamos é o método de réplicas para sistemas com conectividade finita.

O objetivo principal desse trabalho é analisar como a conectividade finita afeta os observáveis e o comportamento global do sistema. Para isso traçamos diagramas de fase para diferentes valores de conectividade média. Três modelos foram estudados. Primeiramente, estudamos o modelo de van Hemmen, conhecido por ser um modelo de Vidros de Spin que tem solução sem uso de réplicas. Modificamos esse modelo estudando o caso com spins de três estados, com ocupação controlada por um campo cristalino. Além disso adicionamos desordem através de um campo aleatório acoplado a cada spin. O método réplicas foi utilizado para tratar a desordem das realizações do grafo. O segundo modelo estudado foi um modelo de Ising para Vidro de Spin com campo aleatório, onde utilizamos o método de duas réplicas para determinar a localização de quebra de ergodicidade não-trivial. Por último, estudamos o papel da frustração no estabelecimento de uma fase de Vidro de Spin através de um modelo de aglomerados de spins, com interações internas antiferromagnéticas uniformes. Dois tipos de geometria de aglomerado foram comparadas. Um triângulo equilátero, que por construção possui frustração geométrica, e um tetraedro regular que não possui frustração geométrica. Desenvolvemos uma metodologia para estudar as interações entre aglomerados em redes com conectividade finita. Nossa técnica pode ser estendida para lidar com diversas geometrias de aglomerados.

Palavras-chave: desordem, frustração, grafos aleatórios, transições de fase.

Abstract

In this thesis, we study magnetic systems with frustration and disorder in finite connectivity lattices. Specifically, we focus on random graphs, where the existence of a connection between two sites in the lattice is given by a probability distribution. In the thermodynamic limit, the distribution of the number of neighbors of a site is given by a Poisson distribution. The development of theoretical tools for the study of disordered systems started with the study of the Spin Glasses problem. One of that tools we use is the replica method for systems with finite connectivity.

The main objective of this work is to analyze how finite connectivity affects the observables and the global behavior of the system. For this we draw phase diagrams for different values of average connectivity. Three models were studied. Firstly, we studied the van Hemmen model, known for being a Spin Glasses model that has a solution without the use of replicas. We modified this model by studying the case with three-state spins, with occupation controlled by a crystalline field. We also add disorder through a random field coupled to each spin. The replica method was used to deal with the disorder of the graph realizations. The second model studied was an Ising model for Spin Glass with random field, where we used the two-replica method to determine the location of non-trivial ergodicity breaking. Finally, we study the role of frustration in establishing a Spin Glass phase through a spin cluster model, with uniform antiferromagnetic internal interactions. Two types of cluster geometry were compared. An equilateral triangle, which by construction has geometrical frustration, and a regular tetrahedron which has no geometrical frustration. We developed a methodology to study the interactions between clusters in networks with finite connectivity. Our technique can be extended to handle various cluster geometries.

Keywords: disorder, frustration, random graphs, phase transitions.

Capítulo 1

Introdução

Alguns materiais apresentam uma magnetização macroscópica como resultado das interações de troca entre os spins de seus átomos constituintes. Tais materiais são conhecidos como ferromagnéticos (possuem momentos magnéticos de mesma magnitude) ou ferrimagnéticos (possuem momentos de magnitudes diferentes). Um exemplo de material ferrimagnético é a Magnetita Fe_3O_4 , que é um dos materiais magnéticos mais antigos conhecidos. Quando se pensa em estudar um sistema com muitos corpos interagindo, a mecânica estatística é a ferramenta mais adequada. Um modelo simplificado para descrever magnetismo é o modelo de Ising [8]. Nesse modelo, átomos interagem apenas através dos acoplamentos de seus spins, que assumem apenas dois estados possíveis. Para o caso particular do ferromagnetismo, os acoplamentos são todos uniformes e positivos. Contudo, nem sempre é possível resolver o modelo de Ising. A existência de solução depende da rede, da dimensão e da natureza dos acoplamentos entre spins. Um método extensamente utilizado, como primeira aproximação, é o campo médio ou campo molecular. Nesse método, abandona-se a ideia da estrutura da rede e as complexas interações que podem ocorrer entre spins vizinhos, e substitui-se por um campo magnético efetivo, definido pelas flutuações da magnetização do próprio spin. Apesar de simples, a teoria de campo médio permite a previsão de transições de fase e, também, o comportamento da magnetização medida em função da temperatura. Em sistemas de muitos corpos, a variação de parâmetros externos, como a temperatura, acarreta uma mudança no comportamento global, coincidindo com um efeito macroscópico. No caso do ferromagneto, em altas temperaturas, existe uma fase onde não há ordenamento dos spins dos átomos constituintes, o que coincide com uma medida de magnetização nula. Ao resfriar o sistema, observa-se, numa certa temperatura, o aparecimento de ordenamento magnético de longo alcance que é medido macroscopicamente como uma magnetização. Tipicamente, essa temperatura é referida como temperatura de congelamento. Fenômenos de emergência de comportamentos, com a mudança de parâmetros externos, fazem parte do estudo de transições de fase.

Uma troca no sinal dos acoplamentos acarreta uma mudança do tipo de ordenamento magnético. Se os acoplamentos forem uniformemente negativos, isso constitui um antiferromagneto. Abaixo da temperatura de congelamento, os spins encontram-se num arranjo conhecido como ordem de Néel [9]. Se por outro lado o sinal e módulo das interações forem aleatórios, isto é, se as interações forem desordenadas, questiona-se, então, que tipo de ordenamento magnético é de se esperar. A resposta é que nenhum ordenamento espacial dos spins ocorre. No entanto, uma fase magnética não convencional emerge. Nessa fase, os spins encontram-se congelados em direções aleatórias no espaço. Diferentemente do que ocorre numa fase paramagnética, os spins persistem apontando em certas direções, apresentando uma autocorrelação temporal em

seu estado de spin. Como resultado disso, não há magnetização líquida. Sistemas desordenados com esse tipo de congelamento são denominados Vidros de Spin (VS), em inglês *Spin Glasses* (SG) [5]. As primeiras detecções de VS apareceram em ligas magnéticas, que consistem em impurezas magnéticas como ferro (Fe), diluídas em um hospedeiro metálico não-magnético como ouro (Au) [10]. A denominação Vidro de Spin origina-se de uma analogia com Vidros Estruturais como SiO_2 . Ambos sistemas apresentam longos tempos de relaxação até atingir o estado de equilíbrio.

Uma consequência da desordem nos acoplamentos é o aparecimento de frustração. Um conjunto de spins interagentes possui frustração, quando existe competição entre os acoplamentos, ou seja, quando há a impossibilidade de satisfazer um ou mais acoplamentos simultaneamente, ocasionando uma degenerescência nos estados de energia. Apesar de ser fundamental na estabilização de uma fase VS, o estudo de frustração consiste num campo de pesquisa à parte, que apenas recentemente começou a ganhar atenção [11]. Teoricamente, pode-se falar de sistemas onde há apenas a presença de frustração, sem a presença de desordem, sendo que essa frustração possui origem puramente geométrica. Experimentalmente, no entanto, impurezas e defeitos ocorrem, logo, considera-se sistemas frustrados que possuam desordem infinitesimal. Sistemas frustrados podem apresentar ordenamento magnético em uma certa temperatura. Porém, resultados de experimentos mostram que a temperatura de congelamento é tipicamente menor do que a temperatura de Néel. Então, a fração T_N/T_c [11, 12] é definida como uma medida empírica de detecção de frustração no material, onde $T_N \sim \Theta_{CW}$. Uma justificativa para essa redução na temperatura de congelamento é a degenerescência introduzida pela frustração. Sistemas frustrados possuem um número extensivo de graus de liberdade mesmo no estado fundamental. Logo, o sistema consegue permanecer no estado fundamental, flutuando continuamente entre as muitas configurações possíveis e sem exibir um ordenamento de longo alcance.

Nos possíveis comportamentos magnéticos explanados acima, foram efetuadas apenas modificações nos acoplamentos, ou seja, deixamos de lado a possibilidade de introduzir desordem nas conexões da rede, ou seja, a existência ou não de uma conexão entre um par de sítios é obtida a partir de uma distribuição de probabilidade. Uma forma de utilizar a teoria de campo médio é considerar que todos elementos da rede interagem entre si. No entanto, essa aproximação é muito distante do que ocorre em materiais estudados experimentalmente, onde as interações são, tipicamente, de curto alcance e a dimensão da rede é finita. Estudos de modelos em redes com conectividade finita podem ser uma alternativa ao tratamento de campo médio, que é usualmente utilizado. Dessa forma, preservam-se alguns aspectos das redes cristalinas encontradas nos materiais.

O estudo de redes compõe outro campo de pesquisa, com um vasto número de aplicações. Redes podem ser mapeadas como conjunto de pontos e ligações denominados grafos. Um modelo de grafo muito estudado é o de Erdős-Rényi [13, 14], onde o número de pontos da rede é mantido fixo, e as ligações são designadas através de uma distribuição de probabilidade. Denomina-se esse modelo como grafo aleatório. A vantagem do grafo aleatório sobre o campo médio é que a conectividade é um parâmetro controlável. Logo, para modelos construídos em grafos aleatórios, espera-se obter resultados próximos aos encontrados em experimentos e, conseqüentemente, essa seja uma alternativa melhor do que o campo médio. Para um grafo aleatório com número de sítios suficientemente grande, a distribuição do número de vizinhos é dada pela distribuição de Poisson. Entretanto, em redes reais, como por exemplo a World Wide Web, a distribuição de vizinhos tende a ser uma lei de potências, onde existem poucos aglomerados gigantes, como o Google, que estão conectados com a maior parte dos outros domínios da rede, e muitos aglomerados pequenos que estão conectados com poucos domínios da rede [15].

Esse trabalho tem como objetivo o uso de grafos aleatórios como uma ferramenta para estudar modelos magnéticos, contendo desordem e frustração, e as transições que podem ocorrer nesses modelos, quando a conectividade média é um parâmetro controlável.

1.1 Conteúdos abordados

O presente trabalho está dividido da seguinte forma.

No capítulo 2, fazemos uma introdução sobre grafos, sistemas desordenados e sistemas frustrados.

No capítulo 3, estudamos o modelo de van Hemmen no grafo aleatório, com estados de spin $\{-1, 0, 1\}$ controlados por um campo cristalino D e também adicionamos um campo aleatório bimodal.

No capítulo 4, estudamos o modelo de campo aleatório no grafo de Erdős-Rényi com spins de Ising e introduzimos o método de duas réplicas para determinar as linhas de transição de fase.

No capítulo 5, estudamos um modelo de aglomerados com interações desordenadas e utilizamos dois tipos de geometria dos aglomerados para comparar os efeitos de presença e ausência da frustração geométrica na estabilização da fase VS.

Capítulo 2

Grafos, Frustração e Desordem

2.1 Grafos

A teoria de grafos consiste no estudo de redes de pontos e as conexões entre eles. Matematicamente $G = \{P, E\}$, com P representando o conjunto de sítios e E o conjunto de ligações entre pares de sítios, respectivamente. Originalmente, seu estudo foi motivado pelo problema das sete pontes de Königsberg, cuja solução é devido a Leonhard Euler, em 1735 [1, 16]. Usualmente, os pontos da rede são chamados de nós e as ligações de arestas. Na figura (2.1), temos um exemplo do grafo completo K_{12} . O grau de um nó, representando por k , é definido como o número de vizinhos que um nó possui, no caso desse grafo $k = 11$. Dentro da teoria de grafos, existe uma área denominada grafos aleatórios. Tais grafos foram originalmente criados por Paul Erdős e Alfred Rényi (ER) [13, 17]. Um grafo pode ser definido pela sua matriz de adjacência $C = \{c_{ij}\}$, se $c_{ij} = 1$, existe uma conexão entre os nós i e j , e se $c_{ij} = 0$ não existe. Uma das maneiras de se construir um grafo aleatório, é fixar o número de nós e definir a probabilidade de haver conexões entre nós da seguinte forma:

$$p(c_{ij}) = p\delta_{c_{ij},1} + (1 - p)\delta_{c_{ij},0} \quad (2.1)$$

onde N é o número de nós e

$$c = p(N - 1) \simeq pN, \quad (2.2)$$

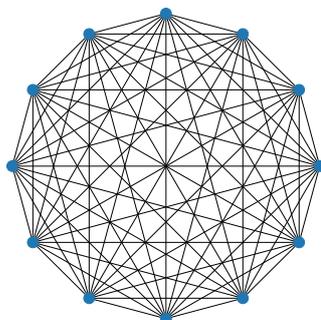


Figura 2.1: Grafo completo com 12 nós.

representa a conectividade média de cada nó. A probabilidade que um certo nó do grafo possua um grau k é dada por

$$p(k) = \frac{(N-1)!}{k!(N-1-k)!} p^k (1-p)^{N-1-k}. \quad (2.3)$$

No $\lim_{N \rightarrow \infty}$, $p(k)$ converge para uma distribuição de Poisson

$$p(k) = \frac{c^k e^{-c}}{k!}. \quad (2.4)$$

A seguir, apresentamos alguns conceitos no estudo de grafos.

Caminho médio mais curto

O caminho médio mais curto (geodésica) entre dois nós i e j é dado por

$$\langle d \rangle = \frac{2 \sum_{i < j} d_{ij}}{N(N-1)}, \quad (2.5)$$

onde d_{ij} representa o número de nós entre os sítios i e j . O diâmetro d_{max} é definido como a distância máxima que existe entre um par de nós no grafo. Os grafos aleatórios apresentam outra propriedade conhecida como “seis graus de separação” ou “fenômeno de pequeno mundo” que está relacionado ao fato de que o caminho médio é da ordem de $\langle d \rangle \sim \frac{\log(N)}{\log(c)}$ [18]. Então, as distâncias entre dois nós são muito menores do que o tamanho da rede.

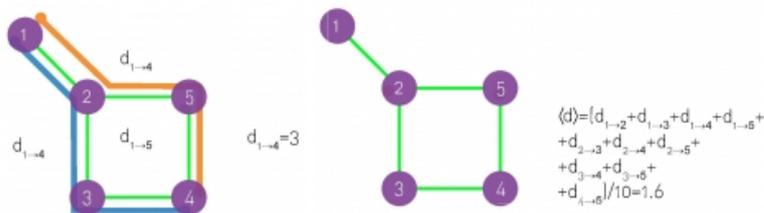


Figura 2.2: Representação do número de nós entre dois sítios e do caminho médio. Figura retirada de [1].

Coefficiente de aglomeração

O coeficiente de aglomeração local

$$C_i = \frac{2L_i}{k_i(k_i - 1)}, \quad (2.6)$$

L_i é o número de ligações entre os k_i vizinhos do sítio i .

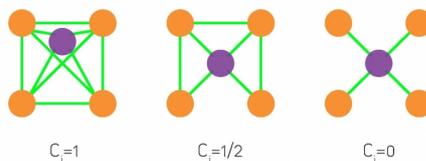


Figura 2.3: Representação do coeficiente de aglomeração do sítio i . Figura retirada de [1].

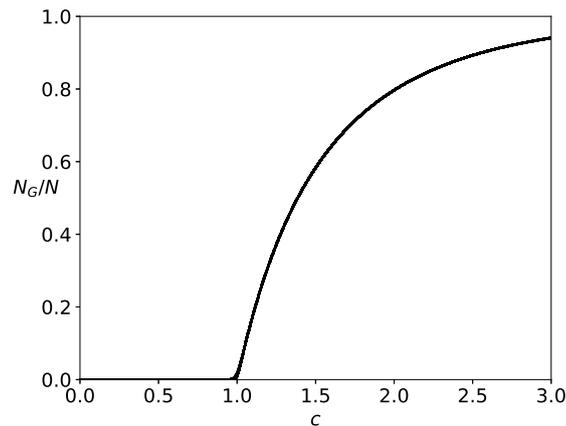


Figura 2.4: Fração de sítios pertencendo a uma CG N_G/N em função de c .

2.1.1 Transições entre regimes

Uma componente consiste em um subconjunto de nós, sendo que sempre há um caminho entre quaisquer dois nós na componente. Definindo N_G como o número de sítios na maior componente conexa, fazemos as seguintes observações de acordo com o valor de p : se $p = 0$, cada sítio constitui uma componente isolada e $N_G = 1$; para $p = 1$, todos os sítios estão conectados entre si e a componente tem tamanho $N_G = N$; para $p < 1/N$, existem apenas pequenos aglomerados em formato de árvores de tamanho $N_G \sim \log(N)$; para $p = p_c = 1/N$, ocorre uma transição similar à transição de percolação, e as componentes possuem tamanho $N_G \sim N^{2/3}$; para $p > p_c = 1/N$, há o surgimento de uma componente gigante (CG), ou seja, que contém uma fração finita do total sítios $N_G/N \sim c - 1$; para $p \geq \log(N)/N$, sempre existe um caminho entre dois nós e a maior parte dos sítios pertence a CG $N_G \approx N$. Para melhor compreensão de como ocorre essa transição para diferentes valores de p , deduzimos a seguinte equação. Considere que o número de sítios que não pertence a uma CG é definido por $u = 1 - N_G/N$. Se o sítio i não pertence a CG, isso pode se dar de duas formas: não existe uma conexão entre i e j , sendo que $j \in CG$; existe uma conexão entre i e j , porém $j \notin CG$. A probabilidade desses dois cenários somada é $(1 - p + pu)$. Como cada sítio possui um total de $N - 1$ possíveis vértices que o conectariam a CG, obtemos que a fração de sítios que não pertence a CG pode ser escrita como $u = (1 - p + pu)^{N-1}$. Utilizando $p = c/(N - 1)$ e tomando logaritmo em ambos lados, pode-se demonstrar que $u = \exp(-c(1 - u))$, definindo a fração de sítios que pertence a CG como S e logo $S = 1 - u$, chegamos a equação

$$N_G/N = 1 - \exp(-cN_G/N) \quad (2.7)$$

[1]. Essa equação é válida apenas no $\lim_{N \rightarrow \infty}$. Calculando a equação (2.7) de forma auto-consistente, podemos visualizar a transição entre regimes. O resultado é mostrado na figura 2.4. Repare que para $c < 1$, N_G/N permanece zero. Porém, ao cruzar o valor crítico $c = 1$, N_G/N passa a crescer continuamente. Para auxiliar a compreensão, representamos, na figura 2.5, um grafo de $N = 100$ sítios, nos diferentes regimes de topologia.

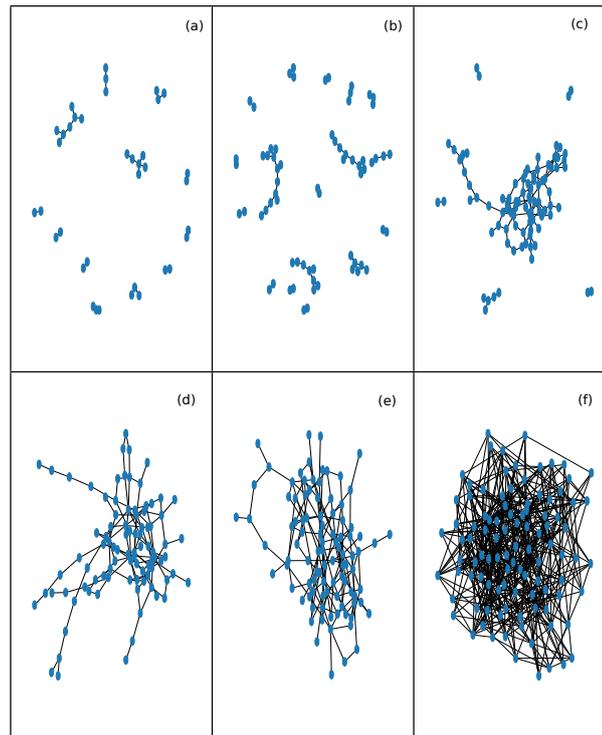


Figura 2.5: Grafo com $N = 100$ sítios (a) $c = 0.5$ (b) $c = 1.0$ (c) $c = 2.0$ (d) $c = 2.5$ (e) $c = 3.0$ (f) $c = \sqrt{N}$.

2.1.2 Subgrafos

Um subgrafo consiste de um subconjunto de nós e de conexões $G_1 = \{P_1, E_1\}$ do grafo G . Um exemplo de subgrafos são árvores, ou seja, sítios que possuem apenas um caminho entre si e não há formação de caminhos fechados. A ordem de uma árvore determina o número k de sítios que cada sítio se conecta. Outro exemplo de subgrafo são ciclos fechados contendo k sítios. A emergência de certos subgrafos depende de como a probabilidade da existência de conexão entre dois sítios $p(N)$ escala com o tamanho da rede. Seguindo a referência [17], podemos escrever a seguinte prescrição $p(N) \sim N^z$. Na figura 2.6, mostramos alguns exemplos do aparecimento de tipos de subgrafos de acordo com o aumento de $p(N)$. Para $p(N) < 1/N$, apenas subgrafos em formato de árvores estão presentes. À medida que $p(N)$ se aproxima de $1/N$, árvores de ordem maior aparecem. No ponto de transição $p(N)_c = 1/N$, a probabilidade de existir um ciclo fechado de ordem k torna-se finita. Um ciclo fechado, como por exemplo um triângulo, também é um subgrafo completo, onde todos nós se conectam entre si. Subgrafos completos de ordem $k = 4$ aparecem para $p(N) = 1/N^{2/3}$, e subgrafos completos de ordem maior continuam a emergir com aumento de $p(N)$. Para $p(N) = 1$, o grafo contém subgrafos completos de todas as possíveis ordens. Se os nós do grafo forem ocupados por spins ou aglomerados de spins, e as conexões do grafo possuírem módulo e sinal, respectivamente, então certos regimes de $p(N)$ podem favorecer o aparecimento de frustração geométrica (FG). Como por exemplo, quando subgrafos completos no formato de triângulo com interações antiferromagnéticas começam a povoar o grafo. Isso aponta uma relação entre o aumento da conectividade e da frustração.

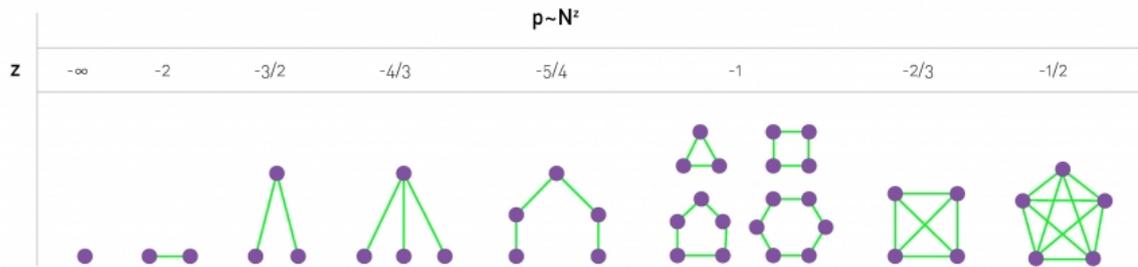


Figura 2.6: Formação de subgrafos com mudanças na escala de $p(N)$. Figura retirada de [1].

2.1.3 Similaridades com redes reais

Utilizando os conceitos que introduzimos sobre grafos, faremos uma breve comparação entre o grafo aleatório e algumas redes regulares que, tipicamente, constituem a estrutura de materiais magnéticos estudados. No grafo aleatório, o grau de um sítio é dado pela distribuição de Poisson (2.4). Então, cada sítio tem em média $\langle k \rangle = c$ vizinhos. Numa rede cúbica, por exemplo, o número de vizinhos é finito e sempre fixo $k = 6$. Na figura 2.7, comparamos $\langle d \rangle$ no grafo aleatório com outras três redes regulares. Como mencionamos anteriormente, grafos aleatórios possuem um caminho médio que escala com $\sim \log(N)$. Então, em redes com N grande, $\langle d \rangle$ tende a ser menor do que em redes regulares. Note, também, que o caminho médio no grafo aleatório é muito mais similar ao de uma rede cúbica. Todas as redes regulares comparadas possuem coeficiente de aglomeração $C_i = 0$, ou seja, os vizinhos de um sítio não se conectam entre si. No grafo aleatório $C_i \sim \frac{c}{N}$, logo $C_i \rightarrow 0$ quando o número de sítios é grande. Nas redes regulares, o tamanho das componentes é sempre $N_G = N$, já no grafo aleatório, no regime esparso $p \sim c/N$, a CG contém uma fração finita dos sítios. Por exemplo, para $c \sim 2$ a CG já contém cerca de 80% dos sítios. Sabemos que existem outras metodologias, como a rede totalmente conexa, ou seja, campo médio, que desconsidera totalmente a estrutura da rede e, também, a solução na rede de Bethe, que é conhecida por possuir problemas de fronteira [19]. Em suma, o grafo aleatório possui medidas bastante similares a essas redes regulares, tornando-o um bom candidato para uma primeira aproximação para sistemas físicos e também uma alternativa outros métodos acima citados.

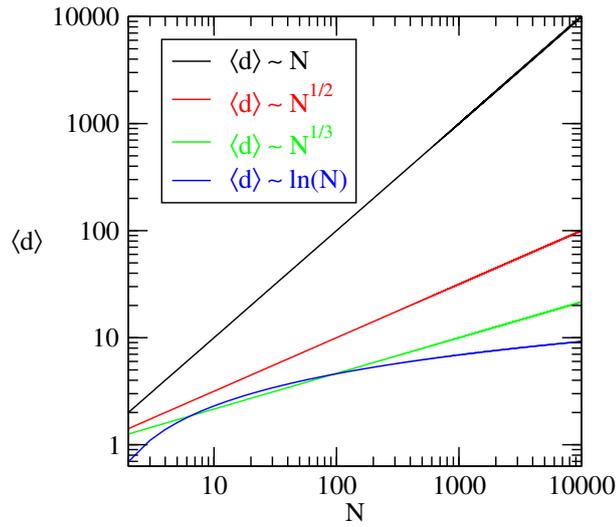


Figura 2.7: Caminho médio em função do número de nós para uma rede unidimensional, uma rede quadrada, uma rede cúbica e um grafo aleatório acima do limite de percolação.

2.2 Frustração e Desordem

2.2.1 Vidros de Spin

Vidros de Spin são materiais que apresentam uma fase magnética sem ordem espacial de longo alcance. Nessa fase, os spins encontram-se congelados em direções aleatórias. Alguns exemplos de VS muito estudados são as ligas magnéticas $\text{Au}_{1-x}\text{Fe}_x$ e $\text{Cu}_{1-x}\text{Mn}_x$, onde as impurezas magnéticas Fe e Mn são diluídas nos respectivos hospedeiros metálicos Au e Cu, e o semiconductor $\text{Eu}_x\text{Sr}_{1-x}\text{S}$. O tópico de VS despertou atenção dos físicos teóricos após resultados de Canella e Mydosh [10] que mostravam uma cúspide na medida da susceptibilidade magnética com campo externo variável no tempo χ_{AC} , esse campo é superposto a um campo estático H que deve ser cuidadosamente afinado para não ocultar o aparecimento da cúspide. Além disso, medidas feitas por P. Monod e H. Bouchiat [20, 21] revelam uma divergência na susceptibilidade magnética não-linear

$$\chi_{VS} = N^{-1} \sum_{i,j} \left\langle \left(\langle \sigma_i \cdot \sigma_j \rangle - \langle \sigma_i \rangle \langle \sigma_j \rangle \right)^2 \right\rangle_J \quad (2.8)$$

onde $\langle \dots \rangle$ e $\langle \dots \rangle_J$ representam, respectivamente, as médias sobre as flutuações térmicas e a desordem nos acoplamentos. Então, experimentalmente, há evidências convincentes de que uma transição de fase de equilíbrio existe. O problema do espalhamento, entre uma impureza magnética interagindo com elétrons de condução num metal, já havia sido tratado por Kondo [22]. O aparecimento de uma fase VS é o resultado de uma concentração x suficiente de impurezas magnéticas diluídas no metal. Os acoplamentos entre essas impurezas são descritos pela interação de troca indireta de Ruderman-Kittel-Kasuya-Yosida (RKKY) [23, 24, 25] que tem a forma [26]

$$J_{RKKY} \propto \frac{\cos 2k_F r}{r^3}, \quad (2.9)$$

onde k_F corresponde ao número de onda de Fermi. O interessante sobre esse tipo acoplamento é que ele confere um caráter oscilatório, tanto de sinal quanto de módulo, dependendo das distâncias entre as impurezas magnéticas.

2.2.2 Desordem

Desordem é o resultado de alguma operação aleatória. No caso das ligas magnéticas, a desordem é do tipo posicional *site disorder* porque as impurezas estão localizadas em posições r_i aleatórias no metal. Esse resultado pode ser obtido através do seguinte processo: considere uma rede regular, onde cada sítio está ocupado por uma impureza magnética. Então, aleatoriamente, exclui-se metade dos sítios. Outra forma de desordem é a desordem nas ligações *bond disorder*. Considere, novamente, uma rede regular onde os acoplamentos ocorrem apenas entre primeiros vizinhos e, ao invés de excluir os sítios aleatoriamente, define-se as interações entre vizinhos, através de distribuições Gaussianas ou Bimodais. Independente da forma de desordem, como por exemplo no caso da desordem nos acoplamentos, após o sorteio das interações, elas devem ser mantidas fixas. Assim, denomina-se essa desordem como *quenched-disorder* [5] em português desordem congelada.

2.2.3 Frustração

Um sistema pode adquirir frustração de duas formas: desordenadamente e geometricamente. Na figura 2.8(a), um processo de desordem congelada faz com que três dos acoplamentos sejam antiferromagnéticos e um seja ferromagnético. Como resultado, o spin do canto direito superior é incapaz de satisfazer todas interações com seus vizinhos ao mesmo tempo, resultando num estado frustrado. Por outro lado, frustração também pode ter origem geométrica. Na figura 2.8(b), representamos um triângulo de spins de Ising, onde todas as interações são antiferromagnéticas. Por causa da geometria, cada spin tem dois vizinhos com ligações antiferromagnéticas, sendo incapaz de encontrar um estado que satisfaça as ambas ligações simultaneamente. Tanto no caso do quadrado, quanto no do triângulo, a frustração resulta numa degenerescência local dos estados de energia. No quadrado, 8 estados possuem a mesma energia. No triângulo, 6 estados estão degenerados, como representando na figura 2.9. Essa degenerescência é considerada como “acidental”, no sentido de que não é obtida através de uma operação de simetria [27].

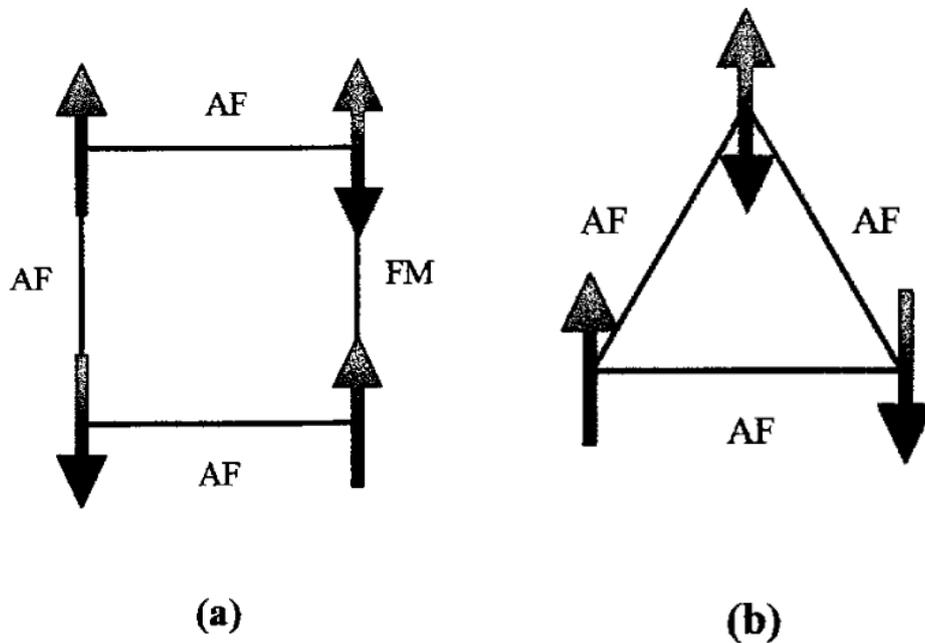


Figura 2.8: (a) Ocorrência de frustração por desordem. (b) Ocorrência de frustração geométrica. Figura retirada de [2].

Considere, por exemplo, o Hamiltoniano

$$H(\{\sigma\}) = - \sum_{(i,j)} J_{ij} \sigma_i \cdot \sigma_j, \quad (2.10)$$

os spins σ_i podem ser vetores normalizados $|\sigma_i| = 1$ com q componentes. Quando $q = 1$, ou seja, spins de Ising e, as interações são ferromagnéticas $J_{ij} = J$, com $J > 0$, o estado fundamental é degenerado. Existem duas configurações de mesma energia, uma com todos spins para cima e outra com todos spins para baixo. Essas configurações estão relacionadas através de uma operação de simetria, que consiste na inversão de todos spins. No caso particular de um aglomerado de p spins com interações AF ($J_{ij} = -J$), pode-se reescrever o Hamiltoniano (2.10) como $H(\{\sigma\}) = \frac{J}{2} |\sum_i \sigma_i|^2 + cte$ [27]. Considerando, novamente, spins de Ising, num aglomerado com $p = 4$, o estado fundamental é dado pelas configurações que satisfazem $\sum_i \sigma_i = 0$, ou seja, 2 spins para cima e dois spins para baixo, totalizando 6 estados de mesma energia. Numa rede composta por esses aglomerados, conhecida como rede do *Pirocloro* [4], cada spin é dividido por dois tetraedros, logo existem $N_T = N/2$ tetraedros, onde N é o número total de spins. Uma representação da rede pode ser encontrada na figura 2.10.

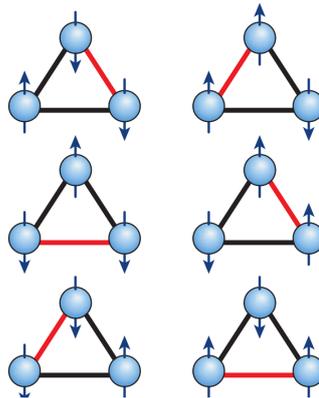


Figura 2.9: 6 possíveis estados degenerados de um triângulo com interações antiferromagnéticas. Figura retirada de [3].

É possível se calcular a entropia do estado fundamental utilizando uma estimativa de Pauling [28]. Se não houvesse restrições do estado fundamental, o número total de estados seria $\Omega = 2^{2N_T}$, porém, para cada tetraedro, apenas $(6/16)$ configurações são permitidas, então, um limite superior no número de configurações no estado fundamental é $\Omega \leq 2^{2N_T} (6/16)^{N_T} = (3/2)^{N_T}$. Isso corresponde a uma entropia do estado fundamental $S(T = 0) \equiv S_0 = N_T k_B \ln(3/2)$ [29], onde k_B é a constante de Boltzmann. Essa estimativa supõe que os vínculos impostos por cada tetraedro são independentes [30], apesar disso, o resultado obtido está de acordo com o obtido numericamente [31] e experimentalmente [32]. Quando consideramos um aglomerado com spins de $q = 3$ componentes, ou seja, variáveis contínuas, ao invés de contar estados discretos, conta-se o número de graus de liberdade [28]. No caso de uma rede do *Pirocloro* com spins de $q = 3$ componentes, o número de graus de liberdade do estado fundamental pode ser estimado através de um processo de contagem Maxwelliano [33] aplicado para spins [34]

$$F = D - K, \quad (2.11)$$

onde F é o número total de graus de liberdade e K é o número de vínculos que deve ser satisfeito no estado fundamental. Para spins de $q = 3$ componentes, existem 2 graus de liberdade por spin (dois ângulos θ e ϕ são necessários para especificar a orientação de cada spin), totalizando $F = 2N$. O número de vínculos é calculado assumindo que cada vínculo pode ser satisfeito independentemente. No caso do *Pirocloro*, é necessário que o spin total $\sum_i^p \sigma_i$ seja nulo em cada aglomerado, totalizando $K = 3N_T$ vínculos (as 3 componentes do spin total de cada tetraedro precisam ser nulas). Como resultado, temos $D = 2N - 3N_T = 4N_T - 3N_T = N_T$, o que resulta numa quantidade extensiva de graus de liberdade no estado fundamental.

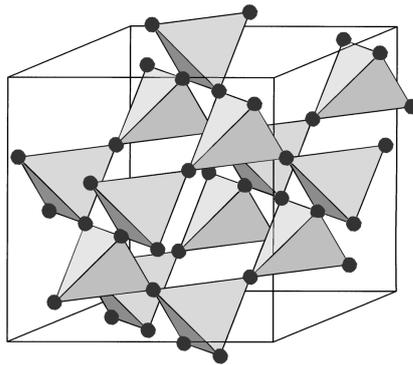


Figura 2.10: Rede do *Pirocloro* composta por tetraedros onde os vértices partilham o mesmo spin. Figura retirada de [4].

O antiferromagneto com spins de Ising na rede triangular foi um dos primeiros modelos com frustração geométrica a ser estudado. Os autores [35, 36] demonstram que a entropia do estado fundamental é dada por $S_0 \simeq 0.32k_B$. Como vimos, essa entropia residual é uma consequência da degenerescência do estado fundamental. Para modelos onde existem apenas interações antiferromagnéticas, o arranjo geométrico dos spins, seja num triângulo ou numa cadeia fechada com um número ímpar de sítios, é uma condição necessária, porém não suficiente para existência de frustração [37]. Como exemplo, considere o caso da rede triangular com spins de $q = 2$ componentes, como no modelo XY. Pode-se demonstrar que existe um único estado fundamental que é constituído por 3 sub-redes que formam ângulos de $\pm 120^\circ$ entre si [38]. É importante também notar que apenas a presença de interações antiferromagnéticas não garante a existência de frustração. Considere uma rede cúbica, onde as interações entre spins ocorrem somente entre primeiros vizinhos e são puramente antiferromagnéticas. O estado fundamental possui ordem de Néel, pois como a rede cúbica pode ser particionada em duas sub-redes, então os spins de cada sub-rede alinham-se na mesma direção e em oposição à direção dos spins da outra sub-rede [27]. Na fase paramagnética, a susceptibilidade é dada pela lei de Curie $\chi \propto T^{-1}$. A solução de campo médio prevê que a temperatura de congelamento para o Hamiltoniano (2.10) é dada por $T_c = \frac{2}{3}zS(S+1)k_B|J|$, onde z representa o número de primeiros vizinhos e $S = \{1/2, 1, \dots\}$. Utilizando a solução de campo médio pode-se mostrar que a susceptibilidade magnética linear para $T \gg T_c$ é dada pela lei de Curie-Weiss

$$\chi(T) = C/(T - \Theta_{CW}), \quad (2.12)$$

e nesse caso $\Theta_{CW} = \frac{2}{3}zS(S+1)k_B J$. Esse resultado, válido para $J > 0$ e $J < 0$, fornece uma escala de energia para que ocorra ordenamento em sistemas antiferromagnéticos. Os resultados de Wannier [35] são válidos tanto para interações ferromagnéticas quanto antiferromagnéticas. A energia do estado fundamental para um ferromagneto na rede triangular obtida é $U(T=0) = -1.5J$, com uma transição de fase ocorrendo em $T = 2J/\log(3)$ [39]. No caso em que as interações são $J < 0$, não existe ordenamento magnético e a energia do estado fundamental é $U(T=0) = -0.5J$. Esse resultado mostra um exemplo onde a ordem é totalmente suprimida pela frustração geométrica, o que resulta numa entropia residual. Comparando as energias $U \sim k_B T$, pode-se estimar que, caso algum ordenamento venha a existir num sistema frustrado, a T_c tende a ser muito menor do que a prevista para um sistema sem FG. Apesar de ser um modelo ideal, o resultado é totalmente incompatível com a terceira lei da termodinâmica que afirma que $S_0 = 0$. Contudo, em materiais magnéticos reais que apresentam frustração, perturbações numa escala de energia que diferem da escala J para as transições de fase, removem a degenerescência

[30], fazendo que algum ordenamento apareça. Levando em conta esses fatos, pode-se definir, empiricamente, o grau de frustração [11]

$$f_p = |\Theta_{CW}|/T_c, \quad (2.13)$$

onde T_c representa a temperatura de ordenamento magnético e Θ_{CW} corresponde à temperatura de Curie-Weiss. Outra característica que não é capturada pela teoria de campo médio é o aparecimento de correlações à medida que o sistema se afasta de Θ_{CW} . No antiferromagneto na rede triangular com spins de Ising as correlações são de ordem $\langle \sigma_0 \sigma_r \rangle \propto r^{-1/2}$ [40]. Para sistemas frustrados, dentro do regime $T_c < T \ll \Theta_{CW}$, os spins flutuam entre os muitos estados degenerados e possuem correlações finitas, porém não há emergência de uma ordem de longo alcance. Essa fase é denominada de *cooperative paramagnet* [41] em português paramagnetismo cooperativo, também conhecido na literatura como Classical Spin Liquid (CSL) em português líquido de spin clássico. Na aproximação de campo médio, numa rede FCC dividida em 4 sub-redes, o valor obtido de $f_p = 3$ [2]. Acrescentando interações de segundos vizinhos e, por consequência, aumentando o número de sub-redes para 8, Anderson obteve $f_p = 5$ [42]. Estendendo o número de sub-rede para 32, considerando terceiros e quartos vizinhos Ter Haar e Lines [43] obtém um valor de $f_p = 15$. Porém, materiais como por exemplo o NaTiO_2 possuem $f_p > 500$ com apenas 3 sub-redes. Logo, estima-se que a aproximação de campo médio deixa de ser válida para descrever materiais com $f_p = 10$ [2]. Levando esses resultados em consideração, Ramirez [12] sugere uma classificação empírica do grau de frustração: $f = 1$ representa um sistema não frustrado; $1 < f < 10$, representa um sistema com frustração moderada e $f > 10$ representa um sistema fortemente frustrado.

2.2.4 Gelo de Spin

Um exemplo de CSL é o antiferromagneto na rede do *Pirocloro*. O caso de *gelo de spin*, primeiramente estudado por Harris [44], possui realização experimental nos materiais $\text{Dy}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ e $\text{Ho}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$, é um caso particular desse modelo, possuindo anisotropia de orientação dos spins. A orientação é direcionada no eixo que liga os centros dos tetraedros, passando pelo spin que os conecta, e as interações de troca são ferromagnéticas, ou seja, um ferromagneto frustrado. Esse modelo é chamado de *gelo de spin* pois, similar a fase de gelo da água, exhibe regras de gelo. No caso da água sempre existem dois elétrons próximos e dois mais distantes, já no *gelo de spin* dois spins sempre apontam para dentro e dois para fora. Pode-se mostrar que a fase de *gelo de spin* exhibe correlações de longo alcance, como consequência do vínculo imposto pelas regras de gelo. Através de uma analogia com eletromagnetismo, é idealizado um campo \mathbf{b} artificial, originados pelos vetores de spin. Na figura 2.11, representamos os vetores de spin originando linhas de fluxo imaginárias. Por causa da imposição de que dois spins devem apontar para dentro do tetraedro e dois para fora, isso define um campo que possui divergência nula $\nabla \cdot \mathbf{b} = 0$. Como ocorrem flutuações nos spins, o campo \mathbf{b} também flutua. Os autores [45] demonstram que, no equilíbrio, esse campo flutua similarmente a um campo magnético no vácuo. Isso implica correlações de alcance $\propto 1/r^3$, onde r representa a distância entre spins.

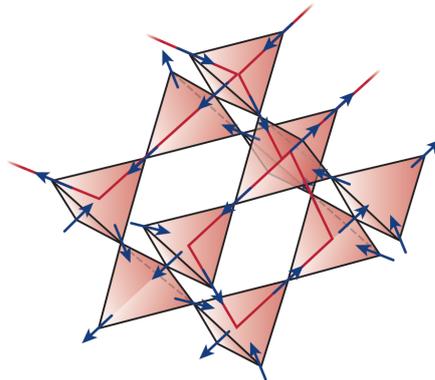


Figura 2.11: Estado de *gelo de spin* exibindo $\nabla \cdot \mathbf{b} = 0$. Figura retirada de [3]

2.2.5 Modelos de Vidro de Spin e quebra de Ergodicidade

Modelo de Edwards-Anderson

Na seção 2.2.1, mencionamos algumas medidas experimentais que sugeriam fortemente a existência de um estado de equilíbrio nas ligas magnéticas como $\text{Cu}_{1-x}\text{Mn}_x$. Em 1975, Edwards e Anderson (EA) [46] propuseram um modelo simplificado, incluindo apenas os requerimentos necessários para existência da fase VS. Em vez de utilizar interações do tipo RKKY, os J_{ij} são escolhidos a partir de uma distribuição de probabilidade Gaussiana

$$P(J_{ij}) \propto \exp\left(-\frac{J_{ij}^2}{2J^2}\right). \quad (2.14)$$

Dessa forma, o modelo possui desordem congelada e frustração. O Hamiltoniano é similar ao da equação (2.10)

$$H_{EA}(\{\boldsymbol{\sigma}\}) = -\sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \boldsymbol{\sigma}_i \cdot \boldsymbol{\sigma}_j, \quad (2.15)$$

porém as somas $\langle i, j \rangle$ são apenas entre os primeiros vizinhos de uma rede regular. EA também propuseram o parâmetro de ordem para detectar a fase VS. Os autores decidiram abdicar da existência de ordenamento espacial de longo alcance dos spins, optando, assim, procurar por ordenamento temporal de longo alcance

$$q_{EA} = \lim_{t \rightarrow \infty} \lim_{N \rightarrow \infty} \left\langle \langle \boldsymbol{\sigma}_i(0) \cdot \boldsymbol{\sigma}_i(t) \rangle \right\rangle_J. \quad (2.16)$$

O parâmetro q_{EA} , mede a autocorrelação entre um spin com ele mesmo, após um longo tempo t decorrido. A ordem dos limites na equação (2.16) é importante porque, se o limite sobre $t \rightarrow \infty$ for tomado primeiro, as barreiras que separam os estados de energia tem altura finita, então, o sistema pode vagar livremente pelos possíveis estados, resultando em $q_{EA} = 0$ na ausência de um campo externo [26]. As equações obtidas pelos autores são válidas somente para $T \rightarrow 0$ e $T \rightarrow T_c$. Os detalhes da solução desse modelo não serão abordados nesta tese.

Ergodicidade

A hipótese ergódica assume que, depois de um tempo suficientemente grande, todos os pontos do espaço de fases são visitados [47]. Logo, a média temporal de um certo observável

$O[\mathbf{s}]$ pode ser substituída pela média sobre o *ensemble* de possíveis estados [48]

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \int_0^t dt' O[\mathbf{s}(t')] \equiv \int ds_1 ds_2 \dots ds_N O[\mathbf{s}] P(s_1, s_2, \dots, s_N), \quad (2.17)$$

onde $\mathbf{s} = \{s_i\}$ constituem o conjunto de variáveis que descrevem o sistema, como, por exemplo, posição, momento e spin.

Considere o ferromagneto de Ising. Abaixo de uma T_c e $h = 0$, os estados que correspondem a uma magnetização macroscópica M e $-M$ estão separados por uma barreira de altura $N^{1/2}$. Através de um argumento de simetria do Hamiltoniano do ferromagneto de Ising, pode-se mostrar que $M = 0$ sempre. No entanto, no limite $N \rightarrow \infty$, singularidades ocorrem na função de partição [49], que coincidem com o aparecimento de uma transição de fase [50]. No limite termodinâmico, as alturas das barreiras que separam os estados tornam-se infinitas, sendo necessário virar um número infinito de spins para que a troca de estados ocorra. Esse exemplo caracteriza uma quebra de ergodicidade, porque é impossível que o sistema escape do estado $+M$ para o $-M$, uma vez que o sistema encontre-se em um desses estados. Essa quebra de ergodicidade está claramente associada a uma quebra de simetria, pois a simetria de inversão global dos sinais dos spins foi quebrada. Os vales na superfície de energia correspondem a configurações bem definidas, ou seja $\pm M$. Quando o sistema evolui, a partir de uma certa configuração inicial, é garantido que ele alcançará um único estado de equilíbrio. Essa forma é conhecida como quebra de ergodicidade trivial.

A situação é bem mais complexa quando o sistema possui frustração e desordem. Nesse caso, à medida que a temperatura é reduzida, as paredes que separam os estados tornam-se infinitas. Porém, a superfície de energia é muito mais complexa. Como discutimos, por efeitos de frustração, muitos estados possuirão a mesma energia. Considere a figura 2.12, quando o sistema encontra-se em $T > T_c$, existe um mínimo de energia bem definido, que corresponde à fase PM. Quando o sistema é resfriado, a superfície de energia torna-se rugosa, com aparecimento de muitos vales pequenos dentro de um vale maior. Finalmente, quando $T < T_c$, a ergodicidade é quebrada, e o sistema fica preso em um desses vales maiores. Contudo, esses vales maiores possuem um número macroscópico de vales menores. Então, uma vez que o sistema fica preso em um desses vales, desencadeia-se uma busca constante pela configuração de menor energia. Isso caracteriza uma quebra de ergodicidade não-trivial. Diferentemente do que ocorre no ferromagneto de Ising, não é evidente se essa quebra não-trivial de ergodicidade está associada a alguma quebra de simetria. Por isso, quando falamos sobre transições de fase para a fase VS, mencionamos essa transição como uma quebra não-trivial de ergodicidade.

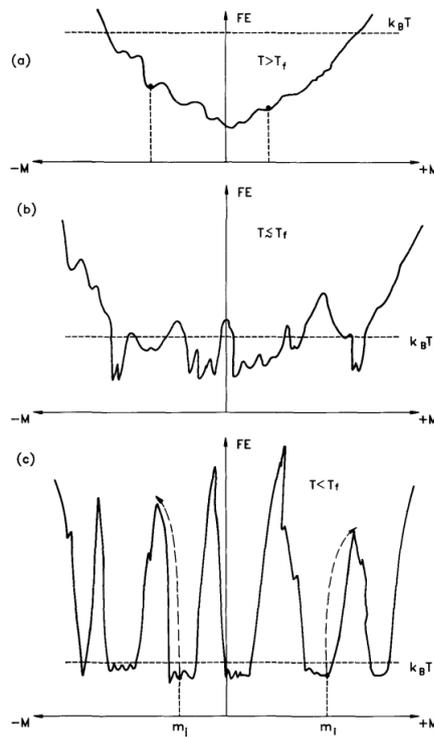


Figura 2.12: Energia livre em função do espaço de configurações evoluindo com a temperatura. Figura retirada de [5].

Modelo de Sherrington-Kirkpatrick

Além dos resultados do modelo de EA serem limitados a $T \rightarrow 0$ e $T \rightarrow T_c$, seus resultados predizem que o calor específico C_H apresenta uma cúspide na T_c que é uma previsão teórica que está em desacordo com resultados experimentais [5]. Em 1975, Sherrington e Kirkpatrick (SK) [51] propuseram um modelo similar ao de EA, porém nesse caso, todos os sítios da rede se conectam entre si. Os spins são substituídos por spins de Ising e as interações são dadas através da distribuição de probabilidade

$$P(J_{ij}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}J'} \exp\left(-\frac{(J_{ij} - J'_0)^2}{2J'^2}\right), \quad (2.18)$$

onde $J'_0 = J_0/N$ e $J' = J/N^{1/2}$, essa escolha preserva a extensividade da energia livre.

Tanto no modelo de EA quanto no modelo SK é necessário calcular a energia livre por partícula

$$f(\beta, J) = - \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{\beta N} \log Z(J) \quad (2.19)$$

para então obter os observáveis termodinâmicos. Um problema da expressão (2.19) é que ela depende de uma certa realização da desordem, ou seja, é resultado de apenas um sorteio sobre $P(J_{ij})$. Porém, isso não é desejável, porque implica obtenção de resultados válidos apenas para uma única realização dos J_{ij} . Uma forma de contornar esse problema é tomar a média de (2.19) sobre os J_{ij} ,

$$f(\beta) = - \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{\beta N} \langle \log(Z) \rangle. \quad (2.20)$$

Isso é possível, pois a energia livre é uma quantidade automediante [52, 53], o que significa que no limite $N \rightarrow \infty$, a variância de (2.19) tende a zero. Então, $f(\beta, J)$ é bem localizada ao redor

de sua média. Para tomar as médias sobre (2.20), utiliza-se o método de réplicas, que consiste em reescrever o logaritmo através da identidade

$$\log(x) = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{x^n - 1}{n}, \quad (2.21)$$

contudo, nos artigos é muito comum encontrar a identidade na seguinte forma

$$\langle \log(x) \rangle = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{n} \log \langle x^n \rangle. \quad (2.22)$$

A partir dessa identidade, podemos reescrever a energia livre na seguinte forma

$$f(\beta) = - \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{\beta N} \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{n} \log \langle Z^n \rangle. \quad (2.23)$$

Para dar continuidade aos cálculos é necessário assumir que $n \in \mathbb{N}$. A partir disso podemos calcular a função de partição como

$$\langle Z^n \rangle = \left\langle \sum_{\sigma_1} \exp(-\beta H(\sigma_1)) \cdots \sum_{\sigma_n} \exp(-\beta H(\sigma_n)) \right\rangle, \quad (2.24)$$

logo temos

$$\langle Z^n \rangle = \left\langle \sum_{\sigma_1 \dots \sigma_n} \exp \left(-\beta \sum_{\alpha=1}^n H(\sigma_\alpha) \right) \right\rangle. \quad (2.25)$$

A função de partição replicada fica

$$\langle Z^n \rangle = \sum_{\sigma_1 \dots \sigma_n} \int \left[\prod_{i < j} P(J_{ij}) dJ_{ij} \right] \exp \left[\beta \sum_{i < j} J_{ij} \sum_{\alpha=1}^n \sigma_{i\alpha} \sigma_{j\alpha} \right]. \quad (2.26)$$

Com a forma da expressão (2.26), é possível tomar a integral sobre os J_{ij} primeiramente, obtendo

$$\begin{aligned} \langle Z^n \rangle &= \exp \left\{ \frac{(\beta J)^2}{2N} \left[\frac{N^2 n}{2} - \frac{N n^2}{2} \right] - \frac{\beta J_0 n}{N} \frac{n}{2} N \right\} \\ &\times \sum_{\sigma_1 \dots \sigma_n} \exp \left\{ \frac{(\beta J)^2}{2N} \sum_{\alpha < \beta} \left(\sum_{i=1}^N \sigma_{i\alpha} \sigma_{i\beta} \right)^2 + \frac{\beta J_0}{2N} \sum_{\alpha=1}^n \left(\sum_{i=1}^N \sigma_{i\alpha} \right)^2 \right\}, \end{aligned} \quad (2.27)$$

Utilizando a identidade de Hubbard-Stratonovich [54, 55]

$$\exp(\lambda a^2) = \left(\frac{N}{2\pi} \right)^{1/2} \int dx \exp \left[-\frac{1}{2} N x^2 + (2\lambda)^{1/2} a N^{1/2} x \right] \quad (2.28)$$

e, fazendo as trocas de variáveis

$$q_{\alpha\beta} = \beta J q_{\alpha\beta} \quad \alpha \neq \beta \quad (2.29)$$

e

$$m_\alpha = (\beta J_0)^{1/2} m_\alpha, \quad (2.30)$$

temos

$$\begin{aligned}
 f(\beta) = & - \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{\beta N} \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{n} \log \left[\exp \left\{ \frac{(\beta J)^2}{2N} \left[\frac{N^2 n}{2} - \frac{N n^2}{2} \right] - \frac{\beta J_0 n}{N} \right\} \right. \\
 & \times \int \left[\prod_{\alpha < \beta} \left(\frac{N}{2\pi} \right)^{1/2} \beta J d q_{\alpha\beta} \right] \left[\prod_{\alpha} \left(\frac{\beta J_0 N}{2\pi} \right)^{1/2} d m_{\alpha} \right] \\
 & \times \exp \left\{ - \frac{1}{2} N (\beta J)^2 \sum_{\alpha < \beta} q_{\alpha\beta}^2 - \frac{1}{2} N \beta J_0 \sum_{\alpha} m_{\alpha}^2 \right\} \\
 & \left. \times \exp \left\{ N \log \sum_{\sigma} \exp \left[(\beta J)^2 \sum_{\alpha < \beta} q_{\alpha\beta} \sigma_{\alpha} \sigma_{\beta} + \beta J_0 \sum_{\alpha} m_{\alpha} \sigma_{\alpha} \right] \right\} \right], \quad (2.31)
 \end{aligned}$$

Invertendo a ordem dos limites e desprezando termos $\mathcal{O}(1)$, podemos calcular a integral pelo método do ponto de sela,

$$\begin{aligned}
 \beta f = & - \frac{(\beta J)^2}{4} + \lim_{n \rightarrow 0} \text{Extr}_{\{\mathbf{q}, \mathbf{m}\}} \left\{ \frac{1}{2n} (\beta J)^2 \sum_{\alpha < \beta} q_{\alpha\beta}^2 + \frac{1}{2n} \beta J_0 \sum_{\alpha} m_{\alpha}^2 \right. \\
 & \left. - \frac{1}{n} \log \sum_{\sigma} \exp \left[H_{eff}(m_{\alpha}, q_{\alpha\beta}) \right] \right\}, \quad (2.32)
 \end{aligned}$$

definindo

$$H_{eff}(m_{\alpha}, q_{\alpha\beta}) = (\beta J)^2 \sum_{\alpha < \beta} q_{\alpha\beta} \sigma_{\alpha} \sigma_{\beta} + \beta J_0 \sum_{\alpha} m_{\alpha} \sigma_{\alpha}. \quad (2.33)$$

Note que agora f é uma função de m_{α} , $q_{\alpha\beta}$ e β . A operação $\text{Extr}_{\{\mathbf{q}, \mathbf{m}\}}$, corresponde a tomar o extremo da expressão entre chaves com relação aos parâmetros de ordem \mathbf{m} e \mathbf{q} . Esses parâmetros de ordem são determinados através das equações de ponto de sela $\frac{\partial f}{\partial q_{\alpha\beta}} = \frac{\partial f}{\partial m_{\alpha}} = 0$.

Obtemos respectivamente

$$q_{\alpha\beta} = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{\sum_{\sigma} \sigma_{\alpha} \sigma_{\beta} \exp \left[H_{eff}(m_{\alpha}, q_{\alpha\beta}) \right]}{\sum_{\sigma} \exp \left[H_{eff}(m_{\alpha}, q_{\alpha\beta}) \right]} \quad (2.34)$$

$$m_{\alpha} = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{\sum_{\sigma} \sigma_{\alpha} \exp \left[H_{eff}(m_{\alpha}, q_{\alpha\beta}) \right]}{\sum_{\sigma} \exp \left[H_{eff}(m_{\alpha}, q_{\alpha\beta}) \right]} \quad (2.35)$$

A equação (2.34) consiste na versão ergódica do parâmetro de ordem de EA (2.16). Para prosseguir, é necessário fazer alguma simplificação sobre $q_{\alpha\beta}$. SK assumem que as réplicas são indistinguíveis, ou seja

$$m_{\alpha} = m \quad (2.36)$$

e

$$q_{\alpha\beta} = q. \quad (2.37)$$

Essa solução tentativa é conhecida como *Ansatz* de simetria de réplicas (SR). Então, é possível demonstrar que a energia livre assume a forma

$$\begin{aligned}
 \beta f(\beta) = & - \frac{(\beta J)^2}{4} \left(1 - q \right)^2 + \frac{1}{2} \beta J_0 m^2 \\
 & - (2\pi)^{-1/2} \int dz e^{-\frac{1}{2} z^2} \log 2 \cosh \left[\beta J q^{1/2} z + \beta J_0 m \right]. \quad (2.38)
 \end{aligned}$$

Os parâmetros de ordem ficam

$$m = (2\pi)^{-1/2} \int dz e^{-\frac{1}{2}z^2} \tanh [\beta J q^{1/2} z + \beta J_0 m] \quad (2.39)$$

e

$$q = (2\pi)^{-1/2} \int dz e^{-\frac{1}{2}z^2} \tanh^2 [\beta J q^{1/2} z + \beta J_0 m]. \quad (2.40)$$

Linha de Almeida-Thouless

A solução do modelo de SK possui um problema. Se calcularmos a entropia na temperatura zero obtemos $s(T=0) = -\frac{1}{2\pi}$. Em sistemas discretos, a entropia é o logaritmo do número de configurações, ou seja deve ser positiva [52]. Logo, o resultado obtido para entropia do modelo de SK está incorreto. Os autores acreditavam que a fonte do problema fosse devido à troca da ordem dos limites. No entanto, uma análise da estabilidade da solução, realizada por Almeida e Thouless (AT) [6], mostra que solução de simetria de réplicas $q_{\alpha\beta} = q$ é instável. AT examinam se as equações (2.36), (2.37), (2.39), (2.40) de fato conferem um extremo a equação (2.32). Para tanto, AT consideram perturbações dos parâmetros de ordem em torno dessa solução

$$x_\alpha = m + \epsilon_\alpha \quad (2.41)$$

e

$$y_{\alpha\beta} = q + \eta_{\alpha\beta}, \quad (2.42)$$

onde m e q são dados pelas equações (2.39) e (2.40) respectivamente. Então, expandindo a energia livre (2.32) até segunda ordem em ϵ_α e $\eta_{\alpha\beta}$, obtém-se a matriz Hessiana. Analisando os possíveis autovalores dessa matriz, pode-se demonstrar que um deles está relacionado a susceptibilidade magnética não linear $\chi_{VS} \propto 1/\lambda_{AT}$. Esse autovalor é conhecido como *replicon* [56, 57]

$$\lambda_{AT} = 1 - (\beta J)^2 (2\pi)^{-1/2} \int dz e^{-\frac{1}{2}z^2} \operatorname{sech}^4 [\beta J q^{1/2} z + \beta J_0 m]. \quad (2.43)$$

O *replicon* $\lambda_{AT} > 0$ para $\beta^{-1} > J$, ou seja, em toda fase PM, porém, em toda fase VS, $\lambda_{AT} < 0$. Isso compromete a solução de simetria de réplicas porque se $\lambda_{AT} < 0 \rightarrow \chi_{VS} < 0$ o que é fisicamente infactível. Repetindo o mesmo procedimento, porém trocando $J_0 m$ por H , obtém-se, então, a fronteira de estabilidade da solução de SR no modelo SK, quando um campo externo é aplicado, como representado na figura 2.13. Na literatura essa fronteira de estabilidade é denominada de linha de Almeida-Thouless.

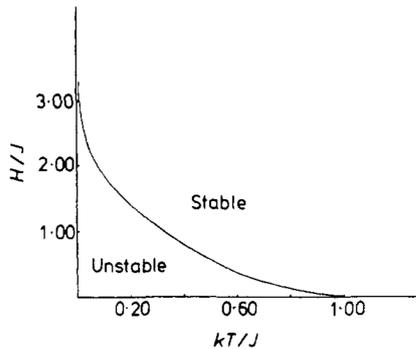


Figura 2.13: Diagrama de fases no plano H/J contra T/J representando a linha de Almeida-Thouless. Figura retirada de [6].

Esses resultados indicam que a solução de simetria de réplicas não é adequada e, logo é necessário assumir que $q_{\alpha\beta} \neq q$. No entanto, não é uma tarefa trivial escolher uma parametrização correta para $q_{\alpha\beta}$. A solução do problema foi realizada por Giorgio Parisi e é conhecida como quebra de simetria de réplicas [58, 59, 60]. Essa série de publicações posteriormente deram origem ao livro "Spin Glass Theory and Beyond" [52]. Outros métodos que não fazem uso de réplicas também foram desenvolvidos, como por exemplo, as equações de Thouless, Anderson e Palmer (TAP) [61] e o método da cavidade [52, 62]. De fato, talvez a maior contribuição de toda a teoria desenvolvida para estudar o fenômeno de VS seja o vasto número de ferramentas teóricas que podem ser utilizadas em outras áreas. Listamos alguns exemplos: criptografia [63, 64], correção e detecção de erros em códigos [65, 66], problemas de otimização [67, 68], sistemas de spins em redes com conectividade finita [62, 69, 70, 71] e redes neurais [72, 73, 74, 75, 76, 77, 78].

2.2.6 Modelo de Campo Aleatório

O campo aleatório (CA) é um tipo de desordem que não dá origem a uma fase VS. O primeiro modelo foi proposto por Imry e Ma [79]. O campo aleatório é um resultado emergente da diluição de sítios magnéticos com interações antiferromagnéticas na presença de um campo externo uniforme. A realização experimental mais estudada do campo aleatório é antiferromagneto diluído $\text{Fe}_x\text{Zn}_{1-x}\text{F}_2$. Mesmo submetido à diluição, a anisotropia dos spins neste composto permanece. O Hamiltoniano que melhor caracteriza os experimentos de campo aleatório com spins de Ising é

$$H(\boldsymbol{\sigma}) = - \sum_{(i,j)} J_{ij} \epsilon_i \epsilon_j \sigma_i \sigma_j - \sum_i H \epsilon_i \sigma_i. \quad (2.44)$$

As variáveis ϵ_i representam diluição de sítio, assumindo valor 1 se o sítio está presente e 0 caso não haja sítio um que possui diluição nos sítios. Cardy [80], mapeia o problema do Hamiltoniano (2.44) em um ferromagneto uniforme com campo aleatório, mostrando que a magnetização *staggered* se acopla linearmente a um campo efetivo h_i . A variância desse campo para $H \ll J$ é dada por

$$\langle h_{RF}^2 \rangle = \frac{x(1-x)[T_N/T]^2 (H/k_B T)^2}{[1 + \Theta_{CW}(x)/T]^2}, \quad (2.45)$$

onde $x = \langle \epsilon_i \rangle$ é a concentração de íons magnéticos. O antiferromagneto $\text{Fe}_x\text{Zn}_{1-x}\text{F}_2$, para concentrações de $x = 0,25$, exibe um comportamento de VS [81, 82, 83, 84], mesmo na ausência de interações ferro competindo com antiferromagneto. Já para $x \geq 0,40$ o composto descreve bem um campo aleatório com anisotropia tipo Ising. No intervalo intermediário de concentração é possível a coexistência entre as fases VS e campo aleatório. Em estudos conduzidos no material $\text{Fe}_{0,31}\text{Zn}_{0,69}\text{F}_2$ na presença de um campo magnético externo [7, 85, 86], pode-se observar um diagrama de fases similar à linha AT para concentrações no intervalo $0,24 \leq x \leq 0,31$ com $\phi = 3,4$ fazendo um ajuste da forma $T_N - T(H) \sim H^{2/\phi}$. Para valores de concentração $0,37 \leq x \leq 0,40$ e campo H fraco, observa-se um comportamento bem descrito pelo ajuste com $\phi = 1,42$.

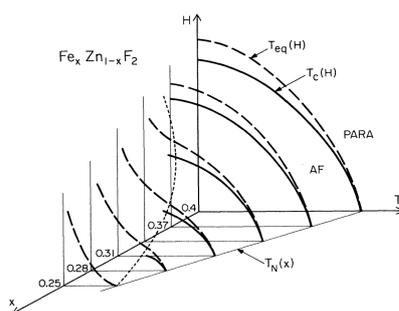


Figura 2.14: Mudança de curvatura do diagrama no plano H contra T no antiferromagneto $\text{Fe}_{0.31}\text{Zn}_{0.69}\text{F}_2$. Figura retirada de [7]

Capítulo 3

Modelo de van Hemmen

Neste capítulo, estudamos o modelo de van Hemmen [87, 88] no grafo aleatório. Duas formas de desordem estão presentes, acoplamentos e campos aleatórios. O método de réplicas é utilizado para lidar com as realizações do grafo. Além disso, trabalhamos com os estados de spin $\sigma_i = \{-1, 0, 1\}$, tendo ocupação controlada pelo campo cristalino D , como no modelo de Blume-Capel (BC) [89, 90], que tem sua versão desordenada, conhecido como modelo de Ghatak-Sherrington (GS) [91]. Existe uma dificuldade técnica quando ambos tipos de desordem estão presentes. Um exemplo ocorre no modelo de GS com campo aleatório [92][93][94][95], porque o campo se acopla com a magnetização local, impedindo assim que o parâmetro de ordem de VS seja zero e impossibilitando a localização das linhas de transição de fase. Uma forma de contornar essa dificuldade é utilizar o modelo de van Hemmen, porque seu parâmetro de ordem é proporcional à magnetização. Como médias de funções ímpares sobre distribuições de probabilidade simétricas são nulas, logo o campo aleatório não gera magnetizações espúrias.

3.1 Formalismo com Réplicas

Estudamos um sistema com $N \rightarrow \infty$ spins que assumem valores $\sigma_i = \{-1, 0, 1\}$, onde $i = 1 \dots N$. O Hamiltoniano é dado por

$$H(\boldsymbol{\sigma}) = -\frac{1}{c} \sum_{i < j} c_{ij} J_{ij} \sigma_i \sigma_j + D \sum_i \sigma_i^2 + \sum_i h_i \sigma_i. \quad (3.1)$$

As variáveis c_{ij} determinam se dois sítios i e j estão conectados ($c_{ij} = 1$) ou não ($c_{ij} = 0$), escolhidas de acordo com a distribuição de probabilidade

$$p(c_{ij}) = \frac{c}{N} \delta_{c_{ij},1} + \left(1 - \frac{c}{N}\right) \delta_{c_{ij},0}, \quad (3.2)$$

onde a conectividade média c é uma constante finita. O acoplamento J_{ij} é dado por

$$J_{ij} = J(\xi_i \eta_j + \xi_j \eta_i). \quad (3.3)$$

Os campos locais h_i são variáveis aleatórias independentes e identicamente distribuídas (i.i.d), que assumem os valores $+h_0$ e $-h_0$ de forma equiprovável, e D corresponde ao campo cristalino. As variáveis ξ_i e η_i são variáveis aleatórias (i.i.d), cada uma podendo assumir os valores $+1$ ou -1 com a mesma probabilidade. O acoplamento (3.3) foi proposto por van Hemmen. No modelo

original, com $c \rightarrow \infty$, é possível resolver a média sobre ξ_i e η_i sem fazer uso do truque de réplicas. Para obter as propriedades desse sistema no limite termodinâmico $N \rightarrow \infty$, calculamos a energia livre por partícula através da equação (2.23). Aqui se faz necessário o uso da identidade de réplicas para tomar a média sobre $\sum_{\mathbf{C}} \prod_{i < j} p(c_{ij}) f(\beta, c_{ij}, J_{ij}, h_i)$. Inicialmente, calculamos as médias sobre a função de partição replicada (2.25). O Hamiltoniano replicado desse modelo fica

$$H(\boldsymbol{\sigma}_\alpha) = -\frac{1}{2c} \sum_{i \neq j} c_{ij} J_{ij} \sigma_{i\alpha} \sigma_{j\alpha} + \sum_i h_i \sigma_{i\alpha} + D \sum_i \sigma_{i\alpha}^2 \quad (3.4)$$

e a função de partição replicada

$$\langle Z^n \rangle = \left\langle \sum_{\boldsymbol{\sigma}_1 \dots \boldsymbol{\sigma}_n} \exp \left\{ -\beta \sum_i \sum_{\alpha=1}^n h_i \sigma_{i\alpha} - \beta D \sum_i \sum_{\alpha=1}^n \sigma_{i\alpha}^2 + \frac{\beta}{c} \sum_{i < j} c_{ij} J_{ij} \sum_{\alpha=1}^n \sigma_{i\alpha} \sigma_{j\alpha} \right\} \right\rangle_{\{\xi_i\}\{\eta_i\}\{c_{ij}\}\{h_i\}}, \quad (3.5)$$

onde o vetor de réplicas possui as seguintes componentes $\boldsymbol{\sigma}_\alpha = \{\sigma_{1\alpha}, \dots, \sigma_{N\alpha}\}$. Começamos tomando a média sobre as realizações de grafo

$$\langle Z^n \rangle = \sum_{\boldsymbol{\sigma}_1 \dots \boldsymbol{\sigma}_n} \left\langle e^{-\beta \sum_i \sum_{\alpha=1}^n h_i \sigma_{i\alpha} - \beta D \sum_i \sum_{\alpha=1}^n \sigma_{i\alpha}^2} \right\rangle_{\{h_i\}} \times \left\langle \prod_{i < j} \left[1 + \frac{c}{N} \left(e^{\frac{\beta J}{c} (\xi_i \eta_j + \xi_j \eta_i)} \sum_{\alpha=1}^n \sigma_{i\alpha} \sigma_{j\alpha} - 1 \right) \right] \right\rangle_{\{\xi_i\}\{\eta_i\}}. \quad (3.6)$$

Como $c \ll N$, podemos utilizar a expansão em série de potência da exponencial e reescrever a função de partição replicada como

$$\langle Z^n \rangle = \sum_{\boldsymbol{\sigma}_1 \dots \boldsymbol{\sigma}_n} \left\langle e^{-\beta \sum_i \sum_{\alpha=1}^n h_i \sigma_{i\alpha} - \beta D \sum_i \sum_{\alpha=1}^n \sigma_{i\alpha}^2} \right\rangle_{\{h_i\}} \times \exp \left[\frac{c}{2N} \sum_{i \neq j} \left\langle \left[e^{\frac{\beta J}{c} (\xi_i \eta_j + \xi_j \eta_i)} \sum_{\alpha} \sigma_{i\alpha} \sigma_{j\alpha} - 1 \right] \right\rangle_{\{\xi_i\}\{\eta_i\}} \right]. \quad (3.7)$$

Considere o termo

$$\exp \left[\frac{c}{2N} \sum_{i \neq j} \left\langle \left[e^{\frac{\beta J}{c} (\xi_i \eta_j + \xi_j \eta_i)} \sum_{\alpha} \sigma_{i\alpha} \sigma_{j\alpha} - 1 \right] \right\rangle_{\{\xi_i\}\{\eta_i\}} \right]. \quad (3.8)$$

No caso em que $c = \infty$, a exponencial interna não existe e termos da forma $(\sum_i \sigma_i)^2$, $(\sum_i \xi_i \sigma_i)^2$, $(\sum_i \eta_i \sigma_i)^2$ e $(\sum_i (\xi_i + \eta_i) \sigma_i)^2$ [96, 97] aparecem na exponencial externa. Utilizando a identidade de Hubbard-Stratonovich, os termos quadráticos são removidos e o problema é resolvido pelo método do ponto de sela. Os parâmetros de ordem, que são a magnetização e o parâmetro de ordem de van Hemmen, são obtidos diretamente pelas equações de ponto de sela. Na solução do modelo de Viana e Bray [70], um dos primeiros com conectividade finita, a exponencial interna da equação (3.8) é expandida resultando em uma expressão da forma

$$e^{\frac{\beta J_{ij}}{c} \sum_{\alpha} \sigma_{i\alpha} \sigma_{j\alpha}} \propto a_1 \sum_{\alpha} \sigma_{i\alpha} \sigma_{j\alpha} + a_2 \sum_{\alpha < \beta} \sigma_{i\alpha} \sigma_{i\beta} \sigma_{j\alpha} \sigma_{j\beta} + a_3 \sum_{\alpha < \beta < \gamma} \sigma_{i\alpha} \sigma_{i\beta} \sigma_{i\gamma} \sigma_{j\alpha} \sigma_{j\beta} \sigma_{j\gamma} + \dots \quad (3.9)$$

Após a redução para o problema de um sítio, a solução envolve resolver uma integral sobre infinitos parâmetros de ordem $\{q_\alpha, q_{\alpha\beta}, q_{\alpha\beta\gamma}, \dots\}$. Na solução de Monasson e Zecchina [67, 98], a exponencial interna não é expandida. Ao invés disso, o procedimento para solução envolve a introdução de funções de ordem

$$P(\boldsymbol{\sigma}) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \delta_{\boldsymbol{\sigma}\sigma_i}. \quad (3.10)$$

Dessa forma, a resolução torna-se muito mais simples. Na realidade, essa função define a probabilidade de ocupação de um certo estado de réplica $\boldsymbol{\sigma}$. Os parâmetros de ordem, que são associados a observáveis macroscópicos e quebras de simetria, são obtidos a partir de $P(\boldsymbol{\sigma})$. Como por exemplo, a magnetização $m = \sum_{\boldsymbol{\sigma}} \sigma P(\boldsymbol{\sigma})$.

Prosseguindo com a resolução do modelo de van Hemmen no grafo aleatório, removemos as variáveis $\sigma_{i\alpha}$ da exponencial interna, fazendo uso da identidade [72, 74]

$$\sum_{\boldsymbol{\sigma}} \left[\prod_{\alpha=1}^n \delta_{\sigma_\alpha, \sigma_{i\alpha}} \right] = \sum_{\boldsymbol{\sigma}} \delta_{\boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\sigma}_i} = 1, \quad (3.11)$$

onde $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_1, \dots, \sigma_n)$ é um vetor de spin no espaço de n réplicas e $\boldsymbol{\sigma}_i$ equivale a alguma configuração nesse espaço para o i -ésimo spin. Assim, temos

$$\begin{aligned} \langle Z^n \rangle = \left\langle \sum_{\boldsymbol{\sigma}_1 \dots \boldsymbol{\sigma}_n} \exp \left\{ -\beta \sum_{i,\alpha} h_i \sigma_{i\alpha} - \beta D \sum_{i,\alpha} \sigma_{i\alpha}^2 \right. \right. \\ \left. \left. + \frac{c}{2N} \sum_{i \neq j} \sum_{\boldsymbol{\sigma}\boldsymbol{\sigma}'} \left[e^{\frac{\beta J}{c} (\xi_i \eta_j + \xi_j \eta_i) \sum_{\alpha} \sigma_{\alpha} \sigma'_{\alpha}} - 1 \right] \delta_{\boldsymbol{\sigma}\boldsymbol{\sigma}_i} \delta_{\boldsymbol{\sigma}'\boldsymbol{\sigma}_j} \right\} \right\rangle_{\{\xi_i\}\{\eta_i\}\{h_i\}}. \end{aligned} \quad (3.12)$$

Nesse ponto, fazemos uso do conceito de sub-redes [99, 72] para então tomarmos a média sobre a aleatoriedade de ξ_i e η_i . A sub-rede é definida como

$$I_{\xi\eta} = \{i | \xi_i = \xi, \eta_i = \eta\}. \quad (3.13)$$

Através desse conceito, é possível particionar os sítios do sistema nas possíveis sub-redes. Utilizando $|I_{\xi\eta}|$ como o número de sítios na sub-rede $I_{\xi\eta}$ e definindo $p_{\xi\eta} = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{|I_{\xi\eta}|}{N}$, reescrevemos a função de partição na forma

$$\begin{aligned} \langle Z^n \rangle = \left\langle \sum_{\boldsymbol{\sigma}_1 \dots \boldsymbol{\sigma}_n} \exp \left\{ -\beta \sum_{i,\alpha} h_i \sigma_{i\alpha} - \beta D \sum_{i,\alpha} \sigma_{i\alpha}^2 + \frac{cN}{2} \sum_{\boldsymbol{\sigma}\boldsymbol{\sigma}'} \sum_{\xi\eta, \xi'\eta'} \sum_{i \in I_{\xi\eta}} \sum_{j \in I_{\xi'\eta'}} \right. \right. \\ \left. \left. \times \left[e^{\frac{\beta J}{c} (\xi\eta' + \xi'\eta) \sum_{\alpha} \sigma_{\alpha} \sigma'_{\alpha}} - 1 \right] \frac{|I_{\xi\eta}|}{N} \frac{1}{|I_{\xi\eta}|} \delta_{\boldsymbol{\sigma}\boldsymbol{\sigma}_i} \frac{|I_{\xi'\eta'}|}{N} \frac{1}{|I_{\xi'\eta'}|} \delta_{\boldsymbol{\sigma}'\boldsymbol{\sigma}_j} \right\} \right\rangle_{\{h_i\}}. \end{aligned} \quad (3.14)$$

No estado atual, resta a tarefa de tomar o traço sobre as variáveis $\boldsymbol{\sigma}_i = \{\sigma_{i1} \dots \sigma_{i\alpha}\}$. Para tanto, inserimos as funções de ordem $P_{\xi\eta}(\boldsymbol{\sigma})$ através da identidade

$$1 = \int \prod_{\xi\eta, \boldsymbol{\sigma}} dP_{\xi\eta}(\boldsymbol{\sigma}) \delta \left[P_{\xi\eta}(\boldsymbol{\sigma}) - \frac{1}{|I_{\xi\eta}|} \sum_{i \in I_{\xi\eta}} \delta_{\boldsymbol{\sigma}\boldsymbol{\sigma}_i} \right], \quad (3.15)$$

que ao fazer uso da forma integral da delta de Dirac fica

$$1 = \int \prod_{\xi\eta, \boldsymbol{\sigma}} d\hat{P}_{\xi\eta}(\boldsymbol{\sigma}) dP_{\xi\eta}(\boldsymbol{\sigma}) \exp \left\{ i \hat{P}_{\xi\eta}(\boldsymbol{\sigma}) \left[P_{\xi\eta}(\boldsymbol{\sigma}) - \frac{1}{|I_{\xi\eta}|} \sum_{i \in I_{\xi\eta}} \delta_{\boldsymbol{\sigma}\boldsymbol{\sigma}_i} \right] \right\}. \quad (3.16)$$

Substituindo na Eq. (3.14),

$$\begin{aligned} \langle Z^n \rangle = & \left\langle \sum_{\sigma_1 \dots \sigma_n} \int \prod_{\xi\eta, \sigma} \left[d\hat{P}_{\xi\eta}(\sigma) dP_{\xi\eta}(\sigma) \right] \exp \left\{ i \sum_{\xi\eta, \sigma} \hat{P}_{\xi\eta}(\sigma) P_{\xi\eta}(\sigma) \right. \right. \\ & - \sum_{\xi\eta, \sigma} \frac{i}{|I_{\xi\eta}|} \hat{P}_{\xi\eta}(\sigma) \sum_{i \in I_{\xi\eta}} \delta_{\sigma\sigma_i} - \beta \sum_{i, \alpha} h_i \sigma_{i\alpha} - \beta D \sum_{i, \alpha} \sigma_{i\alpha}^2 \\ & \left. \left. + \frac{cN}{2} \sum_{\sigma\sigma'} \sum_{\xi\eta, \xi'\eta'} p_{\xi\eta} p_{\xi'\eta'} \left[e^{\frac{\beta J}{c}(\xi\eta' + \xi'\eta) \sum_{\alpha} \sigma_{\alpha} \sigma'_{\alpha}} - 1 \right] P_{\xi\eta}(\sigma) P_{\xi'\eta'}(\sigma') \right\} \right\rangle_{\{h_i\}}. \end{aligned} \quad (3.17)$$

Tomando o traço sobre os termos que possuem variáveis $\sigma_{i\alpha}$ temos

$$\begin{aligned} \mathbf{T} = & \left\langle \sum_{\sigma_1 \dots \sigma_n} \exp \left\{ - \sum_{\xi\eta} \frac{i}{|I_{\xi\eta}|} \sum_{i \in I_{\xi\eta}} \hat{P}_{\xi\eta}(\sigma_i) \right. \right. \\ & \left. \left. - \beta \sum_{\xi\eta} \sum_{i \in I_{\xi\eta, \alpha}} h_i \sigma_{i\alpha} - \beta D \sum_{\xi\eta} \sum_{i \in I_{\xi\eta, \alpha}} \sigma_{i\alpha}^2 \right\} \right\rangle_{\{h_i\}}. \end{aligned} \quad (3.18)$$

Reorganizando os fatores,

$$\mathbf{T} = \prod_{\xi\eta} \prod_{i \in I_{\xi\eta}} \left\langle \sum_{\sigma_i} \exp \left\{ - \frac{i}{|I_{\xi\eta}|} \hat{P}_{\xi\eta}(\sigma_i) - \beta \sum_{\alpha} h_i \sigma_{i\alpha} - \beta D \sum_{\alpha} \sigma_{i\alpha}^2 \right\} \right\rangle_{h_i}. \quad (3.19)$$

Agora os sítios estão desacoplados. Reescrevendo essa equação da seguinte forma

$$\mathbf{T} = \exp \left\{ \sum_{\xi\eta} |I_{\xi\eta}| \log \left\langle \sum_{\sigma} \exp \left(- \frac{i}{|I_{\xi\eta}|} \hat{P}_{\xi\eta}(\sigma) - \beta h \sum_{\alpha} \sigma_{\alpha} - \beta D \sum_{\alpha} \sigma_{\alpha}^2 \right) \right\rangle_h \right\}. \quad (3.20)$$

Já que $\xi = \pm 1$ e $\eta = \pm 1$, existem apenas quatro sub-redes. Fazendo a seguinte mudança de variáveis $\hat{P}_{\xi\eta}(\sigma) \rightarrow |I_{\xi\eta}| \hat{P}_{\xi\eta}(\sigma)$, reescrevemos a função de partição replicada como

$$\begin{aligned} \langle Z^n \rangle = & \int \left[\prod_{\xi\eta, \sigma} |I_{\xi\eta}| d\hat{P}_{\xi\eta}(\sigma) dP_{\xi\eta}(\sigma) \right] \exp \left\{ iN \sum_{\xi\eta, \sigma} p_{\xi\eta} \hat{P}_{\xi\eta}(\sigma) P_{\xi\eta}(\sigma) \right. \\ & + \frac{Nc}{2} \sum_{\xi\eta, \xi'\eta'} p_{\xi\eta} p_{\xi'\eta'} \sum_{\sigma\sigma'} P_{\xi\eta}(\sigma) P_{\xi'\eta'}(\sigma') \left[e^{\frac{\beta J}{c}(\xi\eta' + \xi'\eta) \sum_{\alpha} \sigma_{\alpha} \sigma'_{\alpha}} - 1 \right] \\ & \left. + N \sum_{\xi\eta} p_{\xi\eta} \log \left\langle \sum_{\sigma} \exp \left(- i \hat{P}_{\xi\eta}(\sigma) - \beta h \sum_{\alpha} \sigma_{\alpha} - \beta D \sum_{\alpha} \sigma_{\alpha}^2 \right) \right\rangle_h \right\}. \end{aligned} \quad (3.21)$$

Inserindo a equação (3.22) na (2.23), obtemos uma expressão para energia livre na forma

$$\begin{aligned} f(\beta) = & - \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{\beta N} \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{n} \log \int \prod_{\xi\eta, \sigma} |I_{\xi\eta}| d\hat{P}_{\xi\eta}(\sigma) dP_{\xi\eta}(\sigma) \\ & \times \exp \left\{ N \Psi \left(\hat{P}_{\xi\eta}(\sigma), P_{\xi\eta}(\sigma) \right) \right\}. \end{aligned} \quad (3.22)$$

Invertendo os limites, podemos calcular essa integral pelo método de ponto de sela, pois, no limite termodinâmico, a integral será dominada pelo extremo da função complexa

$$\begin{aligned} \Psi \left(\hat{P}_{\xi\eta}(\sigma), P_{\xi\eta}(\sigma) \right) = & i \sum_{\sigma} \left\langle \hat{P}_{\xi\eta}(\sigma) P_{\xi\eta}(\sigma) \right\rangle_{\xi\eta} \\ & + \frac{c}{2} \sum_{\sigma\sigma'} \left\langle P_{\xi\eta}(\sigma) P_{\xi'\eta'}(\sigma') \left[e^{\frac{\beta J}{c}(\xi\eta' + \xi'\eta) \sum_{\alpha} \sigma_{\alpha} \sigma'_{\alpha}} - 1 \right] \right\rangle_{\xi\eta, \xi'\eta'} \\ & + \left\langle \log \left\langle \sum_{\sigma} \exp \left(- i \hat{P}_{\xi\eta}(\sigma) - \beta h \sum_{\alpha} \sigma_{\alpha} - \beta D \sum_{\alpha} \sigma_{\alpha}^2 \right) \right\rangle_h \right\rangle_{\xi\eta} \end{aligned} \quad (3.23)$$

A energia livre resultante fica

$$\begin{aligned}
 f = & -\lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{\beta n} \text{Extr}_{\{\hat{P}_{\xi\eta}(\boldsymbol{\sigma}), P_{\xi\eta}(\boldsymbol{\sigma})\}} \left\{ i \sum_{\boldsymbol{\sigma}} \left\langle \hat{P}_{\xi\eta}(\boldsymbol{\sigma}) P_{\xi\eta}(\boldsymbol{\sigma}) \right\rangle_{\xi\eta} \right. \\
 & + \frac{c}{2} \sum_{\boldsymbol{\sigma}\boldsymbol{\sigma}'} \left\langle P_{\xi\eta}(\boldsymbol{\sigma}) P_{\xi'\eta'}(\boldsymbol{\sigma}') \left[e^{\frac{\beta J}{c}(\xi\eta' + \xi'\eta) \sum_{\alpha} \sigma_{\alpha} \sigma'_{\alpha}} - 1 \right] \right\rangle_{\xi\eta, \xi'\eta'} \\
 & \left. + \left\langle \log \left\langle \sum_{\boldsymbol{\sigma}} \exp \left(-i \hat{P}_{\xi\eta}(\boldsymbol{\sigma}) - \beta h \sum_{\alpha} \sigma_{\alpha} - \beta D \sum_{\alpha} \sigma_{\alpha}^2 \right) \right\rangle_h \right\rangle_{\xi\eta} \right\}. \quad (3.24)
 \end{aligned}$$

A operação $\text{Extr}_{\{\hat{P}_{\xi\eta}(\boldsymbol{\sigma}), P_{\xi\eta}(\boldsymbol{\sigma})\}}$ significa tomar o extremo da função entre chaves com relação as funções $\{\hat{P}_{\xi\eta}(\boldsymbol{\sigma}), P_{\xi\eta}(\boldsymbol{\sigma})\}$. Para cumprir a condição de extremo, a função $\Psi(\hat{P}_{\xi\eta}(\boldsymbol{\sigma}), P_{\xi\eta}(\boldsymbol{\sigma}))$ deve satisfazer as equações de ponto de sela

$$\frac{\partial \Psi}{\partial \hat{P}_{\xi\eta}(\boldsymbol{\sigma})} = 0 \quad (3.25)$$

e

$$\frac{\partial \Psi}{\partial P_{\xi\eta}(\boldsymbol{\sigma})} = 0 \quad (3.26)$$

para todos $\xi\eta, \boldsymbol{\sigma}$. Então, temos

$$i \hat{P}_{\xi\eta}(\boldsymbol{\sigma}) + c \sum_{\boldsymbol{\sigma}'} \left\langle P_{\xi'\eta'}(\boldsymbol{\sigma}') \left[e^{\frac{\beta J}{c}(\xi\eta' + \xi'\eta) \sum_{\alpha} \sigma_{\alpha} \sigma'_{\alpha}} - 1 \right] \right\rangle_{\xi'\eta'} = 0 \quad (3.27)$$

e

$$i P_{\xi\eta}(\boldsymbol{\sigma}) - i \frac{\left\langle \exp \left(-i \hat{P}_{\xi\eta}(\boldsymbol{\sigma}) - \beta h \sum_{\alpha} \sigma_{\alpha} - \beta D \sum_{\alpha} \sigma_{\alpha}^2 \right) \right\rangle_h}{\left\langle \sum_{\boldsymbol{\sigma}'} \exp \left(-i \hat{P}_{\xi\eta}(\boldsymbol{\sigma}') - \beta h \sum_{\alpha} \sigma'_{\alpha} - \beta D \sum_{\alpha} (\sigma'_{\alpha})^2 \right) \right\rangle_h} = 0. \quad (3.28)$$

Com essas equações podemos eliminar as variáveis auxiliares $\hat{P}_{\xi\eta}(\boldsymbol{\sigma}')$, obtendo

$$\begin{aligned}
 P_{\xi\eta}(\boldsymbol{\sigma}) = & \\
 & \frac{\left\langle e^{c \sum_{\boldsymbol{\sigma}'} \left\langle P_{\xi'\eta'}(\boldsymbol{\sigma}') \left[e^{\frac{\beta J}{c}(\xi\eta' + \xi'\eta) \sum_{\alpha} \sigma_{\alpha} \sigma'_{\alpha}} - 1 \right] \right\rangle_{\xi'\eta'} - \beta h \sum_{\alpha} \sigma_{\alpha} - \beta D \sum_{\alpha} \sigma_{\alpha}^2} \right\rangle_h}{\left\langle \sum_{\boldsymbol{\sigma}'} e^{c \sum_{\boldsymbol{\sigma}''} \left\langle P_{\xi''\eta''}(\boldsymbol{\sigma}'') \left[e^{\frac{\beta J}{c}(\xi\eta'' + \xi''\eta) \sum_{\alpha} \sigma'_{\alpha} \sigma''_{\alpha}} - 1 \right] \right\rangle_{\xi''\eta''} - \beta h \sum_{\alpha} \sigma'_{\alpha} - \beta D \sum_{\alpha} (\sigma'_{\alpha})^2} \right\rangle_h}. \quad (3.29)
 \end{aligned}$$

Eliminando as variáveis $\hat{P}_{\xi\eta}(\boldsymbol{\sigma}')$ da energia livre obtemos

$$\begin{aligned}
 f(\beta) = & -\lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{\beta n} \text{Extr}_{\{P_{\xi\eta}(\boldsymbol{\sigma})\}} \left\{ -\frac{c}{2} \sum_{\boldsymbol{\sigma}\boldsymbol{\sigma}'} \left\langle P_{\xi\eta}(\boldsymbol{\sigma}) P_{\xi'\eta'}(\boldsymbol{\sigma}') \left[e^{\frac{\beta J}{c}(\xi\eta' + \xi'\eta) \sum_{\alpha} \sigma_{\alpha} \sigma'_{\alpha}} - 1 \right] \right\rangle_{\xi\eta, \xi'\eta'} \right. \\
 & + \left\langle \log \left\langle \sum_{\boldsymbol{\sigma}} \exp \left(c \left\langle \sum_{\boldsymbol{\sigma}'} P_{\xi'\eta'}(\boldsymbol{\sigma}') \left[e^{\frac{\beta J}{c}(\xi\eta' + \xi'\eta) \sum_{\alpha} \sigma_{\alpha} \sigma'_{\alpha}} - 1 \right] \right\rangle_{\xi'\eta'} \right. \right. \\
 & \left. \left. - \beta h \sum_{\alpha} \sigma_{\alpha} - \beta D \sum_{\alpha} \sigma_{\alpha}^2 \right) \right\rangle_h \right\rangle_{\xi\eta} \right\}. \quad (3.30)
 \end{aligned}$$

A expressão (3.29) é uma equação que deve ser resolvida de forma autoconsistente. Para prosseguir com a solução, é necessário escolher uma parametrização para $P_{\xi\eta}(\boldsymbol{\sigma})$. Para isso, adotamos o *Ansatz* de simetria de réplicas, ou seja, $P_{\xi\eta}(\boldsymbol{\sigma})$ deve ser invariante a qualquer permutação de índices de réplica $P_{\xi\eta}(\pi\boldsymbol{\sigma}) = P_{\xi\eta}(\boldsymbol{\sigma})$, onde π representa alguma permutação sobre índices de réplica. Além disso reescrevemos $P_{\xi\eta}(\boldsymbol{\sigma})$ como uma probabilidade condicional, seguindo a referência [100]

$$P(\boldsymbol{\sigma}) = \int d\mathbf{x} W(\mathbf{x}) \prod_{\alpha} P(\sigma_{\alpha}|\mathbf{x}) \quad (3.31)$$

A forma de $P(\sigma_{\alpha}|\mathbf{x})$ e o número de componentes de $\mathbf{x} = \{x_1, \dots, x_p\}$ depende do número de estados de spin $\sigma = \{-S, -S+1, \dots, S-1, S\}$. Para o sistema que estamos tratando, temos $\sigma = \{-1, 0, 1\}$, logo são necessários 2 campos (x, y) e o *Ansatz* adquire a forma

$$P_{\xi\eta}(\boldsymbol{\sigma}) = \int dx dy W_{\xi\eta}(x, y) \frac{e^{\beta x \sum_{\alpha} \sigma_{\alpha} - \beta y \sum_{\alpha} \sigma_{\alpha}^2}}{(\sum_{\sigma} e^{\beta x \sigma - \beta y \sigma^2})^n}. \quad (3.32)$$

A construção do *Ansatz* para um número infinito, porém discreto de estados de spin pode ser encontrada no apêndice A. Prosseguimos expandindo a equação (3.29). Por hora desconsideramos o denominador, porém mais adiante mostraremos que no limite $n \rightarrow 0$ ele tende a 1. Expandindo a exponencial externa em séries de potências, temos

$$P_{\xi\eta}(\boldsymbol{\sigma}) = \left\langle e^{-\beta h \sum_{\alpha} \sigma_{\alpha} - \beta D \sum_{\alpha} \sigma_{\alpha}^2} \sum_k \frac{e^{-c} c^k}{k!} \times \prod_{l=1}^k \left\langle \sum_{\boldsymbol{\sigma}_l} P_{\xi_l \eta_l}(\boldsymbol{\sigma}_l) e^{\frac{\beta J}{c} (\xi_{\eta_l} + \xi_l \eta) \sum_{\alpha} \sigma_{\alpha} \sigma_{\alpha l}} \right\rangle_{\xi_l \eta_l} \right\rangle_h. \quad (3.33)$$

Introduzindo o *Ansatz* de simetria de réplicas (3.32) na equação (3.33)

$$P_{\xi\eta}(\boldsymbol{\sigma}) = \left\langle e^{-\beta h \sum_{\alpha} \sigma_{\alpha} - \beta D \sum_{\alpha} \sigma_{\alpha}^2} \sum_k \frac{e^{-c} c^k}{k!} \times \prod_{l=1}^k \left\langle \sum_{\boldsymbol{\sigma}_l} \int \frac{dx_l dy_l W_{\xi_l \eta_l}(x_l, y_l)}{[\sum_{\sigma} e^{\beta x_l \sigma - \beta y_l \sigma^2}]^n} \times \exp \left[\beta x_l \sum_{\alpha} \sigma_{\alpha l} - \beta y_l \sum_{\alpha} \sigma_{\alpha l}^2 + \frac{\beta J}{c} (\xi_{\eta_l} + \xi_l \eta) \sum_{\alpha} \sigma_{\alpha} \sigma_{\alpha l} \right] \right\rangle_{\xi_l \eta_l} \right\rangle_h, \quad (3.34)$$

focando apenas no termo que possui variáveis a serem somadas $\sigma_{\alpha l}$

$$\% = \prod_{l=1}^k \sum_{\boldsymbol{\sigma}_l} \exp \left[\beta x_l \sum_{\alpha} \sigma_{\alpha l} - \beta y_l \sum_{\alpha} \sigma_{\alpha l}^2 + \frac{\beta J}{c} (\xi_{\eta_l} + \xi_l \eta) \sum_{\alpha} \sigma_{\alpha} \sigma_{\alpha l} \right]. \quad (3.35)$$

Rearranjando os fatores, podemos reescrever a equação acima na forma

$$\% = \prod_{l=1}^k \exp \sum_{\alpha} \log \sum_{\sigma_{\alpha l}} \exp \left[\beta x_l \sigma_{\alpha l} - \beta y_l \sigma_{\alpha l}^2 + \frac{\beta J}{c} (\xi_{\eta_l} + \xi_l \eta) \sigma_{\alpha} \sigma_{\alpha l} \right]. \quad (3.36)$$

Extraindo σ_{α} da exponencial interna

$$\% = \prod_{l=1}^k \exp \sum_{\alpha} \sum_{\tau} \delta_{\tau \sigma_{\alpha}} \log \sum_{\sigma} \exp \left[\beta x_l \sigma - \beta y_l \sigma^2 + \frac{\beta J}{c} (\xi_{\eta_l} + \xi_l \eta) \tau \sigma \right]. \quad (3.37)$$

Para realizar a soma sobre τ , fazemos uso da expansão da delta de Kronecker para spins de 3 estados,

$$\delta_{\sigma\sigma_\alpha} = 1 - \sigma^2 - \sigma_\alpha^2 + \frac{1}{2}\sigma\sigma_\alpha + \frac{3}{2}\sigma^2\sigma_\alpha^2. \quad (3.38)$$

Tomando a soma interna sobre τ e rearranjando os termos, temos

$$\%_0 = \prod_{l=1}^k \exp \left[n\phi_0(x_l, y_l) + \left(\sum_\alpha \sigma_\alpha \right) \phi_1(x_l, y_l) + \left(\sum_\alpha \sigma_\alpha^2 \right) \phi_2(x_l, y_l) \right], \quad (3.39)$$

onde definimos

$$\phi_0(x_l, y_l) = \log \left[2 \cosh \left(\beta x_l \right) e^{-\beta y_l} + 1 \right], \quad (3.40)$$

$$\phi_1(x_l, y_l) = \frac{1}{2} \log \frac{\chi_{+1}(x_l, y_l)}{\chi_{-1}(x_l, y_l)}, \quad (3.41)$$

$$\phi_2(x_l, y_l) = \frac{1}{2} \log \frac{\chi_{+1}(x_l, y_l)\chi_{-1}(x_l, y_l)}{\chi_0(x_l, y_l)}, \quad (3.42)$$

e

$$\chi_\tau(x_l, y_l) = \sum_\sigma \exp \left[\beta x_l \sigma - \beta y_l \sigma^2 + \frac{\beta}{c} J(\xi_l \eta_l + \xi_l \eta) \tau \sigma \right], \quad (3.43)$$

Inserindo a equação (3.39) na (3.34), reescrevendo o *Ansatz* à esquerda da igualdade e desconsiderando termos de $\mathcal{O}(1)$ no limite $n \rightarrow 0$, obtém-se a expressão

$$\begin{aligned} & \int dx dy W_{\xi\eta}(x, y) e^{\beta x \sum_\alpha \sigma_\alpha - \beta y \sum_\alpha \sigma_\alpha^2} = \left\langle \sum_k \frac{e^{-c} c^k}{k!} \right. \\ & \times \left\langle \int \prod_{l=1}^k dx_l dy_l W_{\xi_l \eta_l}(x_l, y_l) \right. \\ & \times \exp \left[-\beta h \sum_\alpha \sigma_\alpha - \beta D \sum_\alpha \sigma_\alpha^2 + \sum_\alpha \sigma_\alpha \sum_{l=1}^k \phi_1(x_l, y_l) + \sum_\alpha \sigma_\alpha^2 \sum_{l=1}^k \phi_2(x_l, y_l) \right] \left. \right\rangle_{\xi_l \eta_l} \Big|_h. \end{aligned} \quad (3.44)$$

Fazendo uso da delta de Dirac para reescrever o lado direito da igualdade da equação (3.45), temos

$$\begin{aligned} & \int dx dy W_{\xi\eta}(x, y) e^{\beta x \sum_\alpha \sigma_\alpha - \beta y \sum_\alpha \sigma_\alpha^2} = \int dx dy \\ & \times \left\{ \sum_k \frac{e^{-c} c^k}{k!} \left\langle \left\langle \int \prod_{l=1}^k dx_l dy_l W_{\xi_l \eta_l}(x_l, y_l) \delta \left(x + h - \frac{1}{\beta} \sum_{l=1}^k \phi_1(x_l, y_l) \right) \right. \right. \right. \\ & \times \delta \left(y - D + \frac{1}{\beta} \sum_{l=1}^k \phi_2(x_l, y_l) \right) \left. \right\rangle_{\xi_l \eta_l} \Big|_h \left. \right\} e^{\beta x \sum_\alpha \sigma_\alpha - \beta y \sum_\alpha \sigma_\alpha^2}. \end{aligned} \quad (3.45)$$

Comparando os lados esquerdo e direito da igualdade concluímos que

$$\begin{aligned} W_{\xi\eta}(x, y) &= \sum_k \frac{e^{-c} c^k}{k!} \left\langle \left\langle \int \prod_{l=1}^k dx_l dy_l W_{\xi_l \eta_l}(x_l, y_l) \right. \right. \\ & \times \delta \left(x + h - \frac{1}{\beta} \sum_{l=1}^k \phi_1(x_l, y_l) \right) \delta \left(y - D + \frac{1}{\beta} \sum_{l=1}^k \phi_2(x_l, y_l) \right) \left. \right\rangle_{\xi_l \eta_l} \Big|_h. \end{aligned} \quad (3.46)$$

A distribuição de campos locais $W_{\xi\eta}(x, y)$ contém toda informação sobre o sistema, onde x e y são campos locais acoplados à magnetização σ e à ocupação local σ^2 , respectivamente. O índice $\xi\eta$ refere-se as quatro *sub-redes*. Através da distribuição de campos locais, podemos determinar os parâmetros de ordem relevantes, que nesse caso são: o parâmetro de VS de van Hemmen

$$q = \frac{1}{2} \left\langle \left\langle \sum_{\sigma} P_{\xi\eta}(\sigma) (\xi + \eta) \sigma_{\alpha} \right\rangle_{\xi\eta} \right\rangle_h, \quad (3.47)$$

que permite verificar o ordenamento global do sistema e a ocupação local Q , que informa a ocupação média dos estados $\sigma = 0$ e ± 1

$$Q = \left\langle \left\langle \sum_{\sigma} P_{\xi\eta}(\sigma) \sigma_{\alpha}^2 \right\rangle_{\xi\eta} \right\rangle_h. \quad (3.48)$$

Substituindo o *Ansatz* (3.32), obtemos os parâmetros de ordem em função de $W_{\xi\eta}(x, y)$

$$q = \frac{1}{2} \left\langle \left\langle \int dx dy W_{\xi\eta}(x, y) (\xi + \eta) \langle \sigma \rangle \right\rangle_{\xi\eta} \right\rangle_h \quad (3.49)$$

e

$$Q = \left\langle \left\langle \int dx dy W_{\xi\eta}(x, y) \langle \sigma^2 \rangle \right\rangle_{\xi\eta} \right\rangle_h, \quad (3.50)$$

onde

$$\langle \sigma \rangle = \frac{2e^{-\beta y} \sinh(\beta x)}{1 + 2e^{-\beta y} \cosh(\beta x)} \quad (3.51)$$

e

$$\langle \sigma^2 \rangle = \frac{2e^{-\beta y} \cosh(\beta x)}{1 + 2e^{-\beta y} \cosh(\beta x)}. \quad (3.52)$$

As fases termodinâmicas estudadas são caracterizadas pelos parâmetros de ordem, de forma que o sistema encontra-se numa fase VS quando $q > 0$ e $Q > 0$ e, numa fase paramagnética (PM) para $q = 0$ e $Q > 0$, e numa fase não-magnética (NM) para $q = 0$ e $Q = 0$.

Considere o denominador da equação (3.29)

$$\mathcal{M} = \quad (3.53)$$

$$\left\langle \sum_{\sigma'} \exp \left(c \sum_{\sigma''} \left\langle P_{\xi''\eta''}(\sigma'') \left[e^{\frac{\beta J}{c} (\xi'' + \eta'')} \sum_{\alpha} \sigma'_{\alpha} \sigma''_{\alpha} - 1 \right] \right\rangle_{\xi''\eta''} - \beta h \sum_{\alpha} \sigma'_{\alpha} - \beta D \sum_{\alpha} (\sigma'_{\alpha})^2 \right) \right\rangle_h.$$

Seguindo os mesmos passos que levam até a equação (3.45), podemos reescrever o denominador como

$$\begin{aligned} \mathcal{M} &= \left\langle \sum_k \frac{e^{-c} c^k}{k!} \left\langle \int \prod_{l=1}^k \frac{dx_l dy_l W_{\xi_l \eta_l}(x_l, y_l)}{[\sum_{\sigma} e^{\beta x_l \sigma - \beta y_l \sigma^2}]^n} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. \times \sum_{\sigma} \exp \left[-\beta h \sum_{\alpha} \sigma_{\alpha} - \beta D \sum_{\alpha} \sigma_{\alpha}^2 + \sum_{\alpha} \sigma_{\alpha} \sum_{l=1}^k \phi_1(x_l, y_l) + \sum_{\alpha} \sigma_{\alpha}^2 \sum_{l=1}^k \phi_2(x_l, y_l) \right] \right\rangle_{\xi_l \eta_l} \right\rangle_h \end{aligned} \quad (3.54)$$

que pode ser escrito da forma

$$\begin{aligned} \mathcal{M} &= \left\langle \sum_k \frac{e^{-c} c^k}{k!} \left\langle \int \prod_{l=1}^k dx_l dy_l W_{\xi_l \eta_l}(x_l, y_l) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. \times \exp n \log \frac{\sum_{\sigma} e^{-\beta h \sigma - \beta D \sigma^2 + \sigma \sum_{l=1}^k \phi_1(x_l, y_l) + \sigma^2 \sum_{l=1}^k \phi_2(x_l, y_l)}}{\sum_{\sigma} e^{\beta x_l \sigma - \beta y_l \sigma^2}} \right\rangle_{\xi_l \eta_l} \right\rangle_h. \end{aligned} \quad (3.55)$$

Tomando o limite $n \rightarrow 0$, a normalização $\mathcal{M} \rightarrow 1$.

Na sequência, expandimos a energia livre (3.24) utilizando o *Ansatz* (3.32). A expressão é dividida em dois termos, f_1 e f_2 . Sendo que f_1 corresponde ao primeiro termo no lado direito da igualdade de (3.30) e f_2 ao segundo. Aplicando o *Ansatz*, temos

$$f_1(\beta) = \frac{c}{2\beta n} \left(\sum_{\sigma\sigma'} \left\langle \int \frac{dx dy dx' dy' W_{\xi\eta}(x, y) W_{\xi'\eta'}(x', y')}{[1 + 2e^{-\beta y} \cosh(\beta x)]^n [1 + 2e^{-\beta y'} \cosh(\beta x')]^n} \right. \right. \\ \left. \left. \times e^{\beta x \sum_{\alpha} \sigma_{\alpha} - \beta y \sum_{\alpha} (\sigma_{\alpha})^2 + \beta x' \sum_{\alpha} \sigma'_{\alpha} - \beta y' \sum_{\alpha} (\sigma'_{\alpha})^2} e^{\frac{\beta}{c}(J(\xi\eta' + \xi'\eta)) \sum_{\alpha} \sigma_{\alpha} \sigma'_{\alpha}} \right\rangle_{\xi\eta, \xi'\eta'} - 1 \right), \quad (3.56)$$

que pode ser reescrito como

$$f_1(\beta) = \frac{c}{2\beta n} \left(\left\langle \int dx dy dx' dy' W_{\xi\eta}(x, y) W_{\xi'\eta'}(x', y') \right. \right. \\ \left. \left. \times \frac{\prod_{\alpha} \sum_{\sigma_{\alpha} \sigma'_{\alpha}} e^{\beta x \sigma_{\alpha} - \beta y (\sigma_{\alpha})^2 + \beta x' \sigma'_{\alpha} - \beta y' (\sigma'_{\alpha})^2 + \frac{\beta}{c}(J(\xi\eta' + \xi'\eta)) \sigma_{\alpha} \sigma'_{\alpha}}}{[1 + 2e^{-\beta y} \cosh(\beta x)]^n [1 + 2e^{-\beta y'} \cosh(\beta x')]^n} \right\rangle_{\xi\eta, \xi'\eta'} - 1 \right). \quad (3.57)$$

Usando o fato que réplicas são não-interagentes, ficamos com

$$f_1(\beta) = \frac{c}{2\beta n} \left(\left\langle \int dx dy dx' dy' W_{\xi\eta}(x, y) W_{\xi'\eta'}(x', y') \right. \right. \\ \left. \left. \times \left(\frac{\sum_{\sigma\sigma'} e^{\beta x \sigma - \beta y (\sigma)^2 + \beta x' \sigma' - \beta y' (\sigma')^2 + \frac{\beta}{c}(J(\xi\eta' + \xi'\eta)) \sigma \sigma'}}{[1 + 2e^{-\beta y} \cosh(\beta x)] [1 + 2e^{-\beta y'} \cosh(\beta x')] } \right)^n \right\rangle_{\xi\eta, \xi'\eta'} - 1 \right). \quad (3.58)$$

No limite $n \rightarrow 0$

$$f_1(\beta) = \frac{c}{2\beta} \left\langle \int dx dy dx' dy' W_{\xi\eta}(x, y) W_{\xi'\eta'}(x', y') \log G_E(x, y, x', y') \right\rangle_{\xi\eta, \xi'\eta'}, \quad (3.59)$$

onde definimos

$$G_E(x, y, x', y') = \frac{\chi(x, y, x', y')}{\chi_0(x, y) \chi_0(x', y')}, \quad (3.60)$$

$$\chi(x, y, x', y') = \sum_{\sigma\tau} \exp \left[\beta x \sigma - \beta y \sigma^2 + \beta x' \tau - \beta y' \tau^2 + \frac{\beta}{c} J(\xi\eta' + \xi'\eta) \sigma \tau \right]. \quad (3.61)$$

O segundo termo

$$f_2(\beta) = -\frac{1}{\beta n} \left\langle \log \left\langle \sum_{\sigma} e^{-\beta h \sum_{\alpha} \sigma_{\alpha} - \beta D \sum_{\alpha} \sigma_{\alpha}^2} \sum_k \frac{e^{-c} c^k}{k!} \right. \right. \\ \left. \left. \times \prod_{l=1}^k \left\langle \sum_{\sigma_l} \int \frac{dx_l dy_l W_{\xi_l \eta_l}(x_l, y_l)}{[1 + 2e^{-\beta y_l} \cosh(\beta x_l)]^n} \right. \right. \right. \\ \left. \left. \left. \times \exp \left[\beta x_l \sum_{\alpha} \sigma_{\alpha l} - \beta y_l \sum_{\alpha} \sigma_{\alpha l}^2 + \frac{\beta}{c} (J(\xi_l \eta_l + \xi_l \eta)) \sum_{\alpha} \sigma_{\alpha} \sigma_{\alpha l} \right] \right\rangle_{\xi_l \eta_l} \right\rangle_{h'} \right\rangle_{\xi \eta}. \quad (3.62)$$

Reescrevendo

$$f_2(\beta) = -\frac{1}{\beta n} \left\langle \log \left\langle \sum_{\sigma} e^{-\beta h \sum_{\alpha} \sigma_{\alpha} - \beta D \sum_{\alpha} \sigma_{\alpha}^2} \sum_k \frac{e^{-c} c^k}{k!} \prod_{l=1}^k \left\langle \int dx_l dy_l W_{\xi_l \eta_l}(x_l, y_l) \right. \right. \right. \\ \left. \left. \left. \times \prod_{\alpha} \frac{e^{\beta x_l \sigma_{\alpha l} - \beta y_l \sigma_{\alpha l}^2 + \frac{\beta}{c} (J(\xi \eta_l + \xi_l \eta)) \sigma_{\alpha} \sigma_{\alpha l}}}{1 + 2e^{-\beta y_l} \cosh(\beta x_l)} \right\rangle \right\rangle_{\xi_l \eta_l} \right\rangle_h \right\rangle_{\xi \eta}. \quad (3.63)$$

Somando sobre $\sigma_{\alpha l}$ e, novamente utilizando a propriedade que as réplicas são não-interagentes, rearranjamos os termos e ficamos com

$$f_2(\beta) = -\frac{1}{\beta n} \left\langle \log \left\langle \sum_k \frac{e^{-c} c^k}{k!} \left\langle \int \prod_{l=1}^k dx_l dy_l W_{\xi_l \eta_l}(x_l, y_l) \left[\sum_{\sigma} e^{-\beta h \sigma - \beta D \sigma^2} \right. \right. \right. \\ \left. \left. \left. \times \prod_{l=1}^k \frac{1 + 2e^{-\beta y_l} \cosh(\beta x_l + \frac{\beta}{c} (J(\xi \eta_l + \xi_l \eta)) \sigma)}{1 + 2e^{-\beta y_l} \cosh(\beta x_l)} \right] \right\rangle \right\rangle_{\xi_l \eta_l} \right\rangle_h \right\rangle_{\xi \eta}. \quad (3.64)$$

Somando sobre σ e tomando o limite $n \rightarrow 0$, temos

$$f_2(\beta) = -\frac{1}{\beta} \left\langle \left\langle \sum_k \frac{e^{-c} c^k}{k!} \left\langle \int \prod_{l=1}^k dx_l dy_l W_{\xi_l \eta_l}(x_l, y_l) \log G_S(\{x_l\}, \{y_l\}) \right\rangle \right\rangle_{\xi_l \eta_l} \right\rangle_h \right\rangle_{\xi \eta}, \quad (3.65)$$

onde

$$G_S(\{x_l\}, \{y_l\}) = 1 + e^{-\beta h - \beta D} \prod_l \frac{\chi_{+1}(x_l, y_l)}{\chi_0(x_l, y_l)} + e^{\beta h - \beta D} \prod_l \frac{\chi_{-1}(x_l, y_l)}{\chi_0(x_l, y_l)}. \quad (3.66)$$

Finalmente, a energia livre dentro da teoria de simetria de réplicas para esse modelo fica

$$f(\beta) = \frac{c}{2\beta} \left\langle \int dx dy dx' dy' W_{\xi \eta}(x, y) W_{\xi' \eta'}(x', y') \right. \\ \left. \times \log G_E(x, y, x', y') \right\rangle_{\xi \eta, \xi' \eta'} - \frac{1}{\beta} \left\langle \left\langle \sum_k \frac{e^{-c} c^k}{k!} \left\langle \int \prod_{l=1}^k dx_l dy_l \right. \right. \right. \\ \left. \left. \left. \times W_{\xi_l \eta_l}(x_l, y_l) \log G_S(\{x_l\}, \{y_l\}) \right\rangle \right\rangle_{\xi_l \eta_l} \right\rangle_h \right\rangle_{\xi \eta}. \quad (3.67)$$

3.2 Resultados

Antes de apresentar os resultados, mostramos o processo do cálculo numérico das distribuições de campos (3.46), através da dinâmica de populações [62, 101]. É necessário uma população de campos para cada sub-rede $\xi = \pm 1$ e $\eta = \pm 1$, onde cada uma contém \mathcal{N} elementos no espaço bidimensional (x, y) . Em cada passo, um número k é escolhido a partir de uma distribuição de Poisson, e um campo aleatório h_0 é escolhido através de uma distribuição de probabilidade bimodal, conforme mencionado acima. Em seguida, sorteamos, aleatoriamente, $l = 1 \dots k$ sub-redes $\xi_l \eta_l$ e k campos (x_l, y_l) para cada uma das sub-redes sorteadas. Finalmente, sorteamos um campo (x, y) e atualizamos seu valor de acordo com as expressões

$$x = -h_0 + \frac{1}{\beta} \sum_{l=1}^k \phi_1(x_l, y_l) \quad (3.68)$$

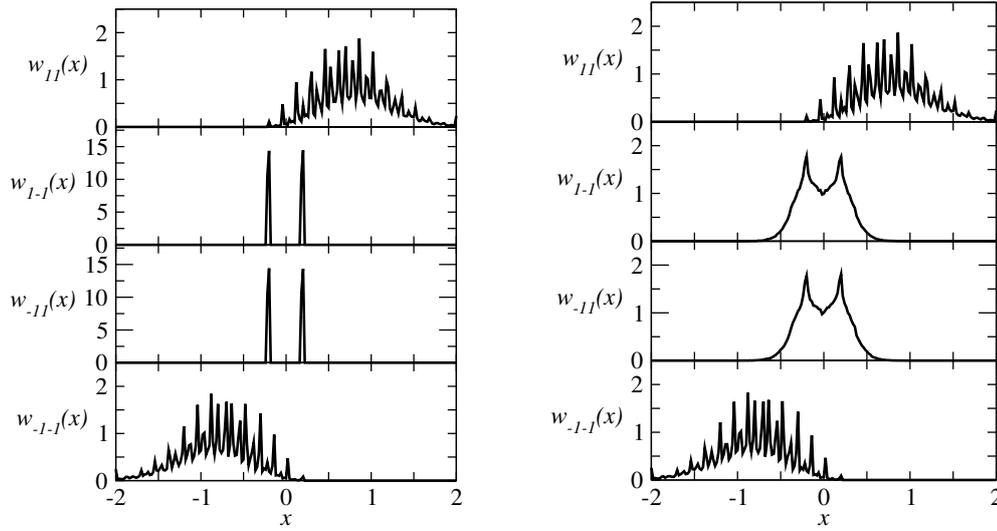


Figura 3.1: Duas soluções coexistentes para a distribuição marginal de campos locais para $T = 0.03$, $h_0 = 0.2$, $D = 0.464$. Solução de baixa ocupação (painel esquerdo) e solução de ocupação alta (painel direito).

e

$$y = D - \frac{1}{\beta} \sum_{l=1}^k \phi_2(x_l, y_l). \quad (3.69)$$

Esse processo é realizado para cada sub-rede e é repetido até as populações convergirem. Para que fique mais claro, ilustramos na figura 3.1 as distribuições marginais de cada sub-rede, onde a distribuição marginal é definida por

$$w_{\xi\eta}(x) = \int dy W_{\xi\eta}(x, y). \quad (3.70)$$

Mostramos exemplos das marginais em baixa temperatura ($T = 0.03$) para valores de campo aleatório e cristalino respectivamente $h_0 = 0.2$ e $D = 0.464$, e para conectividade média $c = 12$, onde h_0 é amplitude do campo aleatório. As distribuições de campos, nessa figura, correspondem à região de coexistência entre as fases de vidro de baixa ocupação SG_L e de alta ocupação SG_H . Na figura (3.2), mostramos exemplos dos parâmetros de ordem q , Q e a energia livre f em função do campo cristalino D , para os mesmos valores de campo aleatório, temperatura e conectividade média da figura (3.1). Podemos ver pelo parâmetro Q a transição de SG_H para SG_L . Para esse conjunto de parâmetros podemos observar a ocorrência de duas transições de fase de primeira ordem, caracterizadas pela presença de histerese e duas soluções de energia livre metaestáveis que se cruzam no ponto da transição de fase termodinâmica.

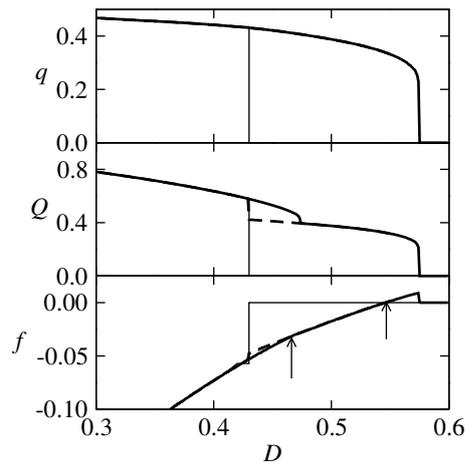


Figura 3.2: Parâmetros de ordem e energia livre em função do campo cristalino para $h_0 = 0.2$, $T = 0.03$ e $c = 12$. Linhas sólidas (tracejadas) correspondem à fase vidro de alta (baixa) ocupação SG_H (SG_L). Linha fina sólida pertence a fase NM. A flecha à esquerda na curva da energia livre sinaliza a transição entre as duas fases vidro e a flecha a direita sinaliza a transição $SG_L \rightarrow NM$.

A seguir, discutimos a influência provocada pelo campo cristalino D e o campo aleatório h_0 . Primeiramente, apresentamos diagramas de fase do estado fundamental para alguns valores de conectividade média c , na figura (3.3). Os resultados mostram a evolução da fase vidro, enquanto a conectividade média é aumentada. Em baixas conectividades, como $c = 4$, mostrado no painel ao topo esquerdo da figura (3.3), a fase vidro é restrita apenas a valores pequenos de h_0 e D . Com o aumento de h_0 essa fase vidro sofre uma transição de fase contínua para uma fase paramagnética (PM) e, com o aumento de D , a fase vidro sofre uma transição de fase descontínua para uma fase não magnética NM. Isso pode ser entendido pelo fato de que D favorece o estado $\sigma_i = 0$, enquanto que h_0 favorece estados $\sigma_i = \pm 1$, ainda que de uma forma desordenada. A figura ainda mostra uma transição de fase contínua entre a fase PM e NM. O círculo aberto sinaliza um ponto bicrítico, localizado no encontro de uma linha de transição descontínua entre VS e NM, e duas linhas de transição contínuas entre VS e PM e entre PM e NM.

Analisamos, agora, o efeito do aumento da conectividade média. Podemos verificar que a fase VS é favorecida pelo aumento da conectividade. Observando, primeiramente, o painel do topo à direita da figura (3.3), no valor de $c = 6$, verificamos a aparição de uma fase intersticial de VS, onde previamente havia a linha de transição NM-PM. Tal fato pode ser resultado do aumento da frustração da rede devido ao aumento de c . Como podemos observar, isso ocorre em uma região onde $D \approx h_0$, sendo resultado, também, da competição entre esses campos. A primeira hipótese é suportada pelos painéis inferiores da esquerda e da direita da figura (3.3), com $c = 8$ e $c = 12$. Verificamos que o tamanho dessa fase intersticial é aumentado. No painel inferior da direita, para $c = 12$, aparece um ponto tricrítico na transição VS para PM. Em valores de D baixo essa transição passa de contínua para descontínua. Outro ponto a ressaltar é o aparecimento de uma divisão das fases vidro, uma fase com baixa ocupação (SG_L) e uma fase de alta ocupação (SG_H). Ambas fases possuem o mesmo valor do parâmetro de ordem de VS q , porém diferem na ocupação Q , como mostrado na figura (3.2). Analisando a figura, a flecha esquerda na energia livre mostra a transição de fase descontínua entre as duas fases VS, e a flecha a direita mostra a transição de fase descontínua para fase NM. Uma visão mais detalhada dessas fases de vidro coexistentes é mostrada na figura (3.1). Essa figura mostra a distribuição de campos locais para as 4 sub-redes, para cada fase de VS coexistentes sobre a linha de transição. Como pode-se

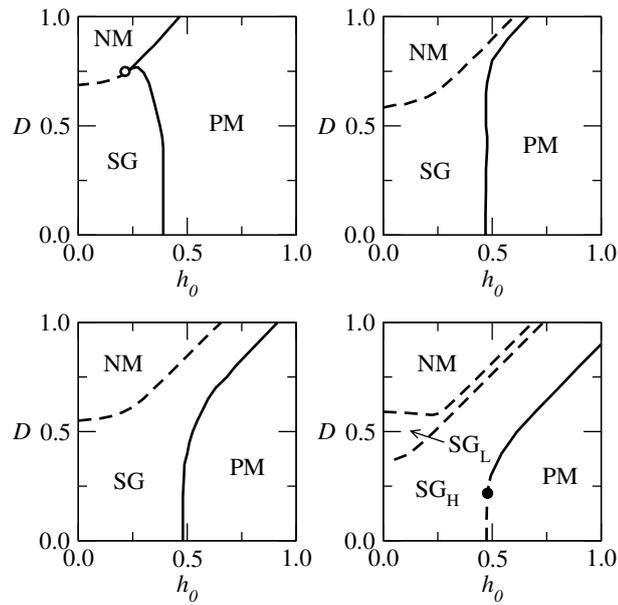


Figura 3.3: Diagrama de fase D contra h_0 no estado fundamental para $c = 4$ (topo esquerda); $c = 6$ (topo direita); $c = 8$ (abaixo esquerda); $c = 12$ (abaixo direita). Linhas solidas (tracejadas) correspondem a transições contínuas (descontínuas). Círculo aberto (fechado) sinalizam pontos bicríticos (tricríticos).

observar, somente $W_{1-1}(x)$ e $W_{-11}(x)$ diferem. A solução (SG_H) possui distribuições mais alargadas do que a (SG_L). As marginais sobre y tem um comportamento similar as de x , com $W_{1-1}(y)$ e $W_{-11}(y)$ sendo mais largas para solução (SG_H). O desdobramento das fases VS em (SG_L) e (SG_H) para $c = 12$, indica que esse valor de conectividade se aproxima do resultado na rede totalmente conectada $c \rightarrow \infty$, discutido em [97].

Quando adicionados efeitos de temperatura, juntamente com a variação da conectividade, obtemos uma riqueza maior no comportamento do sistema. Para visualizar o comportamento do sistema de forma mais clara e abordar uma discussão mais completa, escolhemos apresentar os resultados na forma de diagramas de fase de temperatura em função do campo aleatório, para alguns valores de campo cristalino e conectividade. Primeiramente, começamos num regime de conectividade média baixa $c = 4$. Analisando a figura (3.3) (topo esquerda) vemos que, para $c = 4$, a região mais interessante para investigar é onde o campo cristalino varia dentro do intervalo 0,6 a 0,75. Para $D \leq 0,6$, a fase VS é restrita a valores baixos de h_0 e T do diagrama T contra h_0 , como mostrado no painel à esquerda da figura 3.4. Geralmente, essa forma de diagrama de fase é encontrada para valores $D \leq 0,6$ e $c \leq 12$. Para $D = 0,72$, mostrado no painel central de (3.4), há um forte efeito de reentrância, com o aparecimento de uma fase NM no regime de baixos valores de h_0 e T . Isso ocorre porque o campo cristalino favorece o estado inativo, enquanto que o campo aleatório, bem como a temperatura, favorecem os estados ativos. Logo, o aparecimento da fase de vidro nesse regime é devido à influência de ambos, h_0 e T . Para altos valores de h_0 e T , a presença de ruído favorece a fase PM. Para $D = 0,72$, a transição de fase entre NM e VS é descontínua. Para $D = 0,75$, mostrado no painel à direita da figura (3.4), encontramos um diagrama de fase com formato similar. No entanto, a transição NM para VS é substituída por uma transição contínua. Supomos que existe um pequeno intervalo na faixa de $0,72 \leq D \leq 0,75$, onde existe um ponto tricrítico na transição entre NM e VS. Cabe ressaltar que as transições contínuas de VS para PM são notavelmente reentrantes para $D = 0,72$ e $D = 0,75$. Essa questão será abordada mais adiante.

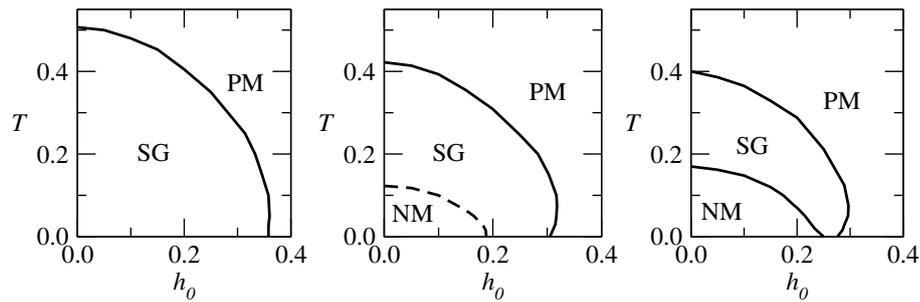


Figura 3.4: Diagramas de fase T contra h_0 para $c = 4$ em alguns valores representativos do campo cristalino: $D = 0,6$ (esquerda); $D = 0,72$ (meio); $D = 0,75$ (direita). Linhas sólidas (tracejadas) correspondem à transições contínuas (descontínuas).

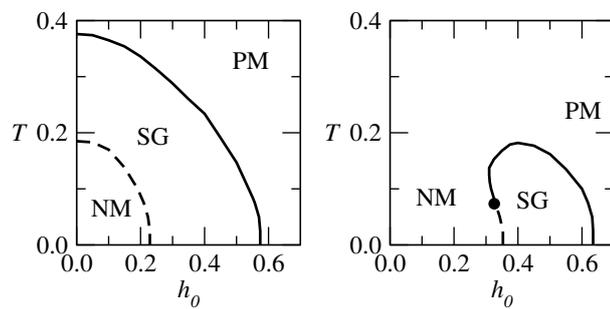


Figura 3.5: Diagramas de fase T contra h_0 para $c = 8$ em dois valores representativos do campo cristalino: $D = 0,6$ (esquerda); $D = 0,7$ (direita). Linhas sólidas (tracejadas) correspondem à transições contínuas (descontínuas).

A seguir, mostramos os diagramas de fase para $c = 8$. Para $D \leq 0,5$, não há nenhuma novidade a ser apontada nos diagramas T contra h_0 , já que os diagramas são similares aqueles mostrados no painel esquerdo, da figura (3.4), exceto de que a transição VS para PM não é mais reentrante. O painel da esquerda, na figura (3.5), para $D = 0,6$, mostra uma forte reentrância com uma transição de fase descontínua de NM para VS, como a que observamos em $c = 4$ e $D = 0,72$. Uma mudança notável aparece para $D = 0,7$, mostrado no painel da direita, da figura (3.5). A fase VS é deslocada para valores mais elevados de h_0 , resultante da competição entre os campos aleatório e cristalino. Quanto maior D , maior é a faixa de h_0 em que a fase VS está presente. Esse resultado já era esperado pelo diagrama de fase do estado fundamental, onde a VS ocupa uma faixa diagonal.

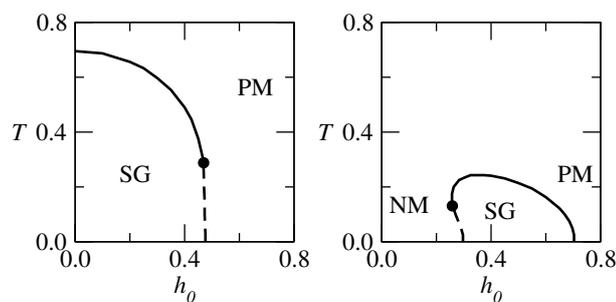


Figura 3.6: Diagramas de fase T contra h_0 para $c = 12$, em dois valores representativos do campo cristalino: $D = 0$ (esquerda); $D = 0,6$ (direita). Linhas sólidas (tracejadas) correspondem a transições contínuas (descontínuas).

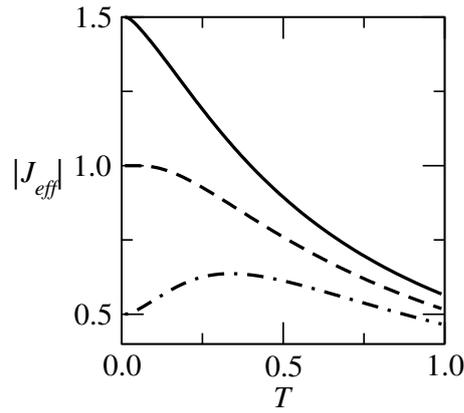


Figura 3.7: Acoplamento efetivo em função da temperatura para $c = 4$ com $D = 0,25$ (linha sólida), $D = 0,5$ (linha tracejada) e $D = 0,75$ (linha tracejada e pontilhada).

Com o aumento da conectividade média, os resultados gerais se aproximam daqueles obtidos pela teoria de campo médio que correspondem a $c \rightarrow \infty$ discutidos na Ref. ([97]). Mostramos, na figura (3.6), alguns diagramas de fase representativos para $c = 12$. Em $D = 0$, mostrado no painel da esquerda, a transição VS para PM torna-se de primeira ordem a baixas temperaturas, contendo um ponto tricrítico em $T \simeq 0,3$ e sem a presença de reentrância. Cabe ressaltar que a reentrância é observada nas transições NM para VS, mesmo quando elas são de segunda ordem, porém não nas transições VS para PM. Justificaremos isso a seguir utilizando um argumento sobre o acoplamento efetivo. Observando o painel à direita da figura (3.6) para $D = 0,6$, vemos que a transição VS para PM permanece sendo de segunda ordem.

Para concluir essa seção, apresentamos um argumento para justificar o comportamento reentrante nas transições NM para VS. Esse argumento é uma extensão para transições NM para VS, a partir de um argumento utilizado anteriormente, para justificar a presença de reentrância nas transições NM para Ferromagnéticas [102, 103]. Para valores de campo cristalino D elevado, os estados inativos $s_i = 0$ são favorecidos. Consideremos um conjunto de três sítios, sendo que o sítio central é a única conexão entre os sítios laterais. Quando o sítio central está num estado inativo, os vizinhos das laterais estão desconectados entre si. Para estimar o valor do acoplamento médio entre esses sítios, calculamos a função de partição desse sistema de dois sítios, dada por

$$|J_{eff}| = \frac{c}{2\beta} \left\langle \log \frac{1 + 2e^{-\beta D} \cosh\left(\frac{4\beta J}{c} - \beta h\right)}{1 + 2e^{-\beta D} \cosh\left(\frac{4\beta J}{c}\right)} \right\rangle_h. \quad (3.71)$$

Na transição NM para FM, o acoplamento efetivo é positivo, e na transição NM para VS pode ser tanto positivo ou negativo, que é o caso que estamos tratando. Curvas de $|J_{eff}|$ em função T , para alguns valores D , $c = 4$ e $h_0 = 0,2$ são mostradas na figura (3.7), onde podemos observar que o acoplamento efetivo torna-se uma função não-monótona da temperatura para valores suficientemente grandes de D . Logo, é razoável esperar que, nessa situação específica, o ruído térmico favoreça estados ativos e, conseqüentemente, a fase VS. Enfatizamos que a entropia possui o comportamento correto, pois a fase NM é uma fase altamente ordenada, no sentido que todos sítios encontram-se no estado inativo para $T = 0$.

Com essa análise simples, podemos compreender melhor o motivo pelo qual as transições NM para VS são reentrantes, enquanto que as VS-PM não são, exceto para valores de c pequeno,

onde até mesmo as transições VS para PM são reentrantes. Para D alto, a primeira transição é observada na região de campo aleatório baixo da fase VS, onde os estados inativos são favorecidos, e a segunda é observada no regime de campo aleatório elevado, na fase VS, onde os spins já estão excitados pelo campo aleatório e a temperatura já não tem um papel relevante. Para valores suficientemente pequenos de conectividade, como na figura (3.4), mesmo a transição VS para PM torna-se reentrante. Para valores de c tão baixos, é suficiente uma pequena amplitude de campo aleatório para desestabilizar a fase VS, deslocando a transição para valores pequenos de h_0 , onde efeitos de temperatura se tornam relevantes novamente.

3.3 Observações finais

Nesse trabalho, estudamos o modelo de van Hemmen com três estados no grafo aleatório através do método de réplicas, fazendo uso de funções de ordem. O foco foi o estudo da fase de VS. Além disso, adicionou-se um campo aleatório binário de média zero e variância um. É importante ressaltar que o modelo de van Hemmen permite o estudo de uma transição de fase VS na presença de um campo aleatório, pois o parâmetro de ordem desse modelo não acopla com campo aleatório. Mostramos que a conectividade média da rede tem um efeito marcante no comportamento geral do modelo. Para valores de c pequeno, a fase VS é confinada a pequenas amplitudes dos campos aleatório e cristalino. Por simplicidade, nos restringimos à análise nas faixas $0 \leq h_0 \leq 1$, $0 \leq D \leq 1$. Aumentando a conectividade, a fase VS aparece como uma competição entre h_0 , que favorece aleatoriamente os estados ativos $\sigma = \pm 1$ e D , que favorece os estados inativos $\sigma = 0$.

Efeitos térmicos também foram investigados, com diagramas de fase T contra h_0 para várias combinações de D e c . Em termos gerais, queremos ressaltar o aparecimento de fortes efeitos de reentrância, principalmente para valores de c pequeno. O aparecimento de tais efeitos foi explicado com base num argumento da dependência do acoplamento efetivo na temperatura. Temos que destacar, também, o aparecimento de pontos tricríticos nas transições NM-VS e VS-PM. Como esperado, o comportamento geral se aproxima da teoria de campo médio na rede totalmente conexa quando c aumenta. Destacamos que as mudanças nos diagramas de fase, obtidos nesse trabalho, podem ser interpretadas como um resultado da modificação na estrutura da rede, passando de um regime em que o número de interações de longo alcance é infinito para um regime onde existe um número finito de interações.

Os resultados apresentados nesse trabalho tratam de sistemas magnéticos desordenados que não possuem magnetização macroscópica. Entretanto, pode-se utilizar o mesmo modelo para investigar a relação entre a fase VS e as fases ferromagnéticas na presença dos campos aleatório e cristalino, através da adição de um termo constante e positivo ao acoplamento da equação (3.3). Em estudos futuros, pode ser feita a inclusão de um conjunto extra de variáveis aleatórias ao acoplamento, de forma que $\{\xi_\alpha, \eta_\alpha\}$ com $\alpha = 1 \dots p$, sendo $p \in \mathbb{N}$.

É importante notar que, nesse trabalho, nos restringimos ao estudo da solução de simetria de réplicas. Entretanto, uma análise utilizando o método de duas réplicas [104, 105, 106], que explicaremos no próximo capítulo, mostrou que essa fase de VS não possui instabilidade na solução de simetria de réplicas.

Apesar de os resultados aqui apresentados fazerem parte de uma classe de problemas restritos, que estudam inter-relação entre interações aleatórias, campos aleatórios e campo cristalino, esperamos que nossos resultados possam contribuir para um conjunto mais amplo

de problemas, tais como vidros de tensão [107, 108], que são análogos a vidros de spin com distorções na rede.

Capítulo 4

Modelo de Vidros de Spin com campo aleatório

Neste capítulo estudamos um modelo onde a desordem está presente nas interações e nos campos locais. Similar ao modelo abordado no capítulo anterior, os acoplamentos entre spins são variáveis aleatórias. Porém, substituímos o acoplamento de Van Hemmen por uma distribuição Gaussiana com média J_0/c e variância J^2/c . Os campos locais são dados por uma distribuição Gaussiana com média h_0 e variância Δ^2 . Na versão campo médio desse modelo [109], é previsto a existência de um *crossover*, descrito a partir da relação $\tau \equiv T_0 - T \sim h_0^{2/\phi}$. Quando efeitos de VS dominam o expoente $\phi = 3$ e quando efeitos de CA dominam $\phi = 1$. O objetivo deste trabalho é estudar esse *crossover* entre campo aleatório e VS, além da aproximação de campo médio. Para isso, utilizamos o método das réplicas e estudamos um modelo com conectividade finita.

4.1 Modelo com campo aleatório

O Hamiltoniano desse modelo é dado por

$$H = - \sum_{i < j} c_{ij} J_{ij} \sigma_i \sigma_j - \sum_i h_i \sigma_i, \quad (4.1)$$

onde $i = 1 \dots N$ e $\sigma_i = \pm 1$ são variáveis de spin do tipo Ising. As variáveis c_{ij} são obtidas a partir da distribuição (3.2). As constantes de acoplamento são descritas pela distribuição Gaussiana:

$$p(J_{ij}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi J^2/c}} \exp \left[-\frac{(J_{ij} - J_0/c)^2}{2J^2/c} \right], \quad (4.2)$$

onde J_0/c e J/\sqrt{c} representam a média e a variância, respectivamente. A distribuição dos campos aleatórios locais é dada por:

$$p(h_i) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\Delta^2}} \exp \left[-\frac{(h_i - h_0)^2}{2\Delta^2} \right], \quad (4.3)$$

com média h_0 e variância Δ . Novamente, extraímos as propriedades de equilíbrio térmico através da energia livre, fazendo uso do método das réplicas

$$f(\beta) = - \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{\beta N} \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{n} \log \langle Z^n \rangle. \quad (4.4)$$

A média sobre as variáveis desordenadas da função de partição replicada fica:

$$\langle Z^n \rangle = \sum_{\sigma_1 \dots \sigma_n} \left\langle \exp \left(\beta \sum_{i,\alpha} h_i \sigma_{i\alpha} \right) \exp \left(\beta \sum_{i,j < i} J_{ij} c_{ij} \sigma_i \cdot \sigma_j \right) \right\rangle_{\{J_{ij}, h_i, c_{ij}\}}. \quad (4.5)$$

Repetindo o mesmo processo do capítulo anterior, tomamos a média sobre as variáveis c_{ij}

$$\langle Z^n \rangle = \sum_{\sigma_1 \dots \sigma_n} \left\langle \exp \left[\beta \sum_{i,\alpha} h_i \sigma_{i\alpha} + \frac{c}{2N} \sum_{i,j \neq i} \left(e^{\beta J_{ij} \sigma_i \cdot \sigma_j} - 1 \right) \right] \right\rangle_{\{J_{ij}, h_i\}}. \quad (4.6)$$

A seguir, introduzimos a fração $P(\sigma)$ de sítios que se encontra na configuração de réplica σ . As variáveis auxiliares $\hat{P}(\sigma)$ aparecem pela representação complexa da delta de Dirac. Com isso tomamos o traço sobre as variáveis de spin. Isso reduz ao problema de um sítio. A função de partição replicada pode ser reescrita como

$$\begin{aligned} \langle Z^n \rangle = & \int \prod_{\sigma} dP(\sigma) d\hat{P}(\sigma) \exp \left\{ N \log \sum_{\sigma} \left\langle \exp \left[\beta h \sum_{\alpha} \sigma_{\alpha} - \hat{P}(\sigma) \right] \right\rangle_h \right. \\ & \left. + N \sum_{\sigma} \hat{P}(\sigma) P(\sigma) + \frac{Nc}{2} \sum_{\sigma\sigma'} P(\sigma) P(\sigma') \left\langle \left(e^{\beta J \sigma \cdot \sigma'} - 1 \right) \right\rangle_J \right\}. \end{aligned} \quad (4.7)$$

No limite que $N \rightarrow \infty$, a integral pode ser solucionada através do método do ponto sela, e a energia livre fica

$$\begin{aligned} f(\beta) = & - \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{\beta n} \text{Extr}_{\{P(\sigma)\}} \left\{ - \frac{c}{2} \sum_{\sigma\sigma'} P(\sigma) P(\sigma') \left\langle \left(e^{\beta J \sigma \cdot \sigma'} - 1 \right) \right\rangle_J \right. \\ & \left. + \log \sum_{\sigma} \left\langle \exp \left[\beta h \sum_{\alpha} \sigma_{\alpha} + c \sum_{\sigma'} P(\sigma') \left\langle \left(e^{\beta J \sigma \cdot \sigma'} - 1 \right) \right\rangle_J \right] \right\rangle_h \right\}, \end{aligned} \quad (4.8)$$

as variáveis auxiliares $\hat{P}(\sigma)$ são eliminadas pelas equações de ponto de sela $\partial f / \partial \hat{P}(\sigma) = 0$. As variáveis $P(\sigma)$ devem satisfazer as seguintes equações de ponto de sela,

$$P(\sigma) = \frac{\left\langle \exp \left[\beta h \sum_{\alpha} \sigma_{\alpha} + c \sum_{\sigma'} P(\sigma') \left\langle \left(e^{\beta J \sigma \cdot \sigma'} - 1 \right) \right\rangle_J \right] \right\rangle_h}{\sum_{\sigma'} \left\langle \exp \left[\beta h \sum_{\alpha} \sigma'_{\alpha} + c \sum_{\sigma''} P(\sigma'') \left\langle \left(e^{\beta J \sigma' \cdot \sigma''} - 1 \right) \right\rangle_J \right] \right\rangle_h}. \quad (4.9)$$

Novamente, procuramos soluções que satisfazem o critério de simetria de réplicas já mencionado no capítulo anterior. Para esse modelo de spins de Ising, escolhemos como *Ansatz*

$$P(\sigma) = \int dx W(x) \frac{e^{\beta x \sum_{\alpha} \sigma_{\alpha}}}{[2 \cosh(\beta x)]^n}. \quad (4.10)$$

Introduzindo o *Ansatz* na Eq. (4.9) obtemos a expressão recursiva para distribuição de campos locais

$$\begin{aligned} W(x) = & \sum_k \frac{e^{-c} c^k}{k!} \left\langle \int \prod_{l=1}^k dx_l W(x_l) \right. \\ & \left. \times \delta \left(x - h - \frac{1}{\beta} \sum_l \arctan \left[\tanh(\beta x_l) \tanh(\beta J_l) \right] \right) \right\rangle_{J_l, h}, \end{aligned} \quad (4.11)$$

cuja solução é obtida pelo algoritmo dinâmica de populações, como explicado anteriormente na seção 3.2. Tanto as interações de troca como campos locais são desordenados. Porém, para

valores finitos das médias das respectivas distribuições, esperamos encontrar uma fase FM. Logo, os parâmetros de ordem relevantes para esse modelo são: a magnetização

$$m = \sum_{\sigma_1 \dots \sigma_n} P(\boldsymbol{\sigma}) \sigma_\alpha = \int dx W(x) \tanh(\beta x) \quad (4.12)$$

e o parâmetro de ordem de VS

$$q = \sum_{\sigma_1 \dots \sigma_n} P(\boldsymbol{\sigma}) \sigma_\alpha \sigma_\beta = \int dx W(x) \tanh^2(\beta x). \quad (4.13)$$

4.2 Método de duas réplicas

Um ponto importante é avaliar a estabilidade da solução de SR. Na teoria com c infinito, a conhecida linha AT é localizada onde o auto-valor do *replicon* vai a zero, como discutimos no capítulo 2 seção 2.2.5. Porém, com c finito, a aplicação da mesma análise torna-se difícil. Então, para localizar a fronteira de estabilidade da solução SR, faremos uso do método de duas réplicas[110, 105].

$$\begin{aligned} W(x, y) = & \sum_k \frac{e^{-c} c^k}{k!} \left\langle \int \prod_{l=1}^k dx_l dy_l W(x_l, y_l) \right. \\ & \times \delta\left(x - h - \frac{1}{\beta} \sum_l \arctan\left[\tanh(\beta x_l) \tanh(\beta J_l)\right]\right) \\ & \left. \times \delta\left(y - h - \frac{1}{\beta} \sum_l \arctan\left[\tanh(\beta y_l) \tanh(\beta J_l)\right]\right) \right\rangle_{J_l, h}. \end{aligned} \quad (4.14)$$

Quando a solução de simetria de réplicas é estável, as duas réplicas são idênticas, logo a distribuição de duas réplicas é diagonal $W(x, y) = W(x)\delta(x - y)$. Quando a simetria de réplicas é instável, ergodicidade é quebrada, e a distribuição de duas réplicas não é mais diagonal. Para localizar a fronteira de estabilidade, é mais simples calcular o *overlap* entre duas réplicas,

$$q' = \int dx dy W(x, y) \tanh(\beta x) \tanh(\beta y). \quad (4.15)$$

Se a solução de $W(x, y)$ for diagonal a expressão para q' torna-se:

$$\begin{aligned} q' &= \int dx dy W(x) \delta(x - y) \tanh(\beta x) \tanh(\beta y) \\ &= \int dx W(x) \tanh^2(\beta x). \end{aligned} \quad (4.16)$$

Logo, $q' = q$ e portanto a simetria de réplicas é estável. No caso de uma distribuição $W(x, y)$ não-diagonal $q' \neq q$ e a solução de simetria de réplicas é instável. Nesta versão de dois sistemas replicados, q corresponde a correlação de uma réplica com ela mesma e q' corresponde a correlação entre as duas réplicas distintas.

4.3 Resultados

Os parâmetros de ordem são obtidos a partir das distribuições de campos (4.11) e (4.15). A distribuição (4.11) é calculada a partir da dinâmica de populações, como explicado no capítulo

3 seção 3.2. O calculo da distribuição (4.15) é feito da seguinte forma. Primeiramente, as populações x e y são criadas com condições iniciais diferentes, então, um número k é escolhido a partir de uma distribuição de Poisson. Em seguida, $l = 1 \dots k$ campos x_l e y_l , e J_l interações são sorteadas, respectivamente. Os campos são calculados a partir das funções

$$x = h + \frac{1}{\beta} \sum_l \arctan \left[\tanh(\beta x_l) \tanh(\beta J_l) \right] \quad (4.17)$$

e

$$y = h + \frac{1}{\beta} \sum_l \arctan \left[\tanh(\beta y_l) \tanh(\beta J_l) \right], \quad (4.18)$$

sendo que, os mesmos J_l com $l = 1 \dots k$ são utilizados para ambas populações. Finalmente, sorteia-se aleatoriamente um campo x e y e substitui-se pelos valores calculados nas equações (4.17) e (4.18), respectivamente. Exemplos da distribuição conjunta são mostrados na figura 4.1. No painel superior, vemos um exemplo da distribuição quando o sistema encontra-se numa fase paramagnética, onde a ergodicidade é preservada. Como explicado anteriormente, nessa fase a distribuição é diagonal. No painel abaixo da figura 4.1 a distribuição é não-diagonal, isso caracteriza a solução de SR como instável e, conseqüentemente, uma quebra não-trivial de ergodicidade. Para detectar a transição de fase VS-PM adotamos o critério da linha de AT coincidir com a transição.

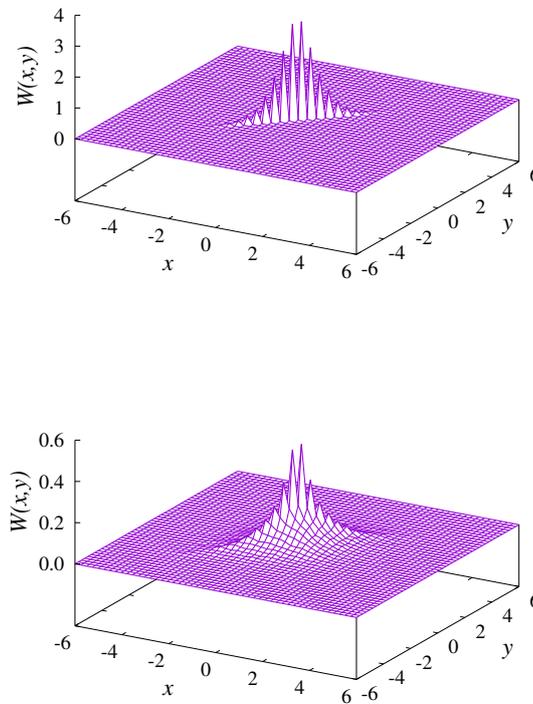


Figura 4.1: Distribuição conjunta para $c = 4$, $h_0/J = 0.2$ e $\Delta/J = 0.0$. Acima: $T/J = 0.8$, fase PM, distribuição diagonal onde SR é estável. Abaixo: $T/J = 0.6$, fase VS, distribuição não diagonal onde SR é instável.

Exemplos da variação dos parâmetros de ordem q e q' em função de T são mostrados na figura 4.2, para dois conjuntos de parâmetros (h_0, Δ, J_0) . O conjunto $(0,15, 0, 0,5)$ corresponde a um campo magnético local uniforme com acoplamentos aleatórios porém contendo uma componente ferromagnética ($J_0 = 0,5$), é mostrado em linhas cheias. O conjunto $(0,0, 2,0)$, onde ambos campo magnético local e acoplamentos possuem desordem, em linhas tracejadas. Isso mostra que o comportamento dos parâmetros de ordem é robusto, ou seja, existe para cenários completamente diferentes, desordenado ou uniforme. A separação de q e q' demarca uma quebra não-trivial de ergodicidade para valores de baixa T .

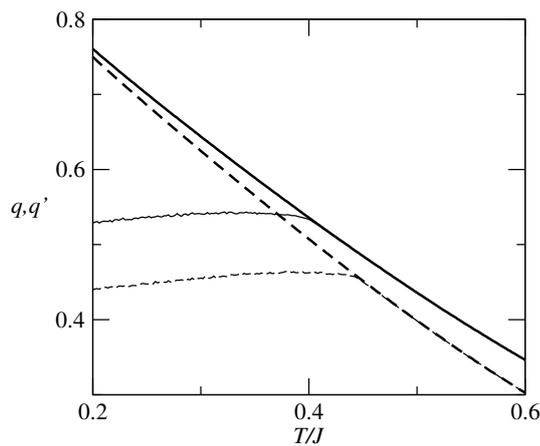


Figura 4.2: q (linhas grossas) e q' (linhas finas) contra T/J para $c = 4$, $h_0 = 0.15$, $\Delta = 0$, $J_0 = 0.5$ (linhas cheias) e $h_0 = 0$, $\Delta = 0.2$ e $J_0 = 0$ (linhas tracejadas).

Pelos diagramas de fase, podemos comparar os efeitos conjuntos de h_i e da conectividade média finita c . Na figura 4.3, são apresentados diagramas de fase no plano T/J versus J_0/J , para $c = 4$, $c = 8$, e o caso de conectividade infinita, na ausência de aleatoriedade dos campos locais $\Delta/J = 0$ e na presença $\Delta/J \neq 0$. Nas transições do tipo VS \rightarrow PM, m se mantém zero e q se torna igual a q' . Nas transições do tipo FM' \rightarrow FM, $m \neq 0$ e q torna-se igual a q' . Nas transições FM' \rightarrow VS q se mantém diferente de q' e m vai a zero e, nas transições FM-PM $q = q'$ e m vai a zero. Todas transições que ocorrem são de segunda ordem. A fase mista FM' corresponde a uma fase FM porém com quebra de ergodicidade não-trivial, onde $m \neq 0$, $q > 0$, $q' \neq 0$ e $q' \neq q$.

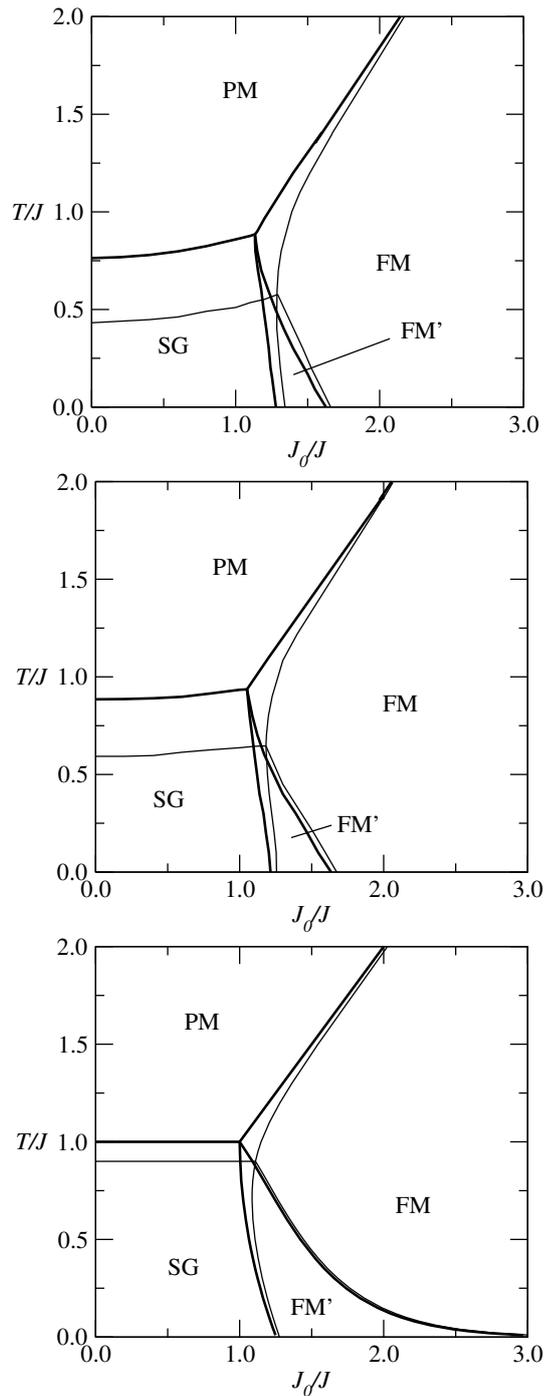


Figura 4.3: Diagramas de fase T/J contra J_0/J para $h_0/J = 0.0$, $\Delta/J = 0.0$ (linhas grossas) e $\Delta/J = 0.2$ (linhas finas), para $c = 4$ (topo), $c = 8$ (meio) e conectividade infinita (baixo).

O aumento de Δ/J faz com que as linhas de transição de fase tendam a se deslocar de uma forma que a superfície das fases menos entropicas (VS e FM') é reduzida. O efeito de aumento da conectividade média tende a deslocar as linhas de transição de fase, favorecendo a superfície das fases menos entropicas. As linha de transição de fase do tipo VS-PM são deslocadas para cima, as linhas do tipo VS-FM' e FM-PM se deslocam para esquerda e FM-FM' para baixo. Em comparação com o caso de c infinito, onde a linha de transição de fase FM' \rightarrow FM vai assintoticamente a $T = 0$ para J_0/J em sentido crescente e no caso de c finito essa linha de transição corta o eixo $T = 0$ num determinado valor de J_0/J . Isso significa que a conectividade

média finita favorece fases ergódicas em $T = 0$.

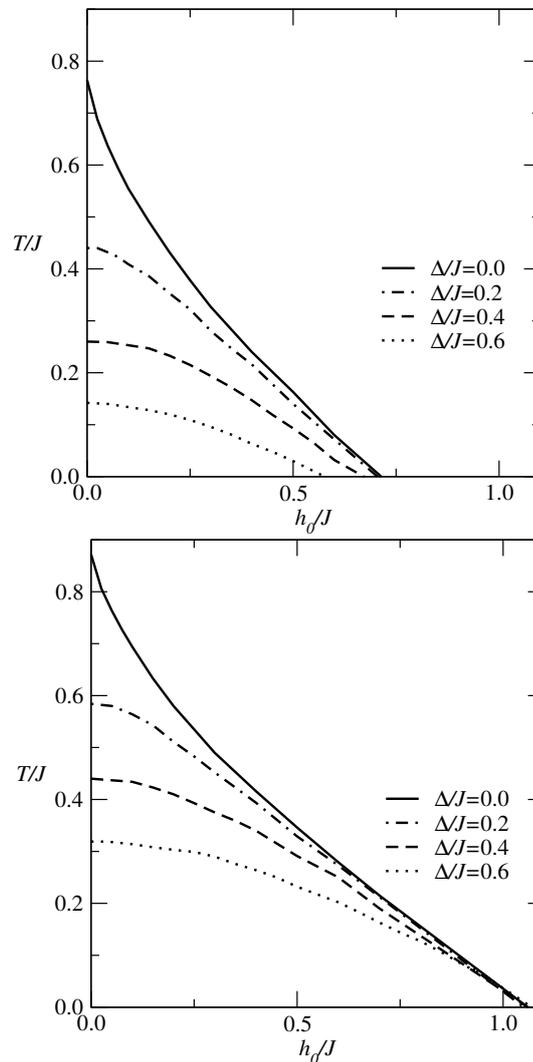


Figura 4.4: Topo: Diagramas de fase T/J versus h_0/J para $c = 4$ e $J_0 = 0$ para valores diferentes de Δ/J . Abaixo: o mesmo, mas para $c = 8$.

A seguir, analisamos somente as transições do tipo VS-PM, em diagramas no plano T/J versus h_0/J . As transições VS-PM são apresentadas na figura 4.4 para conectividades médias $c = 4$ e $c = 8$, para quatro valores de Δ/J . Tanto a componente uniforme h_0/J quanto a aleatória Δ/J desfavorecem a fase VS. A componente aleatória possui um efeito de supressão maior da fase VS para valores pequenos de h_0/J do que para valores grandes. A supressão de Δ/J sobre a fase VS é mais efetiva quanto menor c . Levando em consideração que a média J_0 e a variância J^2 dos acoplamentos são normalizadas por c , ou seja, $J'_0 = J_0/c$ e $J'^2 = J^2/c$. Esse resultado mostra que uma rede com c menor e, conseqüentemente interações de troca mais fortes possui uma fase VS menos robusta aos efeitos de supressão do campo aleatório do que uma rede mais conectada, porém com interações de troca mais fracas. Para qualquer valor de Δ/J , a fase VS é totalmente suprimida acima de um certo valor de h_0 , sendo que a supressão é sempre mais efetiva para valores de $c = 4$ do que $c = 8$.

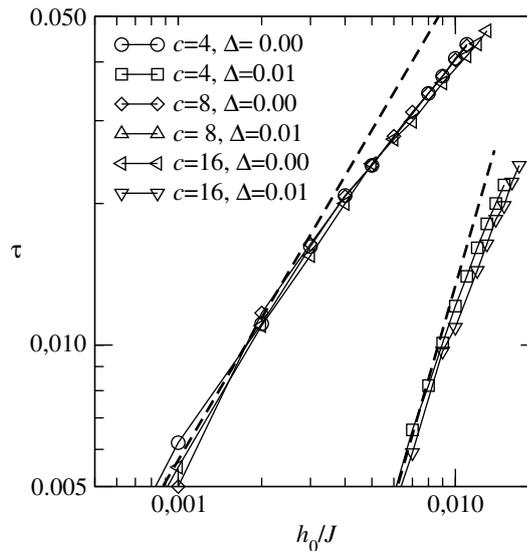


Figura 4.5: Temperatura reduzida contra amplitude do CA h_0/J para $\Delta/J = 0,00$ e $\Delta/J = 0,01$, para $c = 4$, $c = 8$ e $c = 16$. As linhas solidas servem apenas de guia. Na linha tracejada à esquerda a declividade é $\phi = 2$ e à direita a $\phi = 1$.

Outro ponto a ser notado na figura 4.4 é a mudança de concavidade das curvas para pequenos valores de h_0 , no *crossover* de VS para RF $\Delta/J = 0 \rightarrow \Delta/J > 0$. Para investigar em detalhes essa mudança, traçamos na figura 4.5 a temperatura reduzida $\tau = (T_0 - T)/J$ contra h_0/J para pequenos valores de h_0/J , onde T_0 é a temperatura de transição quando $h_0/J = 0$. Os eixos estão em escala logarítmica, as curvas são traçadas para dois valores de desordem do campo local $\Delta/J = 0,00$ e $\Delta/J = 0,01$, com conectividades variando entre $c = 4$ e $c = 16$. Supondo que no limite $h_0/J \rightarrow 0$, a temperatura reduzida pode ser expressa por uma lei de potência $\tau \sim (h_0/J)^{2/\phi}$. A declividade das curvas indica que para $\Delta/J = 0,00$ o expoente é $\phi = 2$ e em $\Delta/J = 0,01$ corresponde a $\phi = 1$. Esse resultado indica que existe um *crossover* entre os regimes VS e CA em $\Delta/J = 0,00$. Comparando com os resultados de campo médio da referência [109], onde, no regime dominado por VS, o valor obtido para $\Delta/J = 0,00$ é $\phi = 3$ e, no regime dominado por CA, $\Delta/J > 0,00$ é $\phi = 1$. Especulamos que o valor $\phi = 3$ é uma particularidade do caso $c \rightarrow \infty$, como podemos observar pela figura 4.5 as curvas para c finito se sobrepõem, apontando que $\phi = 2$ seja robusto para c finito. Voltaremos a esse ponto mais adiante.

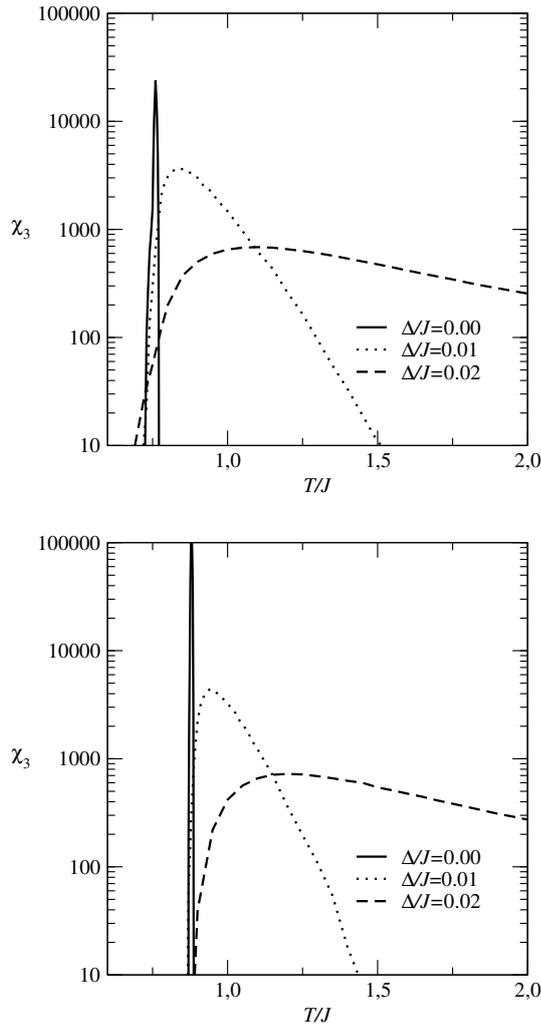


Figura 4.6: Topo: Susceptibilidade não-linear contra temperatura para $c = 4$ e alguns valores de Δ/J . Abaixo: o mesmo, porém para $c = 8$.

Para complementar os resultados calculamos a susceptibilidade não-linear

$$\chi_3 = \frac{\partial^3 m}{\partial h_0^3} \Big|_{T/J, h_0/J=0}. \quad (4.19)$$

No regime VS($\Delta/J = 0$), uma assinatura característica da transição VS-PM é a divergência em χ_3 , que também coincide com a linha AT [56]. Na figura 4.6 calculamos a susceptibilidade não-linear em função de T/J para valores pequenos de Δ/J e também para zero. Para $\Delta/J = 0$, podemos verificar que existem divergências em χ_3 nas conectividades $c = 4$ e $c = 8$, os valores de T onde a divergência ocorrem coincidem com os valores de T_c previstos pelo método de duas réplicas. Para $\Delta/J > 0$ aparecem picos arredondados, logo a assinatura característica da transição VS-PM desaparece para $\Delta/J > 0$. Contudo, ainda podemos localizar T_c pelo método de duas réplicas, marcando o ponto onde q torna-se diferente de q' . Com o aumento de Δ/J , os picos tornam-se ainda mais arredondados e também deslocam-se para T mais altas.

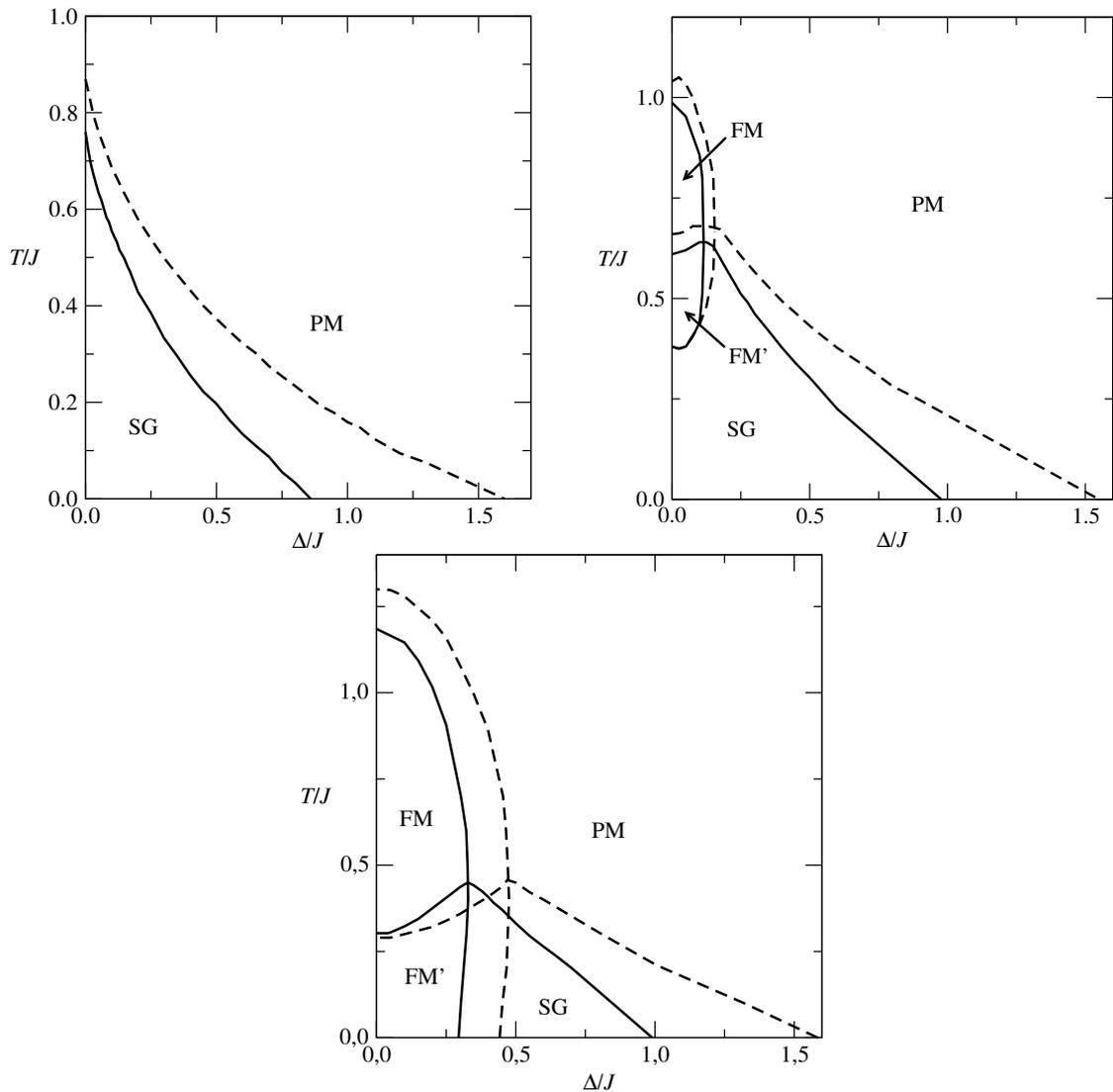


Figura 4.7: Diagramas de fase T/J contra Δ/J para $h_0 = 0$. Topo esquerda: $J_0/J = 0$; $c = 4$ (linhas solidas) e $c = 8$ (linhas tracejadas). Topo direita: $J_0/J = 1.22$ e $c = 4$ (linhas solidas); $J_0/J = 1.15$ e $c = 8$ (linhas tracejadas). Abaixo: $J_0/J = 1.4$; $c = 4$ (linhas solidas) e $c = 8$ (linhas tracejadas). Todas as transições de fase são de segunda ordem.

Na figura 4.7, traçamos diagramas de fase no plano T/J contra Δ/J , com $h_0/J = 0$ para valores fixos de J_0/J . O diagrama de fase obtido no painel do topo à esquerda, onde $J_0/J = 0$, serve de molde para outros diagramas de fase, onde a parte uniforme dos acoplamentos é muito fraca. Logo, fases FM não podem estar presentes. No painel do topo à direita, escolhemos valores de J_0/J onde existem reentrâncias. Para $c = 4$, a reentrância ocorre na vizinhança do ponto $J_0/J = 1,22$ e, para $c = 8$, na vizinhança de $J_0/J = 1,15$. Nesses valores, J_0/J é suficientemente grande para permitir a existência das fases FM e FM', embora a fase VS permaneça como a fase mais ordenada em $T = 0$. No painel de baixo, mostramos diagramas de fase T/J contra Δ/J , o mesmo valor $J_0/J = 1,4$ é utilizado em $c = 4$ e $c = 8$. As áreas das fases FM e FM' são expandidas, sendo que a fase mista FM' estende-se até $T = 0$. Para os valores de conectividade utilizados, não houve alteração significativa dos diagramas nesse plano, e todas transições encontradas são de segunda ordem. As fases FM e FM' são suprimidas em primeiro lugar à medida que Δ/J é aumentado. A linha de transição VS-PM decresce

monotonamente até cruzar o eixo $T/J = 0$. Para valores altos de Δ/J , a única fase restante é a PM.

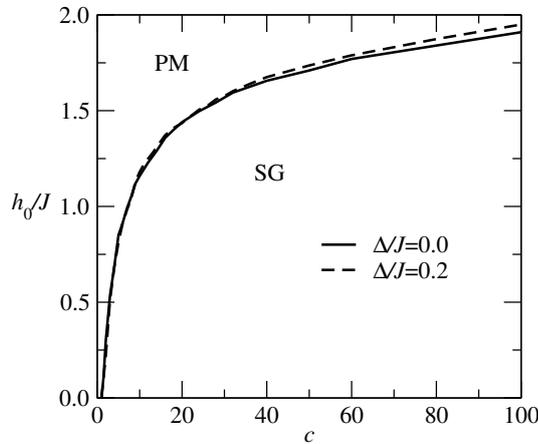


Figura 4.8: Fronteira h_0/J da fase VS contra c em $T = 0$, para $\Delta/J = 0.0$ e $\Delta/J = 0.2$. Abaixo e acima das linhas estão localizadas as fases VS (não-ergódica) e PM (ergódica), respectivamente.

Ao comparar nossos resultados com aqueles da rede com conectividade infinita é necessário ressaltar alguns pontos. No caso de c finito, a linha de transição FM'-FM intercepta o eixo $T/J = 0$ em algum valor de J_0/J . Se o método de duas réplicas localiza corretamente o que é o equivalente da linha AT para sistemas com conectividade finita então os resultados devem se aproximar dos da rede completamente conexa à medida que o c é aumentado. Pelos resultados que obtivemos, aparentemente isso tende a ocorrer, porém, para $T = 0$, em valores elevados de h_0/J e J_0/J , a fase PM está presente, ao contrário do que ocorre no caso $c \rightarrow \infty$. Note que essa fase PM pode conter $m \neq 0$. É possível existência de magnetização induzida pela presença de uma componente uniforme do campo. Contudo isso indica a presença de uma fase ergódica em $T = 0$ na rede com conectividade finita. Na figura 4.8, mostramos como a região pertencente à fase ergódica se modifica em função da conectividade. Como pode-se observar, para $c \rightarrow \infty$, o valor de h_0/J converge monotonamente, porém muito lentamente, para um valor em que a fase PM é completamente suprimida em $T = 0$.

4.4 Observações Finais

Nesse capítulo investigamos um sistema onde coexistem tanto VS e CA. Para isso, estudamos o modelo RRFIM [111], onde as interações de troca entre spins, bem como o campo externo local, são variáveis aleatórias dadas por uma distribuição Gaussiana. Nosso objetivo de estudar esse modelo num grafo aleatório é, usando a conectividade como um parâmetro controlável, investigar as diferenças com a teoria de campo médio [94]. Para analisar a estabilidade da fase SR, utilizamos uma nova metodologia e aplicamos o método de duas réplicas. Com isso, podemos obter a linha AT em sistemas com conectividade finita. Essa ferramenta foi utilizada anteriormente em modelos sem a presença de CA. Consideramos que esse trabalho possibilita uma discussão mais ampla, podendo descrever a quebra não-trivial de ergodicidade na fase VS através da linha AT num sistema em que podemos controlar a conectividade.

Através do algoritmo de dinâmica de populações, obtivemos a distribuição de campos locais, permitindo o cálculo dos parâmetros de ordem. Então, diagramas de fase para T em

função de J_0 e T em função h_0 foram obtidos, para valores de variância de CA Δ e para dois valores de conectividade $c = 4$ e $c = 8$. As escalas de energia foram normalizadas em função da variância da distribuição de interações de troca J . As diferenças nos digramas varrendo c foram quantitativas. Os resultados mostram que a área ocupada por fases menos entrópicas cresce com o aumento da conectividade, enquanto fases mais entrópicas tem sua área reduzida. Isso significa que a conectividade favorece fases mais ordenadas, levando em consideração que as contantes de acoplamento foram devidamente normalizadas por c . Mostramos também que quando a conectividade é finita, a linha AT cruza os eixos J_0 e h_0 em $T/J = 0$, ou seja, a fase VS existe como um estado fundamental apenas em um certo intervalo de J_0 e h_0 . Isso também significa que, mesmo que o sistema possua desordem congelada, quando a conectividade é finita, existe uma região em $T/J = 0$ onde a ergodicidade não é quebrada, acima de um certo valor h_0/J , para quaisquer valores de Δ/J . No limite de conectividade alta, há indícios de que a teoria de campo médio, ou seja $c \rightarrow \infty$, é recuperada, particularmente no que diz respeito a linha AT.

Para concluir, um dos principais resultados desse trabalho foi a investigação do *crossover* entre os regimes VS e CA. Na teoria de campo médio, esse *crossover* é descrito pela temperatura reduzida $\tau \equiv T_0 - T \sim h_0^{2/\phi}$ (onde T_0 representa a temperatura de transição na ausência de campos). Na teoria para $c \rightarrow \infty$ os expoentes $\phi = 3$ e $\phi = 1$ correspondem aos regimes VS e CA, respectivamente. Nesse trabalho, encontramos que para h_0 pequeno, $\tau \sim h_0$ para $\Delta = 0$ e, $\tau \sim h_0^2$ para Δ finito. Ou seja, os expoentes $\phi = 2$ e $\phi = 1$ nos regimes VS e CA, respectivamente.

Capítulo 5

Frustração Geométrica, Aglomerados de Spin em grafos aleatórios

Nesse capítulo, estudamos, conjuntamente, os efeitos de frustração geométrica e desordem num modelo de aglomerados de spins. A rede de conexões entre os aglomerados é o grafo de ER. As interações de troca desordenadas entre aglomerados são feitas através do spin total. Essa aproximação equivale a considerar que os aglomerados estão muito distantes [112, 113, 114]. Seguindo a discussão do capítulo 2, consideramos a presença de frustração geométrica, escolhendo uma rede de aglomerados triangulares com interações internas antiferromagnéticas. Para contrastar e estabelecer uma comparação tratamos, também, de uma rede de aglomerados tetraedrais com interações antiferromagnéticas que consiste no caso onde não há frustração geométrica. Em publicações recentes [115, 116], os autores investigam a capacidade da frustração geométrica de estabilizar uma fase de VS para um sistema de aglomerados de formato da rede de Kagome, com interações antiferromagnéticas intra-aglomerado e interações desordenadas entre aglomerados. Os resultados mostram que, com a presença de frustração geométrica e adição de pouca desordem, se pode estabilizar uma fase de vidro de spin de aglomerados (VSA), onde, em vez de spins, são os aglomerados de spins que congelam em direções aleatórias, sem exibir ordenamento de longo alcance. Este trabalho tem como principal objetivo estudar o papel da frustração geométrica em conjunto com interações desordenadas, e tipos de fases que podem existir numa rede com conectividade finita, bem como determinar o papel da conectividade nessas transições.

5.1 Modelo de Aglomerados

Estudamos um sistema de $N_{cl} \rightarrow \infty$ aglomerados de spins, cada um contendo p spins podendo assumir os estados $\sigma_{i\mu} = \pm \frac{1}{2}$, onde $\mu = 1 \dots N_{cl}$ é o índice de aglomerado e $i = 1 \dots p$ é o índice de spin interno de um determinado aglomerado. Os aglomerados interagem entre si através do spin total [117, 118], definido por

$$\sigma_{\mu} = \sum_i \sigma_{i\mu}, \quad (5.1)$$

sendo o número de possíveis estados do spin total $n_s = p + 1$, com $\sigma_{\mu} = \{p/2, p/2 - 1, \dots, -p/2\}$. Essa aproximação equivale a considerar que a distância entre os aglomerados de spins é muito maior do que o tamanho dos aglomerados, logo, as interações inter-aglomerado

são independentes das interações intra-aglomerado. As interações $J_{\mu\nu}$ entre aglomerados são escolhidas a partir de uma distribuição Gaussiana de média zero e variância J^2 . O Hamiltoniano deste sistema é dado por

$$H(\boldsymbol{\sigma}) = -\frac{1}{\sqrt{c}} \sum_{\mu < \nu} c_{\mu\nu} J_{\mu\nu} \sigma_\mu \sigma_\nu - \theta \sum_{\mu} \sigma_\mu + \sum_{\mu} H_0(\boldsymbol{\sigma}_\mu), \quad (5.2)$$

onde $\boldsymbol{\sigma} \equiv \{\sigma_{\mu i}\}$ representa o estado de todo sistema e $\boldsymbol{\sigma}_\mu$ é o vetor de estado de um aglomerado μ e θ é um campo externo uniforme acoplado ao spin total de cada aglomerado. O termo $H_0(\boldsymbol{\sigma}_\mu) = -\sum_{i < j} J_{ij} \sigma_{\mu i} \sigma_{\mu j}$ está relacionado às interações intra-aglomerado. Nos cálculos que seguem, ressaltamos que nenhuma restrição específica sobre os acoplamentos J_{ij} foi feita. As interações $c_{\mu\nu}$ indicam se dois aglomerados μ e ν estão conectados ($c_{\mu\nu} = 1$) ou desconectados ($c_{\mu\nu} = 0$), sendo escolhidas a partir da distribuição de probabilidade

$$p(c_{\mu\nu}) = \frac{c}{N_{cl}} \delta_{c_{\mu\nu},1} + \left(1 - \frac{c}{N_{cl}}\right) \delta_{c_{\mu\nu},0}, \quad (5.3)$$

onde a constante c representa a conectividade média. Para obtermos as propriedades termodinâmicas, a média da energia livre sobre as realizações da desordem deve ser calculada. Para isso, utilizamos o procedimento de réplicas, que consiste em aplicar a identidade

$$f(\beta) = -\lim_{N_{cl} \rightarrow \infty} \frac{1}{\beta N_{cl}} \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{n} \log \langle Z^n \rangle. \quad (5.4)$$

Note que, nesse modelo, o limite termodinâmico é tomado sobre o número de aglomerados N_{cl} ao passo que p é finito. Tomando a média sobre $c_{\mu\nu}$, no limite $c/N_{cl} \rightarrow 0$, a função de partição replicada fica:

$$\langle Z^n \rangle = \sum_{\boldsymbol{\sigma}_1 \cdots \boldsymbol{\sigma}_n} \exp \left[-\beta \sum_{\alpha\mu} H_0(\boldsymbol{\sigma}_{\mu\alpha}) + \beta\theta \sum_{\alpha\mu} \sigma_{\mu\alpha} + \frac{c}{2N_{cl}} \sum_{\mu \neq \nu} \left\langle e^{\frac{\beta}{\sqrt{c}} J_{\mu\nu} \sum_{\alpha} \sigma_{\mu\alpha} \sigma_{\nu\alpha}} - 1 \right\rangle_{J_{\mu\nu}} \right]. \quad (5.5)$$

Para reduzir ao problema de um aglomerado, introduzimos as funções de ordem

$$P(\mathbf{s}) = \frac{1}{N_{cl}} \sum_{\mu} \delta_{\mathbf{s}\boldsymbol{\sigma}_\mu}, \quad (5.6)$$

que representam a probabilidade do sistema encontrar-se em um certo vetor de estado de réplica \mathbf{s} , onde $\mathbf{s} \equiv \{s_{i\alpha}\}$. Introduzindo a equação (5.6) na (5.5), obtém-se

$$\langle Z^n \rangle = \int \prod_{\mathbf{s}} dP(\mathbf{s}) d\hat{P}(\mathbf{s}) \exp N_{cl} \left\{ \sum_{\mathbf{s}} \hat{P}(\mathbf{s}) P(\mathbf{s}) + \log \sum_{\mathbf{s}} \exp \left[-\beta \sum_{\alpha} H_0(\mathbf{s}_\alpha) + \beta\theta \sum_{\alpha} s_\alpha - \hat{P}(\mathbf{s}) \right] + \frac{c}{2} \sum_{\mathbf{s}\mathbf{s}'} P(\mathbf{s}) P(\mathbf{s}') \left\langle e^{\frac{\beta J}{\sqrt{c}} \sum_{\alpha} s_\alpha s'_\alpha} - 1 \right\rangle_J \right\}. \quad (5.7)$$

As variáveis auxiliares $\hat{P}(\mathbf{s})$ aparecem pelo uso da representação integral da delta de Dirac. A variável $s_\alpha = \sum_{i=1}^p s_{\alpha i}$ representa o spin total do aglomerado replicado. No limite $N_{cl} \rightarrow \infty$, a integral, na equação (5.7), pode ser resolvida pelo método do ponto de sela. Eliminando as variáveis auxiliares $\hat{P}(\mathbf{s})$ através das equações de ponto de sela, a média da energia livre por aglomerado de spin fica:

$$f(\beta, \theta) = -\lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{\beta n} \text{Extr} \left\{ -\frac{c}{2} \sum_{\mathbf{s}\mathbf{s}'} P(\mathbf{s})P(\mathbf{s}') \left\langle e^{\frac{\beta J}{\sqrt{c}} \sum_{\alpha} s_{\alpha} s'_{\alpha}} - 1 \right\rangle_J \right. \\ \left. + \log \sum_{\mathbf{s}} \exp \left[-\beta \sum_{\alpha} H_0(\mathbf{s}_{\alpha}) + \beta \theta \sum_{\alpha} s_{\alpha} + c \sum_{\mathbf{s}'} P(\mathbf{s}') \left\langle e^{\frac{\beta J}{\sqrt{c}} \sum_{\alpha} s_{\alpha} s'_{\alpha}} - 1 \right\rangle_J \right] \right\}, \quad (5.8)$$

onde a operação Extr significa tomar o extremo da expressão entre chaves com relação a $P(\mathbf{s})$. Ou seja, $f(\beta, \theta)$ é o valor da energia livre quando $P(\mathbf{s})$ obedece as equações de ponto de sela, que determinam a seguinte forma para $P(\mathbf{s})$

$$P(\mathbf{s}) = \frac{\exp \left[-\beta \sum_{\alpha} H_0(\mathbf{s}_{\alpha}) + \beta \theta \sum_{\alpha} s_{\alpha} + c \sum_{\mathbf{s}'} P(\mathbf{s}') \left\langle e^{\frac{\beta J}{\sqrt{c}} \sum_{\alpha} s_{\alpha} s'_{\alpha}} - 1 \right\rangle_J \right]}{\sum_{\mathbf{s}'} \exp \left[-\beta \sum_{\alpha} H_0(\mathbf{s}'_{\alpha}) + \beta \theta \sum_{\alpha} s'_{\alpha} + c \sum_{\mathbf{s}''} P(\mathbf{s}'') \left\langle e^{\frac{\beta J}{\sqrt{c}} \sum_{\alpha} s'_{\alpha} s''_{\alpha}} - 1 \right\rangle_J \right]}. \quad (5.9)$$

Procuramos soluções que satisfaçam o *Ansatz* de simetria de réplicas. Como as interações são entre o spin total de cada aglomerado, o *Ansatz* assume a forma

$$P(\mathbf{s}) = \int d\mathbf{h} W(\mathbf{h}) \frac{\exp \left[-\beta \sum_{\alpha} H_0(\mathbf{s}_{\alpha}) + \beta \mathbf{h} \cdot \sum_{\alpha} \mathbf{M}(s_{\alpha}) \right]}{\left\{ \sum_{\mathbf{s}} \exp \left[-\beta H_0(\mathbf{s}) + \beta \mathbf{h} \cdot \mathbf{M}(\mathbf{s}) \right] \right\}^n}. \quad (5.10)$$

Os vetores \mathbf{h} e $\mathbf{M}(s) \equiv (s, s^2, \dots, s^p)$ possuem p componentes. Aqui, os sobrescritos representam potências. O desenvolvimento de como o *Ansatz* deve ser construído está contido no apêndice A. Os parâmetros de ordem são obtidos através da distribuição de vetores de campo $W(\mathbf{h})$. Aqui apresentamos a expressão geral

$$W(\mathbf{h}) = \sum_k P_k \int \prod_{l=1}^k d\mathbf{h}_l W(\mathbf{h}_l) \left\langle \prod_{i=1}^p \delta \left(h_i - \sum_l \phi_i(\mathbf{h}_l, J_l) \right) \right\rangle_{J_l}, \quad (5.11)$$

o desenvolvimento está em detalhes no Apêndice B. Os campos h_i dentro da delta de Dirac correspondem às componentes de \mathbf{h} , e $\phi_i(\mathbf{h}_l, J_l)$ são funções que dependem das interações locais e do número de spins de cada aglomerado, onde $i = 1 \dots p$. Os parâmetros de ordem relevantes para esse modelo são a magnetização

$$m = \int d\mathbf{h} W(\mathbf{h}) \langle s \rangle, \quad (5.12)$$

o parâmetro de ordem de VS

$$q = \int d\mathbf{h} W(\mathbf{h}) \langle s^2 \rangle \quad (5.13)$$

e o número de ocupação de estado de um aglomerado

$$Q = \int d\mathbf{h} W(\mathbf{h}) \langle s^2 \rangle. \quad (5.14)$$

Nas equações acima, usamos as médias térmicas

$$\langle s \rangle = \frac{\sum_{\mathbf{s}} s \exp \left[-\beta H_0(\mathbf{s}) + \beta \mathbf{h} \cdot \mathbf{M}(\mathbf{s}) \right]}{\sum_{\mathbf{s}} \exp \left[-\beta H_0(\mathbf{s}) + \beta \mathbf{h} \cdot \mathbf{M}(\mathbf{s}) \right]}, \quad (5.15)$$

e

$$\langle s^2 \rangle = \frac{\sum_{\mathbf{s}} s^2 \exp \left[-\beta H_0(\mathbf{s}) + \beta \mathbf{h} \cdot \mathbf{M}(\mathbf{s}) \right]}{\sum_{\mathbf{s}} \exp \left[-\beta H_0(\mathbf{s}) + \beta \mathbf{h} \cdot \mathbf{M}(\mathbf{s}) \right]}. \quad (5.16)$$

A energia livre por aglomerado é obtida inserindo o *Ansatz* de SR na Eq. (5.8) e tomando o limite $n \rightarrow 0$

$$\begin{aligned} f(\beta, \theta) &= \frac{c}{2\beta} \int d\mathbf{h} d\mathbf{h}' W(\mathbf{h}) W(\mathbf{h}') \quad (5.17) \\ &\times \frac{\left\langle \sum_{\mathbf{s}\mathbf{s}'} \exp \left[-\beta H_0(\mathbf{s}) + \beta \mathbf{h} \cdot \mathbf{M}(\mathbf{s}) - \beta H_0(\mathbf{s}') + \beta \mathbf{h}' \cdot \mathbf{M}(\mathbf{s}') + \beta \frac{J}{\sqrt{c}} \mathbf{s}\mathbf{s}' \right] \right\rangle_J}{\sum_{\mathbf{s}} \exp \left[-\beta H_0(\mathbf{s}) + \beta \mathbf{h} \cdot \mathbf{M}(\mathbf{s}) \right] \sum_{\mathbf{s}'} \exp \left[-\beta H_0(\mathbf{s}') + \beta \mathbf{h}' \cdot \mathbf{M}(\mathbf{s}') \right]} \\ &- \frac{1}{\beta} \sum_k P_k \int \prod_l d\mathbf{h}_l W(\mathbf{h}_l) \log \sum_{\mathbf{s}} \exp \left[-\beta H_0(\mathbf{s}) + \beta \theta \mathbf{s} \right] \\ &\times \prod_l \frac{\left\langle \sum_{\mathbf{s}_l} \exp \left[-\beta H_0(\mathbf{s}_l) + \beta \mathbf{h}_l \cdot \mathbf{M}(\mathbf{s}_l) + \beta \frac{J_l}{\sqrt{c}} \mathbf{s}\mathbf{s}_l \right] \right\rangle_{J_l}}{\sum_{\mathbf{s}} \exp \left[-\beta H_0(\mathbf{s}) + \beta \mathbf{h}_l \cdot \mathbf{M}(\mathbf{s}) \right]}. \end{aligned}$$

5.1.1 Susceptibilidade linear

A adição do termo de campo θ permite obter a susceptibilidade magnética linear a partir da energia livre, ou seja:

$$\chi = (\partial m / \partial \theta)_{\theta \rightarrow 0} = -(\partial^2 f / \partial \theta^2)_{\theta \rightarrow 0}. \quad (5.18)$$

Calculando a primeira derivada na equação (5.8)

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial \theta} &= -\lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{n} \\ &\times \frac{\sum_{\mathbf{s}} \sum_{\alpha} s_{\alpha} \exp \left[-\beta \sum_{\alpha} H_0(\mathbf{s}_{\alpha}) + \beta \theta \sum_{\alpha} s_{\alpha} + c \sum_{\mathbf{s}'} P(\mathbf{s}') \left\langle e^{\frac{\beta J}{\sqrt{c}} \sum_{\alpha} s_{\alpha} s'_{\alpha}} - 1 \right\rangle_J \right]}{\sum_{\mathbf{s}} \exp \left[-\beta \sum_{\alpha} H_0(\mathbf{s}_{\alpha}) + \beta \theta \sum_{\alpha} s_{\alpha} + c \sum_{\mathbf{s}'} P(\mathbf{s}') \left\langle e^{\frac{\beta J}{\sqrt{c}} \sum_{\alpha} s_{\alpha} s'_{\alpha}} - 1 \right\rangle_J \right]}. \quad (5.19) \end{aligned}$$

Calculando a segunda derivada

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 f}{\partial \theta^2} &= - \lim_{n \rightarrow 0} \frac{\beta}{n} \\ &\times \frac{\sum_{\mathbf{s}} (\sum_{\alpha} s_{\alpha})^2 \exp \left[-\beta \sum_{\alpha} H_0(\mathbf{s}_{\alpha}) + \beta \theta \sum_{\alpha} s_{\alpha} + c \sum_{\mathbf{s}'} P(\mathbf{s}') \left\langle e^{\frac{\beta J}{\sqrt{c}} \sum_{\alpha} s_{\alpha} s'_{\alpha}} - 1 \right\rangle_J \right]}{\sum_{\mathbf{s}} \exp \left[-\beta \sum_{\alpha} H_0(\mathbf{s}_{\alpha}) + \beta \theta \sum_{\alpha} s_{\alpha} + c \sum_{\mathbf{s}'} P(\mathbf{s}') \left\langle e^{\frac{\beta J}{\sqrt{c}} \sum_{\alpha} s_{\alpha} s'_{\alpha}} - 1 \right\rangle_J \right]} \\ &+ \lim_{n \rightarrow 0} \frac{\beta}{n} \\ &\times \frac{\sum_{\mathbf{s}} \sum_{\alpha} s_{\alpha} \exp \left[-\beta \sum_{\alpha} H_0(\mathbf{s}_{\alpha}) + \beta \theta \sum_{\alpha} s_{\alpha} + c \sum_{\mathbf{s}'} P(\mathbf{s}') \left\langle e^{\frac{\beta J}{\sqrt{c}} \sum_{\alpha} s_{\alpha} s'_{\alpha}} - 1 \right\rangle_J \right]}{\sum_{\mathbf{s}} \exp \left[-\beta \sum_{\alpha} H_0(\mathbf{s}_{\alpha}) + \beta \theta \sum_{\alpha} s_{\alpha} + c \sum_{\mathbf{s}'} P(\mathbf{s}') \left\langle e^{\frac{\beta J}{\sqrt{c}} \sum_{\alpha} s_{\alpha} s'_{\alpha}} - 1 \right\rangle_J \right]} \\ &\times \frac{\sum_{\mathbf{s}} \sum_{\alpha} s_{\alpha} \exp \left[-\beta \sum_{\alpha} H_0(\mathbf{s}_{\alpha}) + \beta \theta \sum_{\alpha} s_{\alpha} + c \sum_{\mathbf{s}'} P(\mathbf{s}') \left\langle e^{\frac{\beta J}{\sqrt{c}} \sum_{\alpha} s_{\alpha} s'_{\alpha}} - 1 \right\rangle_J \right]}{\sum_{\mathbf{s}} \exp \left[-\beta \sum_{\alpha} H_0(\mathbf{s}_{\alpha}) + \beta \theta \sum_{\alpha} s_{\alpha} + c \sum_{\mathbf{s}'} P(\mathbf{s}') \left\langle e^{\frac{\beta J}{\sqrt{c}} \sum_{\alpha} s_{\alpha} s'_{\alpha}} - 1 \right\rangle_J \right]} \end{aligned} \quad (5.20)$$

Levando em consideração apenas o segundo termo da equação (5.21), podemos reescrevê-lo como

$$\% = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{\beta}{n} \left(\sum_{\alpha} \sum_{\mathbf{s}} s_{\alpha} P(\mathbf{s}) \right)^2, \quad (5.22)$$

Porém, esse termo está relacionado à magnetização

$$m = \sum_{\mathbf{s}} s_{\alpha} P(\mathbf{s}). \quad (5.23)$$

Então, podemos reescrever a equação (5.22) como

$$\% = \lim_{n \rightarrow 0} \beta n m^2. \quad (5.24)$$

Tomando o limite $n \rightarrow 0$ esse termo desaparece. Agora, voltamos a atenção ao primeiro termo da equação (5.21)

$$\frac{\partial^2 f}{\partial \theta^2} = - \lim_{n \rightarrow 0} \frac{\beta}{n} \left(\sum_{\mathbf{s}} \sum_{\alpha} s_{\alpha}^2 P(\mathbf{s}) + \sum_{\mathbf{s}} \sum_{\alpha \neq \beta} s_{\alpha} s_{\beta} P(\mathbf{s}) \right) \quad (5.25)$$

Reescrevendo a equação (5.25) em termos dos parâmetros de ordem,

$$\frac{\partial^2 f}{\partial \theta^2} = - \lim_{n \rightarrow 0} \frac{\beta}{n} (nQ + n(n-1)q). \quad (5.26)$$

Tomando o limite e utilizando novamente a equação (5.18)

$$\chi = - \frac{\partial^2 f}{\partial h^2} = \beta(Q - q). \quad (5.27)$$

A equação (5.27) nos permite calcular a susceptibilidade magnética diretamente pelos parâmetros de ordem.

Estabilidade da solução de SR

A estabilidade da solução de SR é obtida da mesma forma que utilizamos na seção 4.2. O Hamiltoniano para os dois sistemas acoplados pela mesma desordem fica

$$H(\boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\tau}) = -\frac{1}{2\sqrt{c}} \sum_{\mu \neq \nu} c_{\mu\nu} J_{\mu\nu} \sigma_\mu \sigma_\nu - \frac{1}{2\sqrt{c}} \sum_{\mu \neq \nu} c_{\mu\nu} J_{\mu\nu} \tau_\mu \tau_\nu - \theta \sum_{\mu} \sigma_\mu - \theta \sum_{\mu} \tau_\mu + \sum_{\mu} H_0(\sigma_\mu) + \sum_{\mu} H_0(\tau_\mu). \quad (5.28)$$

A equação recursiva para distribuição de duas réplicas dos vetores de campo local é

$$W(\mathbf{h}, \mathbf{h}') = \sum_k P_k \int \prod_{l=1}^k d\mathbf{h}_l d\mathbf{h}'_l W(\mathbf{h}_l) W(\mathbf{h}'_l) \times \left\langle \prod_{i=1}^p \left[\delta\left(h_i - \sum_l \phi_i(\mathbf{h}_l, J_l)\right) \delta\left(h'_i - \sum_l \phi_i(\mathbf{h}'_l, J_l)\right) \right] \right\rangle_{J_l}. \quad (5.29)$$

A solução é estável com SR se a distribuição é diagonal

$$W(\mathbf{h}, \mathbf{h}') = W(\mathbf{h}) \delta(\mathbf{h} - \mathbf{h}') \quad (5.30)$$

e instável se não diagonal. A linha AT é calculada a partir da correlação das magnetizações entre as duas réplicas distintas,

$$q' = \int d\mathbf{h} d\mathbf{h}' W(\mathbf{h}, \mathbf{h}') \langle s \rangle(\mathbf{h}) \langle s \rangle(\mathbf{h}'). \quad (5.31)$$

Se a solução de SR é estável então $q' = q$. O aparecimento de uma bifurcação entre q e q' aponta a localização da linha AT.

5.2 Resultados e discussões

Estudamos aglomerados com acoplamentos internos uniformes $J_{ij} = J_0/J$, onde adotamos o desvio padrão da Gaussiana J como a escala de energia. Entretanto, o formalismo derivado permite tratar o caso mais geral. Nosso objetivo é analisar o papel da FG na estabilização da fase VS. Para isso, escolhemos duas geometrias: um triângulo com $p = 3$ spins e um tetraedro com $p = 4$ spins, como mostrado nas figuras 5.1(a) e 5.1(b). Como queremos comparar a presença e a ausência de FG, adotamos que todas as interações internas nos aglomerados são AF, ou seja $J_0/J < 0$. Essa escolha de J_{ij} resulta em FG nos aglomerados triangulares e nos tetraedros a FG é inexistente. Analisamos, também, a relação entre FG dos aglomerados e a conectividade finita nas interações inter-aglomerado.

Os observáveis são determinados pelas distribuições de campos (5.11) e (5.29) e para calculá-las, utilizamos a dinâmica de populações, como já descrita na seção 3.2. Explicaremos novamente o procedimento para esse caso dos aglomerados. Cria-se uma população de tamanho \mathcal{N} de vetores de campo de p dimensões com uma certa condição inicial. Após o sorteio de k através de uma distribuição de Poisson com média c , k vetores de campo \mathbf{h}_l e acoplamentos inter-aglomerado J_l são escolhidos de forma aleatória, onde $l = 1 \dots k$. A seguir, cada componente do vetor de campo é calculada a partir da soma $\sum_l \phi_i(\mathbf{h}_l, J_l)$. Por último, outro vetor de campo da população é escolhido de forma aleatória e às suas componentes são atribuídos os valores da

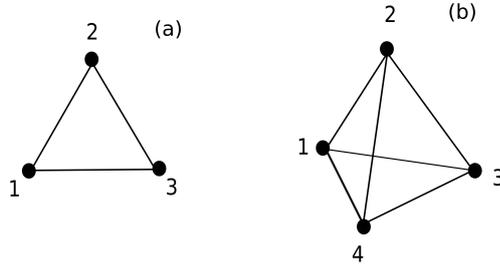


Figura 5.1: Geometria dos aglomerados (a) Triangular (b) Tetraédrica.

soma $\sum_l \phi_i(\mathbf{h}_l, J_l)$, previamente calculados. Esse processo é repetido até que a convergência das populações de campos seja alcançada.

Para visualizar as distribuições de vetores de campos locais, é conveniente definir as distribuições marginais

$$w(h_i) = \int \prod_{j \neq i} dh_j W(\mathbf{h}), \quad (5.32)$$

onde j varre todas as componentes do campo menos a i -ésima. Exemplos das distribuições marginais para aglomerados triangulares são apresentadas na Fig. 5.2, onde o sistema encontra-se numa fase de VSA com $q > 0$ e $Q > 0$. Nesse caso, quando há ausência de campos externos, sempre que $q > 0$, $q' \neq q$. Então, a solução de SR é instável na fase VSA e, conseqüentemente, a linha AT coincide com a fronteira da fase VSA. Nas próximas subseções, apresentamos os resultados de cada geometria de aglomerados separadamente.

5.2.1 Aglomerados Triangulares

O estado macroscópico do sistema é determinado calculando-se os parâmetros de ordem q e Q , através das equações (5.13) e (5.14) respectivamente. Para visualizar o comportamento desse sistema, desenhamos diagramas de fase no plano T/J contra J_0/J para alguns valores de c , mostrados na figura 5.3. No diagrama encontramos duas fases. A altas temperaturas, o sistema encontra-se numa fase PM, onde $Q > 0$ e $q = 0$. Diminuindo a temperatura, ocorre uma transição de fase contínua para uma fase VSA, onde $Q > 0$ e $q > 0$, a uma temperatura de congelamento T_c/J . Na região em que as interações são fortemente AF, $J_0/J \ll 0$, em uma temperatura $T^* > T_c$, encontra-se um *crossover* da fase PM para um estado de Líquido de Spin Clássico (CSL). Mais adiante no texto, encontra-se uma discussão mais detalhada sobre o aparecimento do estado CSL. Pode-se observar um aspecto particular para $J_0/J < -3.0$. A temperatura de congelamento T_c/J torna-se independente de J_0/J , enquanto que a temperatura de *crossover* T^*/J adquire uma dependência linear. Analisando as modificações com a conectividade c , o diagrama de fases pode ser dividido em três regiões, de acordo com sua dependência em J_0/J : na primeira região, para $J_0/J \gtrsim -1.5$, a T_c/J aumenta à medida que c aumenta; na segunda região, para $-2.5 \lesssim J_0/J \lesssim -1.5$, a T_c/J diminui com o aumento de c ; para $J_0/J \lesssim -2.5$, a T_c/J volta a crescer com o aumento de c . Para os valores de c investigados, a T_c/J é fracamente dependente em c e, quando $c \gtrsim 12$, os resultados convergem para os obtidos numa rede com conectividade infinita.

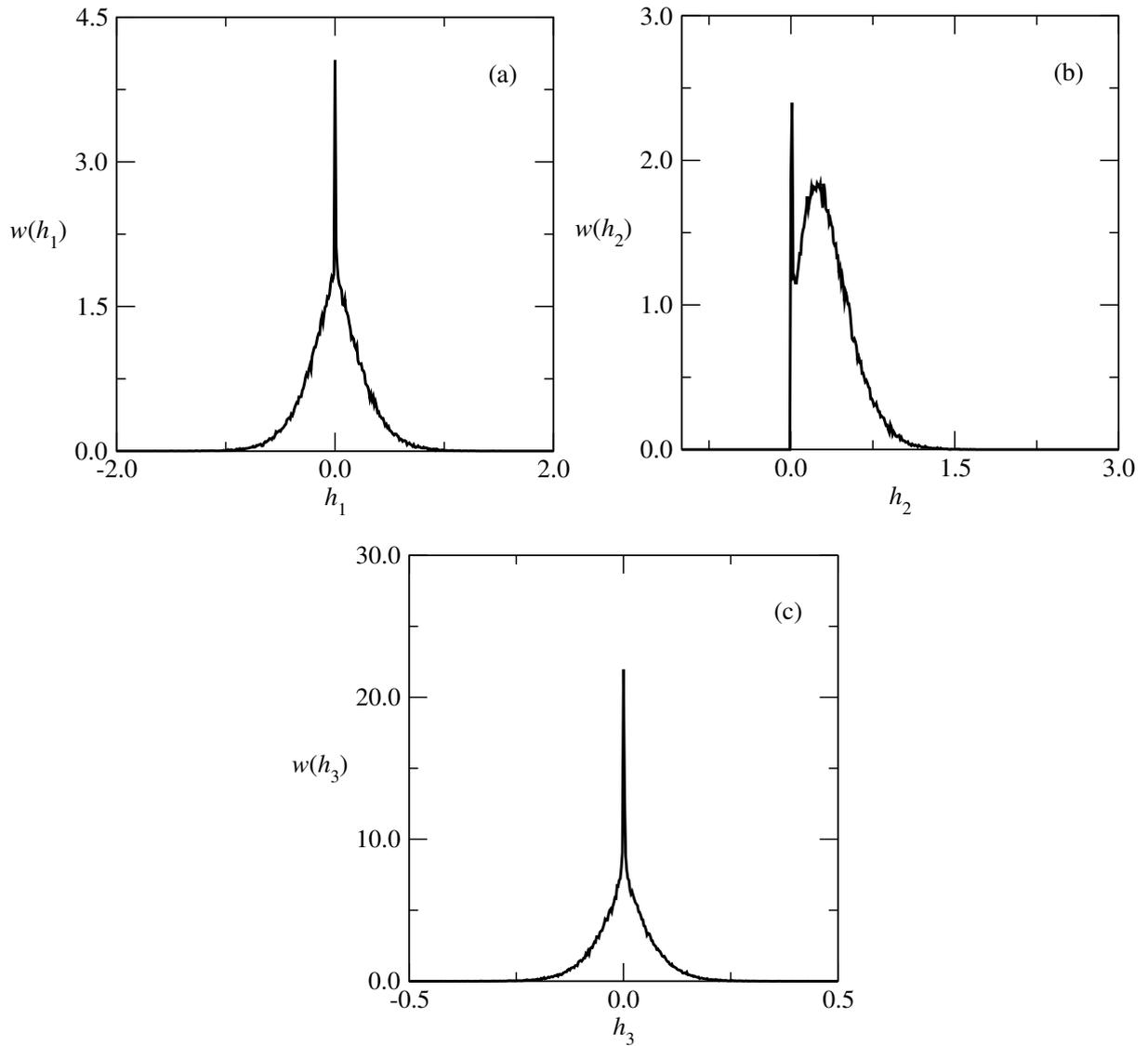


Figura 5.2: Distribuições marginais para cada componente de campo do aglomerado triangular, para $T/J = 0.1$, $c = 4$ e $J_0/J = -5.0$, onde os efeitos de frustração são grandes (veja discussão abaixo). Populações de tamanho $\mathcal{N} = 10^5$ foram utilizadas. (a) Distribuição marginal em relação a componente h_1 de campos, (b) distribuição ao longo da componente h_2 e (c) distribuição marginal ao longo de h_3 .

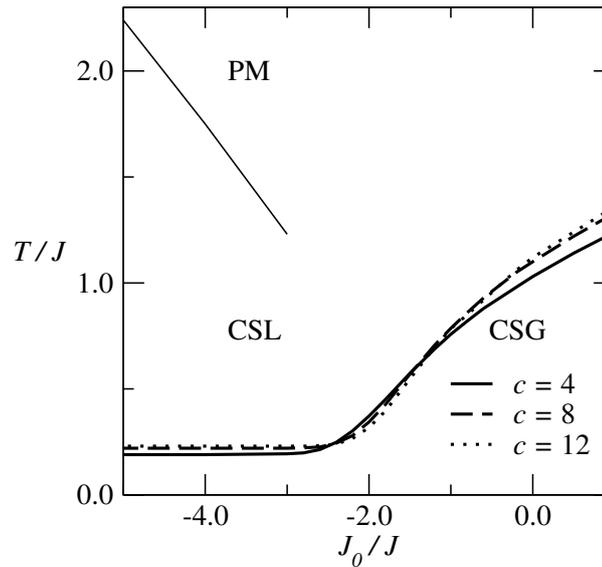


Figura 5.3: Diagramas de fase para T/J contra J_0/J , quando consideramos aglomerados como triângulos. A linha fina representa a temperatura T^*/J do *crossover* entre CSL para PM.

Para identificar o comportamento da fase CSL, calculamos a entropia por aglomerado $s = -\partial f/\partial T$ e o calor específico magnético $C_m = -T\partial^2 f/\partial T^2$. Na figura 5.4(a), s e C_m estão desenhados para alguns valores de J_0/J . A entropia exibe duas regiões onde existe um extremo na primeira derivada: a primeira ocorre na temperatura de congelamento de VSA \rightarrow PM T_c , que corresponde ao primeiro máximo do C_m . Este, por sua vez, está relacionado à perda de graus de liberdade próximo à transição VSA; a segunda ocorre na temperatura de *crossover* T^* , que corresponde ao segundo máximo no calor específico. Em contraste com o primeiro máximo, a altura é menor e a posição do segundo máximo varia linearmente em função de J_0/J , como mostrado pela linha fina no diagrama de fases 5.3. Não existe uma transição de fase na temperatura de *crossover* T^*/J , já que nenhum parâmetro de ordem vai a zero nesse ponto. De fato, no intervalo $T_c/J < T/J < T^*/J$, o parâmetro q é sempre zero. O segundo máximo sugere que, entre os dois máximos existe uma ordem PM exótica, onde os graus de liberdade internos dos aglomerados dominam. Essa região corresponde ao CSL mostrado na figura 5.3. Consideramos que T^*/J corresponde à temperatura de *crossover* entre a fase PM e o CSL [119].

Investigamos a dependência de T^*/J com a conectividade. Na figura 5.4(b), apresentamos resultados de C_m em função de T/J para dois valores de c . Para $c = 8$, o primeiro máximo de C_m é mais elevado e está levemente deslocado horizontalmente. Esse efeito é consistente com a mudança na T_c/J em função de c . Se c for suficientemente reduzido, o primeiro máximo, eventualmente, desaparece no limite de percolação $c = 1$. A modificação no segundo máximo com a mudança de c é quase imperceptível. Isso mostra que T^*/J não depende da conectividade da rede aleatória.

Investigamos, também, o nível de frustração através do parâmetro definido pela equação (2.13) e como ele está relacionado com c e J_0/J . Na figura 5.5(a), o inverso da susceptibilidade magnética χ^{-1} contra T/J é representado. Em T_c/J , é evidente a presença de uma cúspide, que é uma assinatura característica das transições do tipo VS. Curvas χ^{-1} contra T/J são traçadas para valores de c no intervalo de 2 até 12. Para $T/J \gg T_c/J$, as curvas de χ^{-1} se sobrepõem. Logo, o comportamento de χ^{-1} é invariante a c . Ao analisarmos χ^{-1} contra T/J para diferentes J_0/J , concluímos que a temperatura Θ_{CW}/J é altamente influenciada pela mudança de J_0/J .

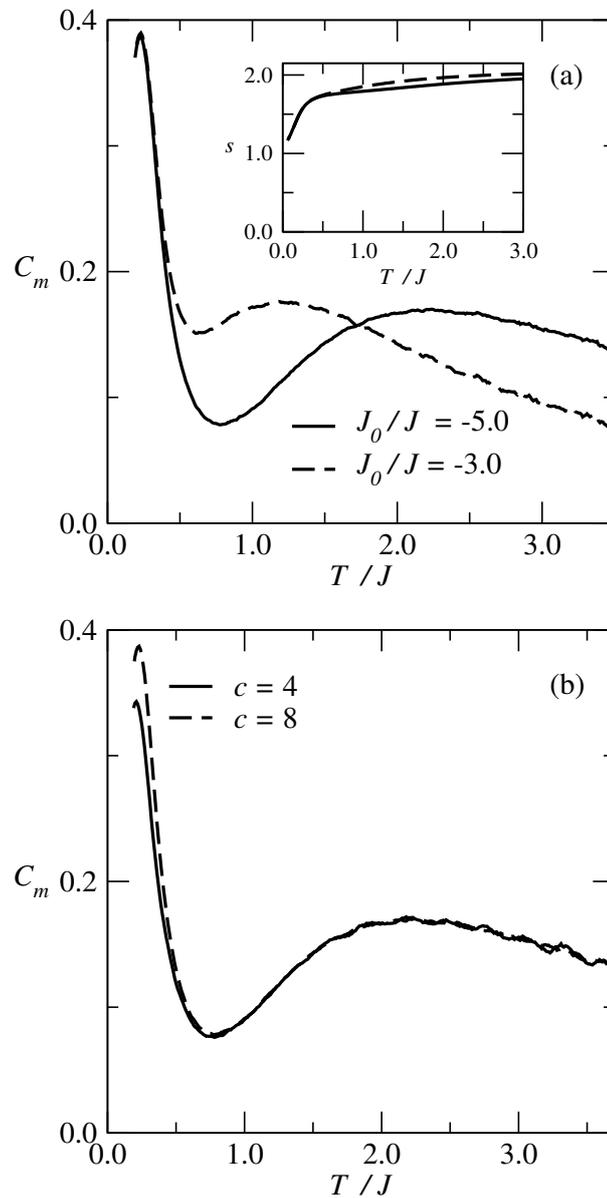


Figura 5.4: (a) Calor específico magnético C_m contra T/J para valores dos acoplamentos intra-aglomerado $J_0/J = -5.0$ e $J_0/J = -3.0$, para $c = 4$. A miniatura mostra a entropia correspondente a cada valor de J_0/J . (b) Calor específico magnético C_m contra T/J para $c = 4$ e $c = 8$, para $J_0/J = -3.0$.

A temperatura Θ_{CW}/J é obtida através de um ajuste da equação (2.12) na região linear das curvas de χ^{-1} em função de T/J . Para $J_0/J = -3.0$, o valor obtido é de $\Theta_{CW}/J \approx -1.84$, para qualquer c . Para $c = 4$, obtemos $f_p \approx 9.46$, indicando um grau de frustração moderado. A Θ_{CW}/J depende fortemente do valor de J_0/J . Porém, o parâmetro f_p também varia em função da T_c/J , que é influenciada pela mudança em c .

Para visualizar como a relação entre c e J_0/J afeta o grau de frustração do sistema, na figura 5.6, traçamos curvas de f_p contra c^{-1} para três valores de J_0/J . Com isso, podemos identificar diferentes regimes de frustração. Para $J_0/J = -2.0$, f_p é fracamente afetado pela variação de c . Porém, em $c = 3$, pode-se observar a presença de um mínimo de f_p . O esclarecimento da existência desse mínimo fica como sugestão para futuros trabalhos. Para valores de $J_0/J = -5.0$ e $J_0/J = -3.0$, o parâmetro f_p mostra um rápido crescimento quando c é reduzida, sendo que para $J_0/J = -5.0$, f_p mostra uma taxa de crescimento mais elevada e maiores níveis de frustração. Isso ocorre na mesma região do diagrama de fases em que uma fase de CSL se estabelece. O eixo c^{-1} estende-se apenas até $c^{-1} \approx 0.7$. Isso ocorre, pois a temperatura de congelamento $T_c/J \rightarrow 0$ à medida que $c \rightarrow 1$ e o algoritmo de população de campos para esse modelo não converge para $T \rightarrow 0$, tornando necessário a expansão para $\beta \rightarrow \infty$ das funções $\phi_i(\mathbf{h}_i, J_i)$ e dos parâmetros de ordem q e Q . Argumentamos que como Θ_{CW}/J é praticamente independente de c , f_p deve divergir próximo desse limite.

5.2.2 Aglomerados de Tetraedros

Nesta seção, estudamos o caso onde a geometria dos aglomerados é um tetraedro com interações uniformes $J_0/J < 0$. Nesse caso, não há presença de frustração geométrica no aglomerado, porque, apesar de algumas ligações estarem frustradas, como há um número ímpar de vizinhos, o spin consegue decidir qual o estado correto para minimizar a energia no tetraedro. Além disso, os spins podem se alinhar de forma a anular o número de ocupação de estado do aglomerado Q . Esse cenário é favorecido para $J_0/J \ll 0$, como discutiremos abaixo. Nessa geometria, também, é possível encontrar transições de fase de segunda ordem para valores de c elevados. Na figura 5.7, mostramos curvas de Q e q contra J_0/J na vizinhança de uma transição de primeira ordem do tipo VSA \rightarrow PM, com $c = 8$. A localização da transição de fase termodinâmica é obtida pela energia livre. A visão geral sobre os aglomerados de tetraedros é descrita pelos diagramas de fase que são traçados na figura 5.8. Focamos os resultados para valores de $J_0/J < 0$, que são mais interessantes para discussão, comparando com o aglomerado triangular que nessa região possui frustração geométrica. Como comentado anteriormente, quando $J_0/J \ll 0$ e $T \approx 0$, os aglomerados ocupam, majoritariamente, o estado de spin total $s = 0$, sendo denominado de estado NM, com $q = 0 = Q$. À medida que J_0/J torna-se menos negativo, o estado fundamental passa a ser o de VSA. Isso ocorre para $J_0/J \geq -1.95$. Essa mudança de estados é devida ao aumento da importância das interações de longo alcance desordenadas J .

Ainda analisando a figura 5.8, podemos observar a influência da conectividade entre os aglomerados sobre a topologia dos diagramas de fase. Para valores baixos, como $c = 4$, as transições de fase do tipo PM \rightarrow VSA são sempre contínuas. Já em $c = 8$, as transições em baixa temperatura são descontínuas. Ao elevar T/J , as linhas de transição tornam-se contínuas em T_c , que marca a localização de um ponto tricrítico. Para $c = 8$ e $c = 12$, os pontos tricríticos estão em $T_c/J = 0.18$ e $T_c/J = 0.24$, respectivamente.

Nos diagramas que possuem transições descontínuas, há presença de reentrância em uma região, onde a fase VSA e a NM coexistem [118]. Na região reentrante, o sistema faz o seguinte caminho: NM \rightarrow VSA \rightarrow PM. Essa reentrância é similar àquela que aparece nas

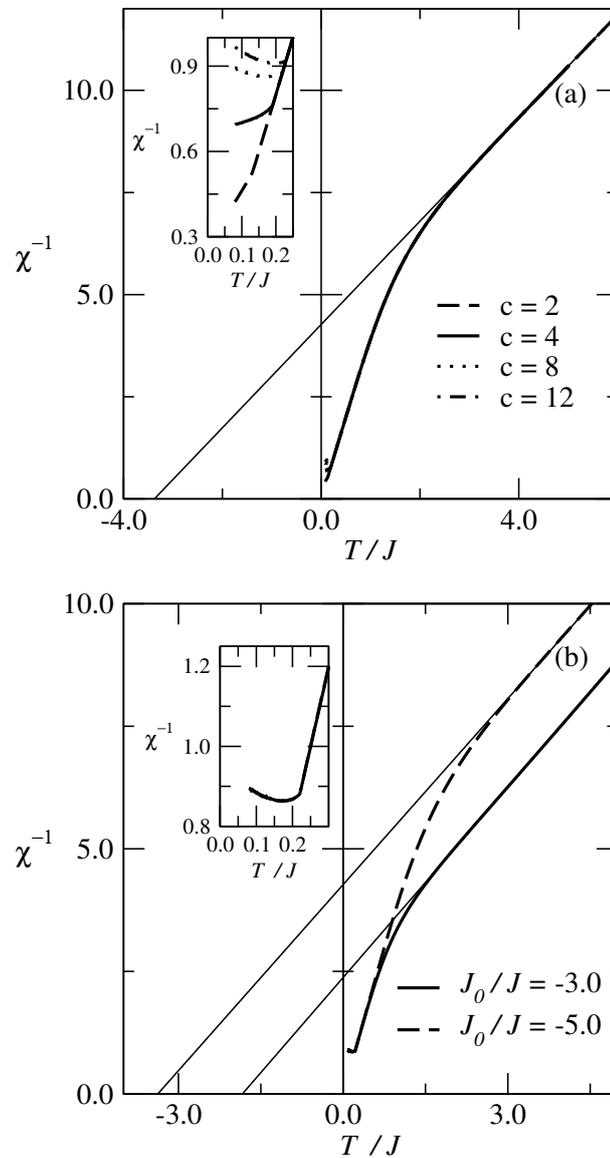


Figura 5.5: (a) Curvas do inverso da susceptibilidade magnética χ^{-1} contra T/J para um valor fixo das interações intra-aglomerado $J_0/J = -5.0$ e valores de conectividade $c = 2$, $c = 4$, $c = 8$ e $c = 12$. A miniatura mostra as cúspides em detalhe. (b) Curvas do inverso da susceptibilidade magnética χ^{-1} contra T/J para um valor fixo de $c = 8$ e dois valores de interação intra-aglomerado: $J_0/J = -3.0$ e $J_0/J = -5.0$. A miniatura mostra as cúspides em detalhe. As linhas finas representam um ajuste de uma lei de Curie-Weiss na região linear de χ^{-1} .

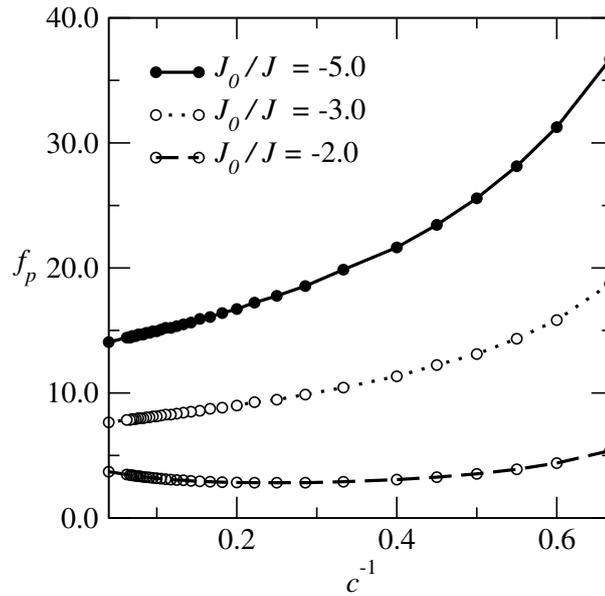


Figura 5.6: Parâmetro de frustração f_p contra c^{-1} para alguns valores de J_0/J .

transições de fase inversas que foram observadas em sistemas não modelados por spins de Ising [120, 92]. A presença de reentrância está relacionada à capacidade dos spins do aglomerado de se compensarem, resultando num spin total zero para valores de $J_0/J \ll 0$. Para temperaturas baixas, os aglomerados ocupam densamente os estados $s = 0$, e então fase NM é favorecida. Porém, ao elevar T , as flutuações térmicas aumentam e, levando em conta a presença das interações desordenadas entre os aglomerados que agem de forma a estabilizar a fase VSA e, conseqüentemente, a fase NM deixa de ser a mais favorável. Como esse balanço depende das interações inter-aglomerados, a conectividade tem um papel fundamental. Apesar de o aparecimento de reentrância, o princípio de crescimento monótono da entropia não é violado, já que a fase com $Q \approx 0$ possui entropia menor do que as fases VSA e PM. Isso ocorre porque nessa fase existe uma ordem onde a maioria dos aglomerados permanece no estado $s = 0$.

5.3 Observações Finais

Nesse trabalho, desenvolvemos um método teórico que permite estudar os efeitos da presença de frustração geométrica em aglomerados de spin juntamente com interações desordenadas entre aglomerados, num grafo de Erdős-Rényi. É possível, assim, controlar a conectividade média da rede. Tratamos de dois tipos de geometria de aglomerados: triangular e tetraédrica, sendo que as interações internas no aglomerado são antiferromagnéticas em ambos casos. Os resultados mostram que nos aglomerados de geometria triangular, a fase de VSA aparece como o estado fundamental mesmo para valores infinitesimais de desordem. Esses resultados não demonstram ter dependência na conectividade média entre os aglomerados. Além disso, a presença de frustração geométrica nesses aglomerados ocasiona o aparecimento de uma região onde existe a fase de CSL. O tamanho da região ocupada pela fase de CSL depende do módulo das interações antiferromagnéticas intra-aglomerados J_0/J , porém é fracamente dependente da conectividade. Por outro lado, a conectividade apresenta um forte efeito no nível de frustração $f_p = -\Theta_{CW}/T_c$ dentro da região de CSL. Logo, o aumento de f_p coincide com a entrada na fase de CSL. No caso dos aglomerados com geometria tetraédrica, observa-se que, a baixas temperaturas, ocorre o congelamento inverso [120], que é um resultado também observado em

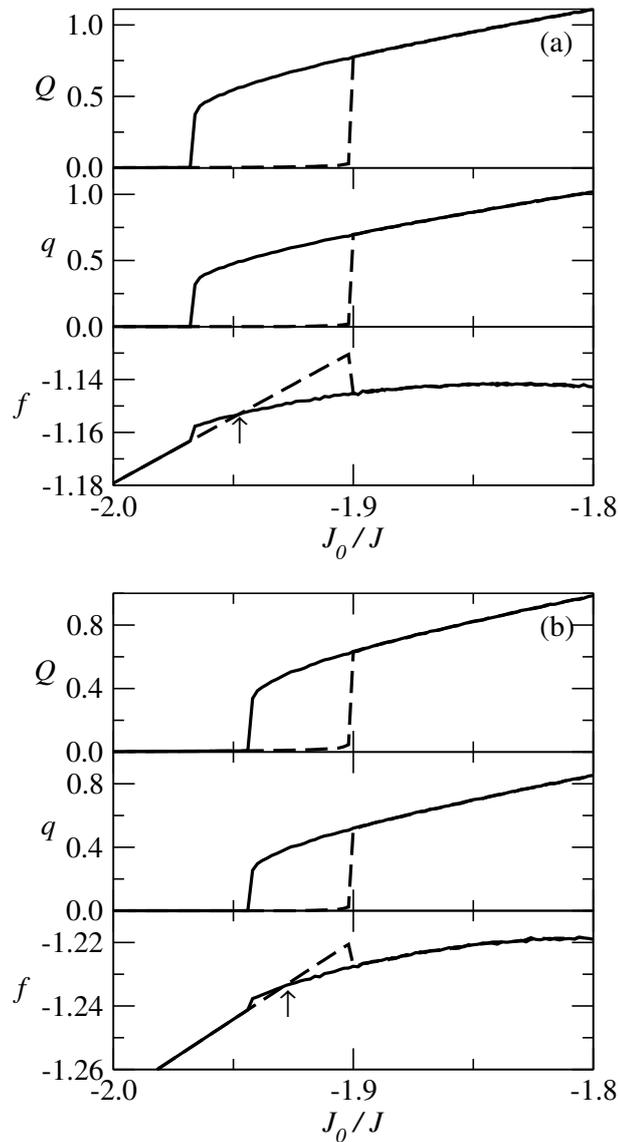


Figura 5.7: (a) Número de ocupação de estado do aglomerado Q , parâmetro de VS q e energia livre f contra J_0/J para $T/J = 0.10$ e $c = 8$. (b) O mesmo, porém para $T/J = 0.15$. Linhas sólidas (tracejadas) indicam aquecendo (resfriando). As flechas marcam o local das transições de primeira ordem.

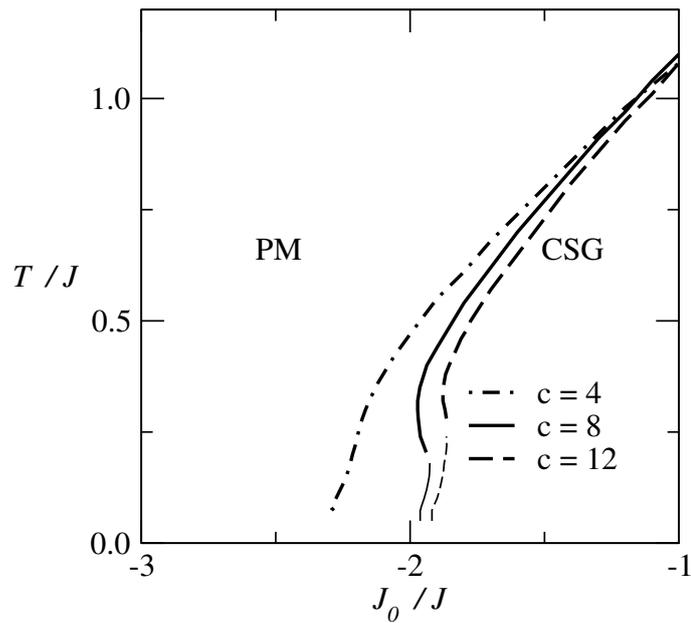


Figura 5.8: Diagramas de fase T/J contra J_0/J para aglomerados de tetraedros para $c = 4$, $c = 8$ e $c = 12$. Linhas finas representam transições de primeira ordem e linhas grossas transições de segunda ordem.

modelos de aglomerados realizados na rede totalmente conectada [118]. Os resultados mostram que, para valor de c pequeno, a transição inversa desaparece, o que indica que esse tipo de transição possui dependência na conectividade. Nesse capítulo, estudamos a relação entre aglomerados magnéticos, desordem e frustração geométrica. Para isso, introduzimos um método que permite controlar a conectividade média entre os aglomerados. Investigamos apenas dois tipos de geometria de aglomerados. Contudo, consideramos que seja possível utilizar esse método para tratar de outras geometrias de aglomerados como, por exemplo, a rede de Kagome. Além disso, apesar de termos desenvolvido o caso para acoplamentos inter-aglomerados uniformes, a teoria permite também tratar de acoplamentos inter-aglomerados não-uniformes.

Capítulo 6

Conclusões

Neste trabalho, estudamos modelos magnéticos com desordem e frustração. Para oferecer resultados mais próximos de sistemas reais, utilizamos o grafo aleatório como modelo para a rede. Essa escolha permite o controle sobre a conectividade média entre os sítios. Como pudemos observar, a conectividade finita acarreta grandes mudanças no comportamento dos sistemas.

No Capítulo 2, fazemos uma revisão de conceitos sobre grafos aleatórios, desordem e frustração. Discutimos como o grafo aleatório consiste numa escolha razoável para construir modelos de sistemas magnéticos. Apresentamos os conceitos de frustração e desordem e mostramos que sua presença dá origem a novas fases da matéria e a novos campos de estudo. No caso dos VS, as ferramentas desenvolvidas mostraram-se de grande utilidade para outros campos de pesquisa.

No Capítulo 3, resolvemos o modelo de van Hemmen para spins de três estados no grafo aleatório. Além da desordem nos acoplamentos, incluímos também uma variável de campo aleatório. A solução do problema envolve o uso do método de réplicas para redes com conectividade finita e também do conceito de sub-redes. Os resultados obtidos mostram que a conectividade média tem papel marcante no comportamento do sistema. Isso é mostrado nas mudanças que c acarreta nos diagramas de fases, como o aparecimento de pontos multicríticos, transições de fase reentrantes e coexistência entre duas fases de VS.

No Capítulo 4, resolvemos um modelo de campo aleatório com acoplamentos desordenados no grafo de ER. O intuito desse estudo é de verificar os efeitos da conectividade finita sobre esse modelo, que já foi estudado com campo médio pelos autores Soares, Nobre e de Almeida [94]. A solução emprega o método de réplicas para sistemas com conectividade finita. Para detectar as fronteiras entre as fases magnéticas e também onde há quebra não-trivial de ergodicidade, utilizamos o método de duas réplicas, que consiste na determinação da linha AT para sistemas com conectividade finita. Ao contrário do que é observado na versão de campo médio, nossos resultados mostram que a linha AT intercepta os eixos J_0 e h_0 para $T = 0$. Isso mostra que, quando a conectividade é finita, existe uma região em $T = 0$ onde não ocorre quebra de ergodicidade. Investigamos também o *crossover* entre os regimes de CA e VS. Verificamos que esse *crossover* ocorre para $\Delta/J = 0$. Sendo que $\tau \sim h_0$ no regime dominado por CA, e $\tau \sim h_0^2$ no regime dominado por VS.

No Capítulo 5, resolvemos um modelo de aglomerados de spins com interações internas antiferromagnéticas. Analisamos dois tipos de geometrias, um triangulo e um tetraedro. O objetivo desse estudo foi determinar o papel da frustração geométrica na estabilização da fase de VS. Para aproximar esse modelo de sistemas reais, utilizamos o grafo aleatório como a estrutura

da rede. Sendo assim, podemos controlar a conectividade média entre os aglomerados, que interagem através de seu spin total. A solução desse modelo emprega uma versão modificada da metodologia de réplicas para sistemas com conectividade finita, sendo possível seu uso em trabalhos futuros envolvendo outras geometrias de aglomerados.

Nos aglomerados triangulares, nossos resultados mostram a existência de uma fase de VS como o estado fundamental, numa região onde a desordem é infinitesimal. Através da determinação da entropia e do calor específico, constatamos a existência de uma fase de líquido de spin clássico, dentro da região onde os efeitos de frustração geométrica dominam. O grau de frustração foi estimado através do parâmetro $f_p = -\Theta_{CW}/T_c$. Demonstramos que a conectividade afeta fortemente o grau frustração, sendo que os efeitos são mais intensos na região onde a frustração geométrica domina.

Nos aglomerados de tetraedros, em valores de $T \sim 0$, encontramos a presença de congelamento inverso. Para valores de conectividade suficientemente pequenos, o congelamento inverso desaparece.

Mencionamos que o formalismo de réplicas desenvolvido para tratar o modelo de aglomerados pode ser utilizado em trabalhos futuros. Essa metodologia também pode ser aplicada para estudar aglomerados com mais spins e com geometrias mais complexas. Além disso, há a possibilidade de se investigar aglomerados com desordem nas interações internas. Para tornar esse modelo ainda mais completo, pode-se considerar a adição de um termo de interações de curto alcance entre aglomerados. A solução dessas interações é feita através do método do Cluster Correlated Mean Field Theory (CCMF) [121].

Apêndice A

Ansatz de SR para spins com múltiplos estados

Considere a equação

$$\mathbf{T} = \exp \left[-\beta \sum_{\alpha} H_0(\mathbf{s}_{\alpha}) + \beta\theta \sum_{\alpha} s_{\alpha} - \beta D \sum_{\alpha} s_{\alpha}^2 \right] \exp \left[c \sum_{\mathbf{s}'} P(\mathbf{s}') \left\langle e^{\frac{\beta J}{\sqrt{c}} \sum_{\alpha} s_{\alpha} s'_{\alpha}} - 1 \right\rangle_J \right]. \quad (\text{A.1})$$

Os spins podem assumir os possíveis estados $s_{\alpha} = \{p/2, p/2 - 1, \dots, -p/2\}$. Para remover as variáveis s_{α} da exponencial interna, a equação (A.1) pode ser reescrita como

$$\begin{aligned} \mathbf{T} = & \exp \left[-\beta \sum_{\alpha} H_0(\mathbf{s}_{\alpha}) + \beta\theta \sum_{\alpha} s_{\alpha} - \beta D \sum_{\alpha} s_{\alpha}^2 \right] \\ & \times \exp \left[\left\langle c \sum_{\mathbf{s}'} P(\mathbf{s}') \prod_{\alpha} e^{\frac{\beta J}{\sqrt{c}} s_{\alpha} s'_{\alpha}} \right\rangle_J \right] e^{-c} \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

Usando o *Ansatz* de simetria de réplicas

$$P(\mathbf{s}) = \int d\mathbf{x} W(\mathbf{x}) \prod_{\alpha} P(\mathbf{s}_{\alpha} | \mathbf{x}) \quad (\text{A.3})$$

e a identidade

$$1 = \sum_s \delta_{ss_{\alpha}}. \quad (\text{A.4})$$

A equação (A.2) é reescrita como

$$\begin{aligned} \mathbf{T} = & \exp \left[-\beta \sum_{\alpha} H_0(\mathbf{s}_{\alpha}) + \beta\theta \sum_{\alpha} s_{\alpha} - \beta D \sum_{\alpha} s_{\alpha}^2 \right] \\ & \times \exp \left[\left\langle c \int d\mathbf{x} W(\mathbf{x}) \exp \sum_{\alpha} \sum_s \delta_{ss_{\alpha}} \log \sum_{s'_{\alpha}} P(s'_{\alpha} | \mathbf{x}) e^{\frac{\beta J}{\sqrt{c}} s s'_{\alpha}} \right\rangle_J \right] e^{-c} \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

A delta de Krönecker de $p + 1$ estados pode ser reescrita na forma de

$$\delta_{ss_{\alpha}} = \sum_{ij} C_{ij} s^i s_{\alpha}^j. \quad (\text{A.6})$$

Assim, temos

$$\begin{aligned} \mathbf{T} = & \exp \left[-\beta \sum_{\alpha} H_0(\mathbf{s}_{\alpha}) + \beta\theta \sum_{\alpha} s_{\alpha} - \beta D \sum_{\alpha} s_{\alpha}^2 \right] \\ & \times \exp \left[\left\langle c \int d\mathbf{x} W(\mathbf{x}) \exp \sum_j \sum_{\alpha} s_{\alpha}^j \sum_s \sum_i C_{ij} s^i \log \sum_{s'_{\alpha}} P(s'_{\alpha} | \mathbf{x}) e^{\frac{\beta J}{\sqrt{c}} s s'_{\alpha}} \right\rangle_J \right] e^{-c}, \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

ou

$$\begin{aligned} \mathbf{T} = & \exp \left[-\beta \sum_{\alpha} H_0(\mathbf{s}_{\alpha}) + \beta\theta \sum_{\alpha} s_{\alpha} - \beta D \sum_{\alpha} s_{\alpha}^2 \right] \\ & \times \exp \left[\left\langle c \int d\mathbf{x} W(\mathbf{x}) \exp \sum_j \sum_{\alpha} s_{\alpha}^j \phi_j(\mathbf{x}, J) \right\rangle_J \right] e^{-c}, \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

onde $\phi_j(\mathbf{x}, J) = \sum_s \sum_i C_{ij} s^i \log \sum_{s'_{\alpha}} P(s'_{\alpha} | \mathbf{x}) e^{\frac{\beta J}{\sqrt{c}} s s'_{\alpha}}$. Expandindo a exponencial externa em série de potências, temos

$$\begin{aligned} \mathbf{T} = & \exp \left[-\beta \sum_{\alpha} H_0(\mathbf{s}_{\alpha}) + \beta\theta \sum_{\alpha} s_{\alpha} - \beta D \sum_{\alpha} s_{\alpha}^2 \right] \\ & \times \sum_k P_k \left\langle \dots \left\langle \int \prod_{l=1}^k d\mathbf{x}_l W(\mathbf{x}_l) \exp \sum_j \sum_{\alpha} s_{\alpha}^j \sum_l \phi_j(\mathbf{x}_l, J_l) \right\rangle_{J_1} \dots \right\rangle_{J_k}. \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

Utilizamos a delta de Dirac para reescrever a equação (A.9) na forma

$$\mathbf{T} = \exp \left[-\beta \sum_{\alpha} H_0(\mathbf{s}_{\alpha}) \right] \int d\mathbf{h} \left\{ \sum_k P_k \int \prod_{l=1}^k d\mathbf{x}_l W(\mathbf{x}_l) \left\langle \delta \left(h_1 - \theta - \frac{1}{\beta} \sum_l \phi_1(\mathbf{x}_l, J_l) \right) \right. \right. \right. \quad (\text{A.10})$$

$$\begin{aligned} & \left. \times \delta \left(h_2 + D - \frac{1}{\beta} \sum_l \phi_2(\mathbf{x}_l, J_l) \right) \dots \delta \left(h_p - \frac{1}{\beta} \sum_l \phi_p(\mathbf{x}_l, J_l) \right) \right\rangle_{J_l} \left. \right\} \\ & \times \exp \beta \sum_j h_j \sum_{\alpha} s_{\alpha}^j. \end{aligned} \quad (\text{A.11})$$

Identificando o termo entre chaves como uma distribuição de vetores de campo

$$\begin{aligned} W(\mathbf{h}) \equiv & \sum_k P_k \int \prod_{l=1}^k d\mathbf{x}_l W(\mathbf{x}_l) \left\langle \delta \left(h_1 - \theta - \frac{1}{\beta} \sum_l \phi_1(\mathbf{x}_l, J_l) \right) \right. \\ & \left. \times \delta \left(h_2 + D - \frac{1}{\beta} \sum_l \phi_2(\mathbf{x}_l, J_l) \right) \dots \delta \left(h_p - \frac{1}{\beta} \sum_l \phi_p(\mathbf{x}_l, J_l) \right) \right\rangle_{J_l}, \end{aligned} \quad (\text{A.12})$$

podemos reescrever a equação (A.10) como

$$\mathbf{T} = \int d\mathbf{h} W(\mathbf{h}) \exp \left[-\beta \sum_{\alpha} H_0(\mathbf{s}_{\alpha}) + \beta \mathbf{h} \cdot \sum_{\alpha} \mathbf{M}(\mathbf{s}_{\alpha}) \right]. \quad (\text{A.13})$$

Isso mostra que a parametrização de $P(\mathbf{s}_{\alpha} | \mathbf{x}) \propto \exp \left[-\beta \sum_{\alpha} H_0(\mathbf{s}_{\alpha}) + \beta \mathbf{h} \cdot \sum_{\alpha} \mathbf{M}(\mathbf{s}_{\alpha}) \right]$. As contribuições dos termos $\beta\theta \sum_{\alpha} s_{\alpha}$ e $\beta D \sum_{\alpha} s_{\alpha}^2$ são contabilizadas juntamente com as possíveis potências de s_{α} que estão incluídas no termo $\mathbf{h} \cdot \sum_{\alpha} \mathbf{M}(\mathbf{s}_{\alpha})$ da equação (A.13). No entanto, o termo $\beta \sum_{\alpha} H_0(\mathbf{s}_{\alpha})$ precisa ser inserido em $P(s'_{\alpha} | \mathbf{x})$ resultando na forma da equação (5.10). O índice $j = 1 \dots p$, ou seja, o número de campos é proporcional ao número de estados de spins de um aglomerado. Um aglomerado com p spins possui $p + 1$ estados de spin total s . Cada componente i do vetor \mathbf{h} está acoplada ao spin total s^i , logo o campo \mathbf{h} controla a ocupação dos possíveis $p + 1$ estados de spin total, enquanto que o termo H_0 controla os estados intra-aglomerado.

Apêndice B

Equações de ponto de sela para modelo de aglomerados

Para reduzirmos ao problema de um aglomerado, o primeiro passo é a remoção do spin total dos aglomerados da exponencial interna na equação (5.5), fazendo uso da identidade

$$1 = \sum_{\mathbf{s}} \prod_{\alpha=1}^n \prod_{i=1}^p \delta_{s_{i\alpha} \sigma_{\mu i \alpha}} = \sum_{\mathbf{s}} \delta_{\mathbf{s} \sigma_{\mu}}, \quad (\text{B.1})$$

onde $\delta_{s\sigma}$ corresponde a delta de Krönecker e $\mathbf{s} \equiv \{s_{i\alpha}\}$ a um vetor auxiliar. Assim, reescrevemos a função de partição replicada como

$$\begin{aligned} \langle Z^n \rangle = \sum_{\sigma_1 \dots \sigma_n} \exp \left[-\beta \sum_{\alpha\mu} H_0(\sigma_{\mu\alpha}) + \beta\theta \sum_{\alpha\mu} \sigma_{\mu\alpha} \right. \\ \left. + \frac{c}{2N_{cl}} \sum_{\mu \neq \nu} \sum_{\mathbf{s}\mathbf{s}'} \delta_{\mathbf{s}\sigma_{\mu}} \delta_{\mathbf{s}'\sigma_{\nu}} \left\langle e^{\frac{\beta J}{\sqrt{c}} \sum_{\alpha} s_{\alpha} s'_{\alpha}} - 1 \right\rangle_J \right], \end{aligned} \quad (\text{B.2})$$

onde $s_{\alpha} = \sum_{i=1}^p s_{i\alpha}$. A função de ordem na equação (5.6) é introduzida na equação (5.5) através da delta de Dirac e, então, fazendo uso da representação integral da delta de Dirac, a função de partição replicada pode ser reescrita na seguinte forma

$$\begin{aligned} \langle Z^n \rangle = \sum_{\sigma_1 \dots \sigma_n} \int \prod_{\mathbf{s}} dP(\mathbf{s}) d\hat{P}(\mathbf{s}) \exp \left\{ -\beta \sum_{\alpha\mu} H_0(\sigma_{\mu\alpha}) + \beta\theta \sum_{\alpha\mu} \sigma_{\mu\alpha} + \sum_{\mathbf{s}} \hat{P}(\mathbf{s}) P(\mathbf{s}) \right. \\ \left. - \frac{1}{N_{cl}} \sum_{\mathbf{s}} \hat{P}(\mathbf{s}) \sum_{\mu} \delta_{\mathbf{s}\sigma_{\mu}} + \frac{cN_{cl}}{2} \sum_{\mathbf{s}\mathbf{s}'} P(\mathbf{s}) P(\mathbf{s}') \left\langle e^{\frac{\beta J}{\sqrt{c}} \sum_{\alpha} s_{\alpha} s'_{\alpha}} - 1 \right\rangle_J \right\}. \end{aligned} \quad (\text{B.3})$$

As somas sobre as variáveis de spin $\sigma_{\mu\alpha} = (\sigma_{\mu 1\alpha} \dots \sigma_{\mu p\alpha})$ atuam apenas sobre o termo

$$\% = \sum_{\sigma_1 \dots \sigma_n} \exp \left[-\beta \sum_{\alpha\mu} H_0(\sigma_{\mu\alpha}) + \beta\theta \sum_{\alpha\mu} \sigma_{\mu\alpha} - \frac{1}{N_{cl}} \sum_{\mathbf{s}} \hat{P}(\mathbf{s}) \sum_{\mu} \delta_{\mathbf{s}\sigma_{\mu}} \right]. \quad (\text{B.4})$$

Somando sobre \mathbf{s} no terceiro termo da exponencial e rearranjando, temos

$$\% = \prod_{\mu} \sum_{\sigma_{\mu}} \exp \left[-\beta \sum_{\alpha} H_0(\sigma_{\mu\alpha}) + \beta\theta \sum_{\alpha} \sigma_{\mu\alpha} - \frac{1}{N_{cl}} \hat{P}(\sigma_{\mu}) \right]. \quad (\text{B.5})$$

Como agora os aglomerados estão desacoplados, o problema é reduzido ao de apenas um aglomerado. Podendo reescrever essa expressão na forma

$$\%_0 = \exp N_{cl} \log \sum_{\mathbf{s}} \exp \left[-\beta \sum_{\alpha} H_0(\mathbf{s}_{\alpha}) + \beta \theta \sum_{\alpha} s_{\alpha} - \frac{1}{N_{cl}} \hat{P}(\mathbf{s}) \right]. \quad (\text{B.6})$$

Fazendo a mudança de variáveis $\hat{P} \rightarrow N_{cl} \hat{P}$, obtemos a equação (5.7). Substituindo a equação (5.7) na (5.4) e integrando pelo método do ponto de sela, a energia livre por aglomerado fica

$$f = -\lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{\beta n} \text{Extr} \left\{ \sum_{\mathbf{s}} \hat{P}(\mathbf{s}) P(\mathbf{s}) + \log \sum_{\mathbf{s}} \exp \left[-\beta \sum_{\alpha} H_0(\mathbf{s}_{\alpha}) + \beta \theta \sum_{\alpha} s_{\alpha} - \hat{P}(\mathbf{s}) \right] + \frac{c}{2} \sum_{\mathbf{s}\mathbf{s}'} P(\mathbf{s}) P(\mathbf{s}') \left\langle e^{\frac{\beta J}{\sqrt{c}} \sum_{\alpha} s_{\alpha} s'_{\alpha}} - 1 \right\rangle_J \right\}, \quad (\text{B.7})$$

onde a operação Extr significa tomar o extremo sobre as variáveis $\hat{P}(\mathbf{s})$ e $P(\mathbf{s})$ na expressão entre chaves. Isso é imposto pelas equações de ponto de sela

$$\frac{\partial f}{\partial \hat{P}(\mathbf{s})} = 0 = \frac{\partial f}{\partial P(\mathbf{s})}, \quad (\text{B.8})$$

que são dadas por

$$P(\mathbf{s}) = \frac{\exp \left[-\beta \sum_{\alpha} H_0(\mathbf{s}_{\alpha}) + \beta \theta \sum_{\alpha} s_{\alpha} - \hat{P}(\mathbf{s}) \right]}{\sum_{\mathbf{s}'} \exp \left[-\beta \sum_{\alpha} H_0(\mathbf{s}'_{\alpha}) + \beta \theta \sum_{\alpha} s'_{\alpha} - \hat{P}(\mathbf{s}') \right]} \quad (\text{B.9})$$

e

$$\hat{P}(\mathbf{s}) = -c \sum_{\mathbf{s}'} P(\mathbf{s}') \left\langle e^{\frac{\beta J}{\sqrt{c}} \sum_{\alpha} s_{\alpha} s'_{\alpha}} - 1 \right\rangle_J. \quad (\text{B.10})$$

Eliminando $\hat{P}(\mathbf{s})$ na equação (B.9), obtemos a equação autoconsistente para $P(\mathbf{s})$:

$$P(\mathbf{s}) = \frac{\exp \left[-\beta \sum_{\alpha} H_0(\mathbf{s}_{\alpha}) + \beta \theta \sum_{\alpha} s_{\alpha} + c \sum_{\mathbf{s}'} P(\mathbf{s}') \left\langle e^{\frac{\beta J}{\sqrt{c}} \sum_{\alpha} s_{\alpha} s'_{\alpha}} - 1 \right\rangle_J \right]}{\sum_{\mathbf{s}'} \exp \left[-\beta \sum_{\alpha} H_0(\mathbf{s}'_{\alpha}) + \beta \theta \sum_{\alpha} s'_{\alpha} + c \sum_{\mathbf{s}''} P(\mathbf{s}'') \left\langle e^{\frac{\beta J}{\sqrt{c}} \sum_{\alpha} s'_{\alpha} s''_{\alpha}} - 1 \right\rangle_J \right]}. \quad (\text{B.11})$$

Aplicando as equações (B.10) e (B.11) na (B.7), obtemos a energia livre por aglomerado representada na equação (5.8).

Para obter a distribuição de vetores de campos locais, na equação (5.11), introduzimos o Ansatz de SR (5.10) na equação de ponto de sela (B.11). Já que $P(\mathbf{s})$ é uma probabilidade, o denominador no lado direito da equação (B.11) deve ser igual a 1. Expandindo a exponencial externa no numerador, temos

$$P(\mathbf{s}) = \exp \left[-\beta \sum_{\alpha} H_0(\mathbf{s}_{\alpha}) + \beta \theta \sum_{\alpha} s_{\alpha} \right] \sum_k P_k \prod_{l=1}^k \sum_{\mathbf{s}_l} \int d\mathbf{h}_l W(\mathbf{h}_l) \quad (\text{B.12}) \\ \times \frac{\left\langle \exp \left[-\beta \sum_{\alpha} H_0(\mathbf{s}_{\alpha l}) + \beta \mathbf{h}_l \cdot \sum_{\alpha} \mathbf{M}(s_{\alpha l}) + \beta \frac{J_l}{\sqrt{c}} \sum_{\alpha} s_{\alpha} s_{\alpha l} \right] \right\rangle_{J_l}}{\left\{ \sum_{\mathbf{s}} \exp \left[-\beta H_0(\mathbf{s}) + \beta \mathbf{h}_l \cdot \mathbf{M}(\mathbf{s}) \right] \right\}_n},$$

onde $P_k = \sum_k e^{-c} c^k / k!$ representa a distribuição de Poisson. Podemos reescrever essa equação na seguinte forma

$$P(\mathbf{s}) = \exp \left[-\beta \sum_{\alpha} H_0(\mathbf{s}_{\alpha}) + \beta \theta \sum_{\alpha} s_{\alpha} \right] \sum_k P_k \int \prod_{l=1}^k d\mathbf{h}_l W(\mathbf{h}_l) \quad (\text{B.13})$$

$$\times \frac{\left\langle \exp \sum_{\alpha} \sum_s \delta_{ss_{\alpha}} \log \chi_s(\mathbf{h}_l, J_l) \right\rangle_{J_l}}{\chi_0^n(\mathbf{h}_l, 0)},$$

com

$$\chi_s(\mathbf{h}, J) = \sum_{s'} \exp \left[-\beta H_0(s') + \beta \mathbf{h} \cdot \mathbf{M}(s') + \beta \frac{J}{\sqrt{c}} s s' \right], \quad (\text{B.14})$$

onde a delta de Kröenecker foi utilizada para trazer o índice de réplicas α para a exponencial externa. Se s e s_{α} são variáveis de spins de $p + 1$ estados, a $\delta_{ss_{\alpha}}$ é um polinômio simétrico em potências de s e s_{α} . Introduzindo a delta de Kröenecker para o caso de p correspondente e somando sobre as variáveis de spin s , a equação (B.13) pode ser reescrita como

$$P(\mathbf{s}) = \sum_k P_k \int \prod_{l=1}^k d\mathbf{h}_l W(\mathbf{h}_l) \quad (\text{B.15})$$

$$\times \frac{\left\langle \exp \left[-\beta \sum_{\alpha} H_0(\mathbf{s}_{\alpha}) + \beta n \sum_l \phi_0(\mathbf{h}_l, J_l) + \beta \sum_l \boldsymbol{\phi}(\mathbf{h}_l, J_l) \cdot \sum_{\alpha} \mathbf{M}(s_{\alpha}) \right] \right\rangle_{J_l}}{\chi_0^n(\mathbf{h}_l, 0)}.$$

Aqui, $\boldsymbol{\phi}(\mathbf{h}, J)$ representa um vetor de p componentes cujas componentes são as funções $\phi_i(\mathbf{h}, J)$. A componente zero não necessita ser calculada, já que tomaremos o limite $n \rightarrow 0$. Uma derivação em detalhes dos vetores $\boldsymbol{\phi}(\mathbf{h}, J)$ para aglomerados triangulares e tetragonais encontra-se nos apêndices C e D, respectivamente. Introduzindo o Ansatz de SR no lado esquerdo da equação (B.15) e levando em conta que o denominador no lado direito da equação tende a 1, a equação (B.15) pode ser reescrita na forma

$$\int d\mathbf{h} W(\mathbf{h}) \exp \left[-\beta \sum_{\alpha} H_0(\mathbf{s}_{\alpha}) + \beta \mathbf{h} \cdot \sum_{\alpha} \mathbf{M}(s_{\alpha}) \right] \quad (\text{B.16})$$

$$= \sum_k P_k \int \prod_{l=1}^k d\mathbf{h}_l W(\mathbf{h}_l) \left\langle \exp \left[-\beta \sum_{\alpha} H_0(\mathbf{s}_{\alpha}) + \beta \sum_l \boldsymbol{\phi}(\mathbf{h}_l, J_l) \cdot \sum_{\alpha} \mathbf{M}(s_{\alpha}) \right] \right\rangle_{J_l}.$$

Introduzindo uma delta de Dirac para cada componente do vetor de campos \mathbf{h} no lado direito da equação (B.16), temos

$$\int d\mathbf{h} W(\mathbf{h}) \exp \left[-\beta \sum_{\alpha} H_0(\mathbf{s}_{\alpha}) + \beta \mathbf{h} \cdot \sum_{\alpha} \mathbf{M}(s_{\alpha}) \right] \quad (\text{B.17})$$

$$= \int d\mathbf{h} \sum_k P_k \int \prod_{l=1}^k d\mathbf{h}_l W(\mathbf{h}_l) \left\langle \prod_{i=1}^p \delta \left(h_i - \sum_l \phi_i(\mathbf{h}_l, J_l) \right) \right\rangle_{J_l}$$

$$\times \exp \left[-\beta \sum_{\alpha} H_0(\mathbf{s}_{\alpha}) + \beta \mathbf{h} \cdot \sum_{\alpha} \mathbf{M}(s_{\alpha}) \right].$$

Comparando ambos lados da igualdade na equação (B.17), obtemos a equação (5.11).

Apêndice C

Funções para aglomerados de 3 spins

O aglomerado de spins assume os quatro estados: $-3/2, -1/2, 1/2, 3/2$. A representação da delta de Kröenecker para spins de quatro estados é

$$\delta_{ss_\alpha} = \frac{41}{64} - \frac{5}{16}(s^2 + s_\alpha^2) + \frac{365}{144}ss_\alpha - \frac{41}{36}(s^3s_\alpha + ss_\alpha^3) + \frac{1}{4}s^2s_\alpha^2 + \frac{5}{9}s^3s_\alpha^3. \quad (\text{C.1})$$

Introduzindo a equação (C.1) na (B.13), somando sobre s e rearranjando os termos obtemos as seguintes funções que serão substituídas na equação (B.15)

$$\beta\phi_1(\mathbf{h}, J) = \frac{\theta}{k} + \frac{27}{24} \log \frac{\chi_{\frac{1}{2}}(\mathbf{h}, J)}{\chi_{-\frac{1}{2}}(\mathbf{h}, J)} - \frac{1}{24} \log \frac{\chi_{\frac{3}{2}}(\mathbf{h}, J)}{\chi_{-\frac{3}{2}}(\mathbf{h}, J)}, \quad (\text{C.2})$$

$$\beta\phi_2(\mathbf{h}, J) = -\frac{1}{4} \log \chi_{\frac{1}{2}}(\mathbf{h}, J)\chi_{-\frac{1}{2}}(\mathbf{h}, J) + \frac{1}{4} \log \chi_{\frac{3}{2}}(\mathbf{h}, J)\chi_{-\frac{3}{2}}(\mathbf{h}, J), \quad (\text{C.3})$$

e

$$\beta\phi_3(\mathbf{h}, J) = -\frac{1}{2} \log \frac{\chi_{\frac{1}{2}}(\mathbf{h}, J)}{\chi_{-\frac{1}{2}}(\mathbf{h}, J)} + \frac{1}{6} \log \frac{\chi_{\frac{3}{2}}(\mathbf{h}, J)}{\chi_{-\frac{3}{2}}(\mathbf{h}, J)}. \quad (\text{C.4})$$

Apêndice D

Funções para aglomerados de 4 spins

Esse aglomerado assume cinco estados de spin total: $-2, -1, 0, 1, 2$. A representação da delta de Kröenecker para spins de cinco estados é

$$\begin{aligned} \delta_{ss_\alpha} = 1 - \frac{5}{4}(s^2 + s_\alpha^2) + \frac{65}{72}ss_\alpha + \frac{1}{4}(s^4 + s_\alpha^4) - \frac{17}{72}(s^3s_\alpha + ss_\alpha^3) \\ + \frac{707}{288}s^2s_\alpha^2 - \frac{155}{288}(s^4s_\alpha^2 + s^2s_\alpha^4) + \frac{5}{72}s^3s_\alpha^3 + \frac{35}{288}s^4s_\alpha^4. \end{aligned} \quad (\text{D.1})$$

Introduzindo a equação (D.1) na (B.13), somando sobre s e rearranjando os termos obtemos as seguintes funções que serão substituídas na equação (B.15)

$$\beta\phi_1(\mathbf{h}, J) = \frac{\theta}{k} - \frac{1}{12} \log \frac{\chi_{+2}(\mathbf{h}, J)}{\chi_{-2}(\mathbf{h}, J)} + \frac{2}{3} \log \frac{\chi_{+1}(\mathbf{h}, J)}{\chi_{-1}(\mathbf{h}, J)}, \quad (\text{D.2})$$

$$\beta\phi_2(\mathbf{h}, J) = -\frac{1}{24} \log \chi_{+2}(\mathbf{h}, J)\chi_{-2}(\mathbf{h}, J) + \frac{2}{3} \log \chi_{+1}(\mathbf{h}, J)\chi_{-1}(\mathbf{h}, J) - \frac{5}{4} \log \chi_0(\mathbf{h}, J), \quad (\text{D.3})$$

$$\beta\phi_3(\mathbf{h}, J) = \frac{1}{12} \log \frac{\chi_{+2}(\mathbf{h}, J)}{\chi_{-2}(\mathbf{h}, J)} - \frac{1}{6} \log \frac{\chi_{+1}(\mathbf{h}, J)}{\chi_{-1}(\mathbf{h}, J)}, \quad (\text{D.4})$$

$$\beta\phi_4(\mathbf{h}, J) = \frac{1}{24} \log \chi_{+2}(\mathbf{h}, J)\chi_{-2}(\mathbf{h}, J) - \frac{1}{6} \log \chi_{+1}(\mathbf{h}, J)\chi_{-1}(\mathbf{h}, J) + \frac{1}{4} \log \chi_0(\mathbf{h}, J). \quad (\text{D.5})$$

Apêndice E

Publicações

1. Alexandre Silveira, S.G. Magalhaes, R.Erichsen Jr.
The Anisotropic van Hemmen model with a random field in a random network
Physica A 545 (2020) 123267
2. R. Erichsen, Jr., A. Silveira, and S. G. Magalhaes
Ising spin glass in a random network with a Gaussian random field
Phys. Rev. E **103**, 022133 (2021)
3. Alexandre Silveira, R. Erichsen, Jr., and S. G. Magalhaes
Geometrical frustration and cluster spin glass with random graphs
Phys. Rev. E **103**, 052110 (2021)

Referências Bibliográficas

- [1] BARABÁSI, A.-L.; PÓSFAL, M. *Network science*. Cambridge: Cambridge University Press, 2016.
- [2] A.P. Ramirez. Geometrical frustration. In: K.H.J. Buschow (Ed.) *Handbook of Magnetic Materials*. : Elsevier, 2001. v. 13, Cap. 4, p. 423–520.
- [3] BALENTS, L. Spin liquids in frustrated magnets. *Nature*, London, v. 464, p. 199–208, 03 2010.
- [4] MOESSNER, R.; CHALKER, J. T. Properties of a classical spin liquid: The heisenberg pyrochlore antiferromagnet. *Phys. Rev. Lett.*, v. 80, p. 2929–2932, Mar 1998.
- [5] MYDOSH, J. *Spin glasses: An experimental introduction*. Taylor & Francis, 1993.
- [6] DE ALMEIDA, J. R. L.; THOULESS, D. J. Stability of the sherrington-kirkpatrick solution of a spin glass model. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, v. 11, n. 5, p. 983–990, may 1978.
- [7] MONTENEGRO, F. C.; KING, A. R.; JACCARINO, V.; HAN, S.-J.; BELANGER, D. P. Random-field-induced spin-glass-like behavior in the diluted Ising antiferromagnet $\text{Fe}_{0.31}\text{Zn}_{0.69}\text{F}_2$. *Phys. Rev. B*, v. 44, p. 2155–2160, Aug 1991.
- [8] Ising, E. Beitrag zur Theorie des Ferromagnetismus. *Zeitschrift fur Physik*, v. 31, n. 1, p. 253–258, Feb. 1925.
- [9] Néel, M. L. Propriétés magnétiques des ferrites ; ferrimagnétisme et antiferromagnétisme. *Annales de Physique*, v. 12, n. 3, p. 137–198, Jan. 1948.
- [10] CANNELLA, V.; MYDOSH, J. A. Magnetic ordering in gold-iron alloys. *Phys. Rev. B*, v. 6, p. 4220–4237, Dec 1972.
- [11] RAMIREZ, A. P. Strongly geometrically frustrated magnets. *Annual Review of Materials Science*, v. 24, n. 1, p. 453–480, 1994.
- [12] RAMIREZ, A. P. Geometrical frustration in magnetism. *Czechoslovak Journal of Physics*, v. 46, n. 6, p. 3247, Jun 1996.
- [13] Erdős, P. and Rényi, A. On random graphs i. *Publicationes Mathematicae Debrecen*, v. 6, p. 290, 1959.
- [14] ERDŐS, P.; RÉNYI, A. *On random graphs. i.* 1959. v. 6.
- [15] Albert, R.; Jeong, H.; Barabási, A.-L. Internet: Diameter of the World-Wide Web. *Nature*, London, v. 401, n. 6749, p. 130–131, Sept. 1999.

- [16] EULER, L. Solutio problemat is ad geometriam situs pertinentis. *Commentarii Academiae Scientiarum Imperialis Petropolitanae*, v. 8, p. 128–140, 1741.
- [17] BOLLOBÁS, B.; BÉLA, B.; FULTON, W.; KATOK, A.; KIRWAN, F.; SARNAK, P.; SIMON, B. *Random graphs*. Cambridge Studies in Advanced Mathematics. Cambridge University Press, 2001.
- [18] ALBERT, R.; BARABÁSI, A.-L. Statistical mechanics of complex networks. *Rev. Mod. Phys.*, v. 74, p. 47–97, Jan 2002.
- [19] WEIGEL, M.; JOHNSTON, D. Frustration effects in antiferromagnets on planar random graphs. *Phys. Rev. B*, v. 76, p. 054408, Aug 2007.
- [20] Monod, P.; Bouchiat, H. Equilibrium magnetization of a spin glass : is mean-field theory valid ? *J. Physique Lett.*, v. 43, n. 2, p. 45–53, 1982.
- [21] Bouchiat, H. Determination of the critical exponents in the Ag Mn spin glass. *Journal de Physique I*, v. 47, n. 1, p. 71–88, Jan. 1986.
- [22] KONDO, J. Resistance Minimum in Dilute Magnetic Alloys. *Progress of Theoretical Physics*, Kyoto, v. 32, n. 1, p. 37–49, 07 1964.
- [23] RUDERMAN, M. A.; KITTEL, C. Indirect exchange coupling of nuclear magnetic moments by conduction electrons. *Phys. Rev.*, v. 96, p. 99–102, Oct 1954.
- [24] YOSIDA, K. Magnetic properties of cu-mn alloys. *Phys. Rev.*, v. 106, p. 893–898, Jun 1957.
- [25] KASUYA, T. A Theory of Metallic Ferro- and Antiferromagnetism on Zener’s Model. *Progress of Theoretical Physics*, Kyoto, v. 16, n. 1, p. 45–57, 07 1956.
- [26] FISCHER, K.; HERTZ, J. *Spin glasses*. Cambridge Studies in Magnetism. Cambridge University Press, 1993.
- [27] CHALKER, J. T. *Geometrically frustrated antiferromagnets: Statistical mechanics and dynamics*. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2011. p. 3–22.
- [28] CHALKER, J. T. *Spin liquids and frustrated magnetism*. Oxford: Oxford University Press, 2017. p. 123–162.
- [29] GINGRAS, M. J. P. *Spin ice*. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2011. p. 293–329.
- [30] MOESSNER, R.; RAMIREZ, A. P. Geometrical frustration. *Physics Today*, v. 59, n. 2, p. 24–29, 2006.
- [31] NAGLE, J. F. Lattice statistics of hydrogen bonded crystals. i. the residual entropy of ice. *Journal of Mathematical Physics*, New York, v. 7, n. 8, p. 1484–1491, 1966.
- [32] Ramirez, A. P.; Hayashi, A.; Cava, R. J.; Siddharthan, R.; Shastry, B. S. Zero-point entropy in ‘spin ice’. *Nature*, London, v. 399, n. 6734, p. 333–335, May 1999.
- [33] F.R.S., J. C. M. L. on the calculation of the equilibrium and stiffness of frames. *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science*, v. 27, n. 182, p. 294–299, 1864.

- [34] REIMERS, J. N.; BERLINSKY, A. J.; SHI, A.-C. Mean-field approach to magnetic ordering in highly frustrated pyrochlores. *Phys. Rev. B*, v. 43, p. 865–878, Jan 1991.
- [35] WANNIER, G. H. Antiferromagnetism. the triangular ising net. *Phys. Rev.*, v. 79, p. 357–364, Jul 1950.
- [36] HOUTAPPEL, R. Order-disorder in hexagonal lattices. *Physica*, v. 16, n. 5, p. 425–455, 1950.
- [37] COLEMAN, P.; SCHÖNHAMMER, K.; PAVARINI, E.; NEVIDOMSKYY, A.; COSTI, T.; INGERSENT, K.; MILA, F.; JANIŠ, V.; FRÉSARD, R.; MIELKE, A.; EDER, R.; SÉNÉCHAL, D.; MAIER, T.; KOCH, E.; FRANCHINI, C. *Many-body physics: From kondo to hubbard*. 08 2015.
- [38] LEE, D. H.; JOANNOPOULOS, J. D.; NEGELE, J. W.; LANDAU, D. P. Discrete-symmetry breaking and novel critical phenomena in an antiferromagnetic planar (XY) model in two dimensions. *Phys. Rev. Lett.*, v. 52, p. 433–436, Feb 1984.
- [39] WANNIER, G. H. The statistical problem in cooperative phenomena. *Rev. Mod. Phys.*, v. 17, p. 50–60, Jan 1945.
- [40] STEPHENSON, J. Ising-model spin correlations on the triangular lattice. iii. isotropic antiferromagnetic lattice. *Journal of Mathematical Physics*, New York, v. 11, n. 2, p. 413–419, 1970.
- [41] Villain, J. Insulating spin glasses. *Zeitschrift fur Physik B Condensed Matter*, v. 33, n. 1, p. 31–42, Mar. 1979.
- [42] ANDERSON, P. W. Generalizations of the weiss molecular field theory of antiferromagnetism. *Phys. Rev.*, v. 79, p. 705–710, Aug 1950.
- [43] TER HAAR, D.; LINES, M. E.; BLEANEY, B. A molecular-field theory of anisotropic ferromagnetica. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences*, v. 254, n. 1046, p. 521–555, 1962.
- [44] HARRIS, M. J.; BRAMWELL, S. T.; MCMORROW, D. F.; ZEISKE, T.; GODFREY, K. W. Geometrical frustration in the ferromagnetic pyrochlore $\text{ho}_2\text{ti}_2\text{O}_7$. *Phys. Rev. Lett.*, v. 79, p. 2554–2557, Sep 1997.
- [45] ISAKOV, S. V.; GREGOR, K.; MOESSNER, R.; SONDHI, S. L. Dipolar spin correlations in classical pyrochlore magnets. *Phys. Rev. Lett.*, v. 93, p. 167204, Oct 2004.
- [46] EDWARDS, S. F.; ANDERSON, P. W. Theory of spin glasses. *Journal of Physics F: Metal Physics*, v. 5, n. 5, p. 965–974, may 1975.
- [47] PALMER, R. Broken ergodicity. *Advances in Physics*, London, v. 31, n. 6, p. 669–735, 1982.
- [48] DOTSENKO, V. *Introduction to the replica theory of disordered statistical systems*. Aléa-Saclay. Cambridge University Press, 2005.
- [49] YANG, C. N.; LEE, T. D. Statistical theory of equations of state and phase transitions. i. theory of condensation. *Phys. Rev.*, v. 87, p. 404–409, Aug 1952.
- [50] SALINAS, S. *Introdução a física estatística vol. 09*. EDUSP, 1997.

- [51] SHERRINGTON, D.; KIRKPATRICK, S. Solvable model of a spin-glass. *Phys. Rev. Lett.*, v. 35, p. 1792–1796, Dec 1975.
- [52] MEZARD, M.; PARISI, G.; VIRASORO, M. *Spin glass theory and beyond*. Lecture Notes in Physics Series. World Scientific, 1987.
- [53] Castellani, T.; Cavagna, A. Spin-glass theory for pedestrians. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, v. 5, p. 05012, May 2005.
- [54] HUBBARD, J. Calculation of partition functions. *Phys. Rev. Lett.*, v. 3, p. 77–78, Jul 1959.
- [55] Stratonovich, R. L. On a Method of Calculating Quantum Distribution Functions. *Soviet Physics Doklady*, v. 2, p. 416, July 1957.
- [56] BINDER, K.; YOUNG, A. P. Spin glasses: Experimental facts, theoretical concepts, and open questions. *Rev. Mod. Phys.*, v. 58, p. 801–976, Oct 1986.
- [57] DE DOMINICIS, C.; GIARDINA, I. *Random fields and spin glasses: A field theory approach*. Cambridge University Press, 2006.
- [58] PARISI, G. The order parameter for spin glasses: a function on the interval 0-1. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, v. 13, n. 3, p. 1101–1112, mar 1980.
- [59] PARISI, G. A sequence of approximated solutions to the s-k model for spin glasses. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, v. 13, n. 4, p. L115–L121, apr 1980.
- [60] PARISI, G. Magnetic properties of spin glasses in a new mean field theory. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, v. 13, n. 5, p. 1887–1895, may 1980.
- [61] THOULESS, D. J.; ANDERSON, P. W.; PALMER, R. G. Solution of 'solvable model of a spin glass'. *The Philosophical Magazine: A Journal of Theoretical Experimental and Applied Physics*, v. 35, n. 3, p. 593–601, 1977.
- [62] Mézard, M.; Parisi, G. The Bethe lattice spin glass revisited. *European Physical Journal B*, v. 20, p. 217–233, Mar. 2001.
- [63] Kabashima, Y.; Murayama, T.; Saad, D. Typical Performance of Gallager-Type Error-Correcting Codes. *Physical Review Letters*, Woodbury, v. 84, p. 1355–1358, Feb. 2000.
- [64] Skantzos, N. S.; Saad, D.; Kabashima, Y. Analysis of common attacks in public-key cryptosystems based on low-density parity-check codes. *Phys. Rev. E*, v. 68, n. 5, p. 056125, Nov. 2003.
- [65] KABASHIMA, Y.; SAAD, D. Statistical mechanics of low-density parity-check codes. *J. Phys. A: Math. Gen.*, v. 37, p. R1–R43, 2004.
- [66] Skantzos, N. S.; van Mourik, J.; Saad, D.; Kabashima, Y. Average and reliability error exponents in low-density parity-check codes. *Journal of Physics A Mathematical General*, v. 36, p. 11131–11141, Oct. 2003.
- [67] MONASSON, R.; ZECCHINA, R. Statistical mechanics of the random k-satisfiability model. *Phys. Rev. E*, v. 56, p. 1357–, 1997.
- [68] Cocco, S.; Monasson, R. Trajectories in Phase Diagrams, Growth Processes, and Computational Complexity: How Search Algorithms Solve the 3-Satisfiability Problem. *Physical Review Letters*, Woodbury, v. 86, p. 1654–1657, Feb. 2001.

- [69] Nikolettopoulos, T.; Coolen, A. C. C.; Pérez Castillo, I.; Skantzos, N. S.; Hatchett, J. P. L.; Wemmenhove, B. Replicated transfer matrix analysis of Ising spin models on 'small world' lattices. *Journal of Physics A Mathematical General*, v. 37, p. 6455–6475, June 2004.
- [70] VIANA, L.; BRAY, A. J. Phase diagrams for dilute spin glasses. *J. Phys. C:Solid State Phys.*, v. 18, p. 3037, 1985.
- [71] KANTER, I.; SOMPOLINSKY, H. Mean-field theory of spin-glasses with finite coordination number. *Phys. Rev. Lett.*, v. 58, p. 164–167, Jan 1987.
- [72] WEMMENHOVE, B.; COOLEN, A. C. C. Finite connectivity attractor neural networks. *J. Phys. A: Math. Gen.*, v. 36, p. 9617–9633, 2003.
- [73] Pérez Castillo, I.; Wemmenhove, B.; Hatchett, J. P. L.; Coolen, A. C. C.; Skantzos, N. S.; Nikolettopoulos, T. Analytic solution of attractor neural networks on scale-free graphs. *Journal of Physics A Mathematical General*, v. 37, p. 8789–8799, Sept. 2004.
- [74] Pérez Castillo, I.; Skantzos, N. S. The Little Hopfield model on a sparse random graph. *Journal of Physics A Mathematical General*, v. 37, p. 9087–9099, Oct. 2004.
- [75] Wemmenhove, B.; Skantzos, N. S. Slowly evolving random graphs II: adaptive geometry in finite-connectivity Hopfield models. *Journal of Physics A Mathematical General*, v. 37, p. 7843–7858, Aug. 2004.
- [76] AMIT, D. J.; GUTFREUND, H.; SOMPOLINSKY, H. Storing infinite numbers of patterns in a spin-glass model of neural networks. *Phys. Rev. Lett.*, v. 55, p. 1530–1533, Sep 1985.
- [77] AMIT, D. J.; GUTFREUND, H.; SOMPOLINSKY, H. Spin-glass models of neural networks. *Phys. Rev. A*, v. 32, p. 1007–1018, Aug 1985.
- [78] AMIT, D. J.; GUTFREUND, H.; SOMPOLINSKY, H. Statistical mechanics of neural networks near saturation. *Annals of Physics*, New York, v. 173, n. 1, p. 30 – 67, 1987.
- [79] IMRY, Y.; MA, S.-K. Random-field instability of the ordered state of continuous symmetry. *Phys. Rev. Lett.*, v. 35, p. 1399–1401, Nov 1975.
- [80] CARDY, J. L. Random-field effects in site-disordered ising antiferromagnets. *Phys. Rev. B*, v. 29, p. 505–507, Jan 1984.
- [81] Montenegro, F. C.; Rezende, S. M.; Coutinho-Filho, M. D. Evidence for a spin-glass behavior in the diluted antiferromagnet $\text{Fe}_x\text{Zn}_{1-x}\text{F}_2$. *Journal of Applied Physics*, Woodbury, v. 63, n. 8, p. 3755–3757, Apr. 1988.
- [82] Montenegro, F. C.; Coutinho-Filho, M. D.; Rezende, S. M. Ising criticality in spin glasses: $\text{Fe}_{0.25}\text{Zn}_{0.75}\text{F}_2$. *EPL (Europhysics Letters)*, v. 8, p. 383, Feb. 1989.
- [83] REZENDE, S.; MONTENEGRO, F.; COUTINHO-FILHO, M.; BECERRA, C.; PADUAN-FILHO, A. DYNAMIC SCALING IN THE ISING SPIN GLASS $\text{Fe}_{0.25}\text{Zn}_{0.75}\text{F}_2$. *Journal de Physique Colloques*, v. 49, n. C8, p. C8–1267–C8–1268, 1988.
- [84] Montenegro, F. C.; Leitão, U. A.; Coutinho-Filho, M. D.; Rezende, S. M. Crossover from random field to spin-glass behavior in $\text{Fe}_x\text{Zn}_{1-x}\text{F}_2$. *Journal of Applied Physics*, Woodbury, v. 67, n. 9, p. 5243–5245, May 1990.

- [85] BELANGER, D. P.; MURRAY, W. E.; MONTENEGRO, F. C.; KING, A. R.; JACCARINO, V.; ERWIN, R. W. Neutron-scattering study of an Ising antiferromagnet above the percolation threshold: Random-field-induced spin-glass-like behavior in $\text{Fe}_{0.31}\text{Zn}_{0.69}\text{F}_2$. *Phys. Rev. B*, v. 44, p. 2161–2168, Aug 1991.
- [86] BELANGER, D. P.; YOSHIKAWA, H. Neutron-scattering study of the random-exchange Ising system $\text{Fe}_x\text{Zn}_{1-x}\text{F}_2$ near the percolation threshold. *Phys. Rev. B*, v. 47, p. 5051–5058, Mar 1993.
- [87] VAN HEMMEN, J. L. Classical spin-glass model. *Phys. Rev. Lett.*, v. 49, p. 409–412, Aug 1982.
- [88] VAN HEMMEN, J. L.; VAN ENTER, A. C. D.; CANISIUS, J. On a classical spin glass model. *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter*, v. 50, n. 4, p. 311–336, Dec 1983.
- [89] BLUME, M. Theory of the first-order magnetic phase change in UO_2 . *Phys. Rev.*, v. 141, p. 517–524, Jan 1966.
- [90] Capel, H. W. On the possibility of first-order phase transitions in Ising systems of triplet ions with zero-field splitting. *Physica*, v. 32, n. 5, p. 966–988, May 1966.
- [91] GHATAK, S. K.; SHERRINGTON, D. Crystal field effects in a general s ising spin glass. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, v. 10, n. 16, p. 3149–3156, aug 1977.
- [92] MORAIS, C. V.; MAGALHÃES, S. G.; NOBRE, F. D. The sherrington–kirkpatrick model in the presence of a bimodal random field: a one-step replica-symmetry-breaking approach. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, v. 2012, n. 01, p. P01013, jan 2012.
- [93] MAGALHÃES, S. G.; MORAIS, C. V.; NOBRE, F. D. One-step replica-symmetry-breaking solution of the sherrington–kirkpatrick model under a gaussian random field. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, v. 2011, n. 07, p. P07014, jul 2011.
- [94] SOARES, R. F.; NOBRE, F. D.; DE ALMEIDA, J. R. L. Effects of a gaussian random field in the sherrington-kirkpatrick spin glass. *Phys. Rev. B*, v. 50, p. 6151–6156, Sep 1994.
- [95] MORAIS, C. V.; LAZO, M. J.; ZIMMER, F. M.; MAGALHAES, S. G. Inverse freezing in the ghatak-sherrington model with a random field. *Phys. Rev. E*, v. 85, p. 031133, Mar 2012.
- [96] CHOY, T. C.; SHERRINGTON, D. The van hemmen model—a true spin glass? *Journal of Physics C: Solid State Physics*, v. 17, n. 4, p. 739–745, feb 1984.
- [97] MAGALHAES, S.; BERGER, I.; ERICHSEN, R. Unfolding of phases and multicritical points in the classical anisotropic van hemmen spin glass model with random field. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, Amsterdam, v. 479, p. 5 – 11, 2019.
- [98] MONASSON, R. Optimization problems and replica symmetry breaking in finite connectivity spin glasses. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, v. 31, n. 2, p. 513–529, jan 1998.
- [99] VAN HEMMEN, J. L.; KÜHN, R. Nonlinear neural networks. *Phys. Rev. Lett.*, v. 57, p. 913–916, Aug 1986.

- [100] COOLEN, A. C. C.; SKANTZOS, N. S.; CASTILLO, I. P.; VICENTE, C. J. P.; HAT-CHETT, J. P. L.; WEMMENHOVE, B.; NIKOLETOPOULOS, T. Finitely connected vector spin systems with random matrix interactions. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, v. 38, n. 39, p. 8289–8317, sep 2005.
- [101] ABOU-CHACRA, R.; THOULESS, D. J.; ANDERSON, P. W. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, v. 6, n. 10, p. 1734–1752, may 1973.
- [102] ERICHSEN, R.; LOPES, A. A.; MAGALHAES, S. G. Multicritical points and topology-induced inverse transition in the random-field blume-capel model in a random network. *Phys. Rev. E*, v. 95, p. 062113, Jun 2017.
- [103] MARTINO, D. D.; BRADDE, S.; DALL'ASTA, L.; MARSILI, M. Topology-induced inverse phase transitions. *Europhys. Lett.*, v. 98, n. 4, p. 40004, may 2012.
- [104] THOULESS, D. J. Spin-glass on a bethe lattice. *Phys. Rev. Lett.*, v. 56, p. 1082–1085, Mar 1986.
- [105] KWON, C.; THOULESS, D. J. Spin glass with two replicas on a bethe lattice. *Phys. Rev. B*, v. 43, p. 8379–8390, Apr 1991.
- [106] DE OLIVEIRA, M. J.; SALINAS, S. R. Symmetry breaking of a spin glass on a bethe lattice of infinite coordination. *Phys. Rev. B*, v. 35, p. 2005–2007, Feb 1987.
- [107] VASSEUR, R.; LOOKMAN, T. Effects of disorder in ferroelastics: A spin model for strain glass. *Phys. Rev. B*, v. 81, p. 094107, Mar 2010.
- [108] SHERRINGTON, D. A spin glass perspective on ferroic glasses. *physica status solidi (b)*, v. 251, n. 10, p. 1967–1981, 2014.
- [109] SOARES, R. F.; NOBRE, F. D.; DE ALMEIDA, J. R. L. Effects of a gaussian random field in the sherrington-kirkpatrick spin glass. *Phys. Rev. B*, v. 50, p. 6151–6156, Sep 1994.
- [110] NERI, I.; METZ, F. L.; BOLLÉ, D. The phase diagram of lévy spin glasses. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, v. 2010, n. 01, p. P01010, jan 2010.
- [111] DORIA, F.; Erichsen Jr., R.; DOMINGUEZ, D.; GONZÁLEZ, M.; MAGALHAES, S. Random field ising model in a random graph. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, v. 422, p. 58–65, 2015.
- [112] SOUKOULIS, C. M.; LEVIN, K. Cluster mean-field theory of spin-glasses. *Phys. Rev. Lett.*, v. 39, p. 581–584, Aug 1977.
- [113] SOUKOULIS, C. M. Thermodynamic properties of concentrated spin glasses: A cluster mean-field theory. *Phys. Rev. B*, v. 18, p. 3757–3759, Oct 1978.
- [114] SOUKOULIS, C. M.; LEVIN, K. Cluster mean-field model of the spin glasses: static properties. *Phys. Rev. B*, v. 18, p. 1439–1445, Aug 1978.
- [115] SCHMIDT, M.; ZIMMER, F. M.; MAGALHAES, S. G. Spin liquid and infinitesimal-disorder-driven cluster spin glass in the kagome lattice. *Journal of Physics: Condensed Matter*, Bristol, v. 29, n. 16, p. 165801, mar 2017.

- [116] SCHMIDT, M.; ZIMMER, F.; MAGALHAES, S. Spin glass induced by infinitesimal disorder in geometrically frustrated kagome lattice. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, v. 438, p. 416 – 423, 2015.
- [117] ZIMMER, F. M.; SILVA, C. F.; MAGALHAES, S. G.; LACROIX, C. Interplay between spin-glass clusters and geometrical frustration. *Phys. Rev. E*, v. 89, p. 022120, Feb 2014.
- [118] SILVA, C. F.; ZIMMER, F. M.; MAGALHAES, S. G.; LACROIX, C. Inverse freezing in a cluster ising spin-glass model with antiferromagnetic interactions. *Phys. Rev. E*, v. 86, p. 051104, Nov 2012.
- [119] POHLE, R.; BENTON, O.; JAUBERT, L. D. C. Reentrance of disorder in the anisotropic shuriken ising model. *Phys. Rev. B*, v. 94, p. 014429, Jul 2016.
- [120] SCHUPPER, N.; SHNERB, N. M. Inverse melting and inverse freezing: A spin model. *Phys. Rev. E*, v. 72, p. 046107, Oct 2005.
- [121] YAMAMOTO, D. Correlated cluster mean-field theory for spin systems. *Phys. Rev. B*, v. 79, p. 144427, Apr 2009.