

28 500,00

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL  
INSTITUTO DE FISICA

MODELOS ALEATORIOS DE POTTS<sup>+</sup>

David Renato Carreta Dominguez

Dissertação realizada sob a orientação do Dr. Walter Karl Theumann e apresentada no Instituto de Física da UFRGS, em preenchimento parcial dos requisitos para obtenção do título de mestre em física.

+ Trabalho parcialmente financiado pelo Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPQ) e pela Financiadora de Estudos e Projetos (FINEP).

Porto Alegre

1987

FT 75.10.H (Pess.)  
F05 70.F

A memória de Débora Brasil Balbão

## Agradecimentos

A W. K. Theumann, pela profunda influência em minha formação como pesquisador;

A A. Theumann, M. Betz, H. Girotti, I. Strauch, pela minha formação acadêmica;

A J. Kaschny, pela valorosa colaboração no computador;

A O. Moraes, C. Ruas, S. Zamora, R. Sommer e I. Cajazeiras pelo agradável convívio em sala.

A D. Mosca, R. Hubler, G. Pereira, P. Krebs, R. Consiglio, S. Magalhães, J. Coelho Jr., e R. Dalaglio pelas discussões sobre teorias e experimentos, pelos seminários sobre modelos e pela companhia na CPG.

A minha família pelo apoio recebido.

## RESUMO

Neste trabalho estudamos as propriedades termodinâmicas de sistemas magnéticos com impurezas, representáveis por um campo aleatório ou por vidro de spin no modelo de Potts. Obtemos uma série de novos resultados, alguns formais e outros explícitos.

Encontramos os requerimentos necessários para a existência de um ponto crítico no diagrama de fases para o problema do campo aleatório, envolvendo temperatura, campo externo e impurezas. Para isso encontramos soluções particulares numérica e analiticamente, com especial interesse ao caso de  $q=3$  estados.

Paralelamente observamos a relação entre os diversos métodos rigorosos de cálculo dos modelos de Potts com aleatoriedade. Estudamos a teoria do campo médio, generalizando certos resultados conhecidos. Neste sentido aplicamos o método de van Hemmen aos problemas do campo aleatório e do vidro de spin para fundamentar a teoria. Também se estabeleceu a correção da técnica das réplicas no modelo de Potts.

## INDICE

RESUMO	4
I- INTRODUÇÃO	6
II- RESULTADOS EXATOS EM TEORIA DE CAMPO MEDIO	11
a) Interação de alcance infinito	11
b) Interação com vizinhos mais próximos	15
c) Técnica de réplicas	17
III- CAMPO ALEATORIO DE POTTS	22
a) Cálculo direto da energia livre	22
b) Resultados analíticos	28
c) Resultados numéricos	33
d) Expansão de Landau	38
IV- SOLUÇÕES FORMALMENTE RIGOROSAS	53
a) Método de van Hemmen	53
b) Justificativa do método	62
V- VIDRO DE SPIN DE POTTS	67
a) Método da ergodicidade	67
b) Método de réplicas	69
c) Método de Sherrington-Kirkpatrick	75
VI- CONCLUSOES	82
VII- APENDICES	84
1) Cálculo dos parâmetros de ordem	84
2) Programa numerico	90
REFERENCIAS	92

É de grande interesse atualmente o estudo das propriedades termodinâmicas dos sistemas com impurezas, representáveis por aleatoriedade, ou seja na interação de troca, ou no campo. O objetivo desta dissertação é estudar as transições de fases desses sistemas baseado nos métodos da mecânica estatística.

Alguns sistemas físicos descritos por campos aleatórios são as camadas adsorvidas, impurezas regulares e magnetos desordenados, incluindo um campo uniforme aplicado ao vidro de spin ou diluição de sítios, por exemplo.<sup>36</sup> O efeito de um campo aleatório é o de criar um ordenamento local,<sup>1</sup> quebrando o sistema em domínios<sup>2</sup> e favorecendo uma mudança descontínua nos parâmetros de ordem de relevância, os quais são a magnetização e o de spin-glass,<sup>3</sup> definidos por:

$$\begin{aligned} \vec{m} &\equiv [\langle \vec{\sigma}_i \rangle] \\ \vec{q} &\equiv [\langle \vec{\sigma}_i \rangle \cdot \langle \vec{\sigma}_j \rangle] \end{aligned} \quad (\text{I-1})$$

onde o braket  $\langle \dots \rangle$  indica o promedio estatístico e o colchete  $[\dots]$  o promedio configuracional.

A relação entre os modelos de vidro de spin e de campo aleatório<sup>4,5</sup> está no fato que é possível colocar a interação de troca aleatória como um campo local<sup>6</sup>:

$$\sum_j J_{ij} \vec{\sigma}_j \rightarrow \vec{h}_i \quad (\text{I-2})$$

A diferença é que o parâmetro de spin-glass no segundo caso se refere a um único spin, não indicando correlação como no modelo de vidro de spin.

Um aspecto já abordado para o modelo de Ising<sup>7</sup> ordenado é a dependência da energia livre com o alcance da interação de troca. Nós generalizamos os resultados conhecidos para o modelo de Potts<sup>8</sup> com aleatoriedade.

O modelo de Potts tem tido intensa pesquisa na última década.<sup>9</sup> Tendo um comportamento crítico e transições de fase extremamente ricos, o modelo ainda se relaciona com vários outros problemas, como:

- o modelo de vértices;
- o processo de percolação (q=1);
- a rede de resistores (q=0);
- o vidro de spin diluído (q=1/2).

Além disso, sua realização experimental é bastante diversificada, descrevendo por exemplo:

- as substâncias magnéticas (q=2, Ising);
- algumas transições estruturais (q=3);
- sistemas adsorvidos (q=4);
- sistemas poliméricos (0 < q < 1).

O Hamiltoniano utilizado para o modelo de Potts de q-estados terá a forma geral:

$$\mathcal{H} = - \sum_{(i,j)}^N J_{ij} \delta_{n_i, n_j} - H \sum_i^N \delta_{n_i, 1} - \sum_i^N h_i \delta_{\tau_i, n_i} \quad (\text{I-3})$$

onde a delta de Kronecker pode ser representada nas seguintes maneiras:

i) a planar e complexa:

$$q \delta_{\lambda_i, \lambda_j} = \sum_{\pi=0}^{q-1} \lambda_i^\pi \lambda_j^{q-\pi};$$

$$\lambda_i \equiv \omega^{\kappa_i}, \quad \omega \equiv e^{2\pi i/q}, \quad \kappa_i \in \mathbb{N} \quad (\text{I-4})$$

ii) a simplex, ou standard, onde usamos os vetores direcionados aos vértices de um hipertetraedro de  $(q-1)$  dimensões,

$$\begin{cases} q \delta_{\alpha_i, \beta_j} - 1 = (q-1) \vec{e}_i^\alpha \cdot \vec{e}_j^\beta \\ \sum_{\alpha=1}^q e_\alpha^\alpha e_i^\alpha = q \delta_{\kappa, i} / (q-1) \\ \sum_{\alpha} \vec{e}^\alpha = 0 \end{cases} \quad (\text{I-5})$$

sendo que as tres equações definem o produto escalar e formam um vínculo e a condição de normalização.

Como foi demonstrado<sup>11</sup>, o limite de graus de liberdade no parâmetro de ordem nulo, corresponde aos modelos aleatórios, daí foi desenvolvida uma técnica de réplicas baseada na igualdade:

$$\lim_{n \rightarrow 0} x = \lim_{n \rightarrow 0} \tilde{n}^{-1} (x^n - 1) \quad (\text{I-6})$$

para estudar estes modelos. Sendo que a troca deste limite com o limite termodinâmico apresenta algumas dificuldades matemáticas,<sup>12,13</sup> investigamos a aplicação desta técnica aos modelos de campo aleatório no segundo capítulo e ao de vidro de spin no quinto.



Dos numerosos resultados encontrados para o modelo de Potts podemos citar entre aqueles relacionados ao nosso trabalho os seguintes:

i) Os modelos unicamente com campo aleatório, resolvidos numericamente com uma distribuição discreta e outra contínua,<sup>14</sup> ou analiticamente numa expansão de Landau,<sup>15</sup> para  $q=3,4$  estados, apresentam transição de fase sempre de primeira ordem, na ausência de campo externo. Não se tem achado transições de segunda ordem, seja na forma de um ponto crítico ou de um ponto tricrítico.

ii) No outro limite, de modelos com campo uniforme sem campo aleatório, a situação é a seguinte. Para  $q=2$  apresentam transição de segunda ordem em campo nulo; para  $q=3$  (com duas componentes do parâmetro de ordem: uma transversal e outra paralela ao campo) foram encontrados um ponto tricrítico<sup>26</sup> na fase com magnetização transversal não nula e um ponto crítico terminando a transição na fase de componente longitudinal. A energia livre do modelo, na expansão de Landau,<sup>16</sup> é:

$$F = \nu \lambda^4 + \omega (\lambda_1^3 - 3 \lambda_1 \lambda_2) + \frac{\eta}{2} \lambda^2 - H \lambda_1$$

$$\lambda_1 // H, \lambda_2 \perp H, \lambda = |\vec{\lambda}|$$
(I-7)

iii) O modelo de Ising ( $q=2$ ) com os dois campos, aleatório e uniforme, possui um ponto tricrítico e a transição se torna descontínua quando o campo aleatório é elevado;<sup>2</sup> o modelo de Potts com  $q=3$  vem sendo estudado contemporaneamente.<sup>18</sup>

No capítulo III tratamos do problema dos campos externo e

aleatório para qualquer dimensão de spin, e procuramos uma relação do ponto crítico com o número de estados  $q$  e nas variáveis temperatura, campo uniforme e dispersão do campo aleatório, obtendo resultados analíticos e numéricos onde foi possível.

A expansão em série do parâmetro de ordem <sup>19</sup> se faz considerando apenas a componente na direção do campo externo: o ponto tricrítico foi portanto excluído do trabalho. A dependência na distribuição de probabilidade também não foi considerada, embora haja indícios da importância da localização de seu máximo. <sup>20, 21</sup>

O método de cálculo da energia livre utilizado é convencionalmente tomado como o promedio configuracional da energia livre congelada, isto é, da energia de uma dada configuração, segundo a equação:

$$-\beta F = [\ln Z] , \quad Z \equiv \text{Tr} e^{-\beta \mathcal{H}} \quad (I-8)$$

A justificação de tal método é apresentada no capítulo IV, seguindo a demonstração feita para um modelo de vidro de spin, <sup>22</sup> com um argumento de ergodicidade.

Finalmente, usando primeiro um método encontrado no capítulo anterior e depois a simetria de réplica, calculamos a energia livre do modelo de vidro de spin de Potts, <sup>23, 24</sup> no quinto capítulo. Discutimos a existência de um método de réplicas diferente do tradicional. <sup>30</sup>

Os apêndices são reservados ao cálculo dos coeficientes da expansão do capítulo III, às equações autoconsistentes para o parâmetro de ordem do terceiro, e para o programa de cálculo numérico utilizado.

## (II) RESULTADOS EXATOS EM TEORIA DE CAMPO MEDIO

### A) Interação de alcance infinito.

Consideramos o Hamiltoniano de Potts com interação de alcance infinito:

$$\mathcal{H} = \frac{-1}{2N} \sum_{i,j}^N J_{ij} \vec{e}_i^\mu \cdot \vec{e}_j^\mu - \vec{H} \cdot \sum_i^N \vec{e}_i^\mu - \sum_i^N \vec{h}_i^\lambda \cdot \vec{e}_i^\mu \quad (\text{II-1})$$
$$\mu = 1, 2, \dots, q$$

onde tomamos o campo uniforme e o campo aleatório devido á impurezas no sítio  $i$  de uma rede regular com  $N$  sítios, com a simetria dos vetores de Potts, respectivamente representados por:

$$\begin{cases} \vec{H} = H \vec{e}^1 \\ \vec{h}_i^\lambda = h \vec{e}_i^\lambda \end{cases} \quad (\text{II-2})$$

A média configuracional da energia livre é dada por

$$-\beta F = [\ln Z], \quad Z = \text{Tr} e^{-\beta \mathcal{H}} \quad (\text{II-3})$$

onde o colchetes indica a média configuracional, feita sobre aleatoriedade do modelo. Assim, se pudermos escrever a interação de troca com as variáveis aleatórias

$$(\xi_i, \eta_j), \text{ tal que } J_{ij} = J \xi_i \eta_j, \quad (\text{II-4})$$

a função partição terá a forma

$$Z = \text{Tr} \exp \beta \left\{ \frac{Z}{2N} \left( \sum_i \xi_i \vec{e}_i^\mu \right)^2 + \vec{H} \cdot \sum_i \vec{e}_i^\mu + \sum_i \vec{h}_i^\mu \cdot \vec{e}_i^\mu \right\} \quad (\text{II-5})$$

Usando a relação

$$e^{a^2/2} = \int \frac{dx}{\sqrt{2\pi}} \exp(-x^2/2 + ax) \quad (\text{II-6})$$

para o primeiro termo da exponencial, obtemos

$$e^{\frac{\beta Z}{2N} \left( \sum_i \xi_i \vec{e}_i^\mu \right)^2} = \int \frac{d\vec{x}}{(2\pi/N)^{q/2}} \exp \left\{ -\frac{N}{2} \vec{x}^2 + \sqrt{\beta Z} \sum_i \xi_i \vec{e}_i^\mu \cdot \vec{x} \right\} \quad (\text{II-7})$$

onde  $\vec{x}$  é um vetor de  $(q-1)$  componentes dimensionais para resguardar a simetria do modelo. Então a equação (II-5) fica

$$Z = \int \frac{d\vec{x}}{(2\pi/N)^{q/2}} e^{-\frac{N}{2} \vec{x}^2} \text{Tr} \prod_i \exp \left\{ \sqrt{\beta Z} \xi_i \vec{e}_i^\mu \cdot \vec{x} + \beta \vec{H} \cdot \vec{e}_i^\mu + \beta \vec{h}_i^\mu \cdot \vec{e}_i^\mu \right\} \quad (\text{II-8})$$

ou ainda, sabendo-se que

$$\text{Tr} \prod_i e^{f_i} = \exp N \left( \frac{Z}{N} \ln \text{Tr} e^f \right), \quad (\text{II-9})$$

temos

$$Z = \int \frac{d\vec{x}}{(2\pi/N)^{q/2}} \exp^N \left\{ -\frac{1}{2} \vec{x}^2 + \frac{1}{N} \sum_i \ln \text{Tr} e^{[(\sqrt{\beta J} \xi_i \vec{x} + \beta \bar{H} + \beta \vec{h}_i^\lambda) \cdot \vec{e}_i^\mu]} \right\} \quad (\text{II-10})$$

Esta integral pode ser resolvida, no limite termodinâmico, pelo método de ponto de sela, observando-se que o máximo da primeira exponencial é

$$\vec{x}_{\text{mdxe}} = \frac{1}{N} \sum_i \frac{\text{Tr} (\sqrt{\beta J} \xi_i \vec{e}_i^\mu) e^{-\beta A_i(\vec{x})}}{\text{Tr} e^{-\beta A(\vec{x})}} \quad (\text{II-11})$$

onde

$$A_i(\vec{x}_{\text{mdxe}}) = (-\sqrt{\beta J} \vec{x}_{\text{mdxe}} \xi_i - \bar{H} - \vec{h}_i^\lambda) \cdot \vec{e}_i^\mu \equiv -(\beta J \vec{q} + \bar{H} + \vec{h}_i^\lambda) \cdot \vec{e}_i^\mu \quad (\text{II-12})$$

pode ser interpretado como um Hamiltoniano efetivo. Daqui então, (considerando a soma sobre setores como média sobre o espaço)

$$\vec{x}_{\text{mdxe}} = \frac{1}{N} \sum_i \langle (\sqrt{\beta J} \xi_i) \vec{e}_i^\mu \rangle \equiv \left[ \frac{\beta J}{N} \langle \xi \vec{e}^\mu \rangle \right] \equiv \sqrt{\beta J} \vec{q} \quad (\text{II-13})$$

é uma magnetização vetorial. Logo, a função partição resulta em:

$$Z = \exp -N \left\{ \frac{\beta J}{2} \vec{q}^2 - \frac{1}{N} \sum_i \ln \text{Tr} e^{[\beta(\beta J \vec{q} + \bar{H} + \vec{h}_i^\lambda) \cdot \vec{e}_i^\mu]} \right\} \quad (\text{II-14})$$

Daí, a energia livre por spin, de (II-3), fica como

$$-\beta f \equiv -\lim_{N \rightarrow \infty} \beta F/N = \left[ -\beta \frac{\vec{q}^2}{2} + \ln \text{Tr} \exp \left\{ \beta (\gamma \vec{s} \vec{q} + \vec{H} + \vec{h}^\lambda) \cdot \vec{e}^\mu \right\} \right] \quad (\text{II-15})$$

Se houver aleatoriedade na interação de troca, o primeiro termo à direita também será promediado sobre a distribuição de  $\xi$ . Caso a aleatoriedade esteja no campo, apenas promedia-se o logaritmo. Dada uma distribuição de probabilidade determinada da variável aleatória, definimos:

$$[f(\eta^\mu)] = \int d\eta^\mu P(\eta^\mu) f(\eta^\mu), \quad \text{onde} \quad \eta^\mu \equiv (\xi, \vec{h}) \quad (\text{II-16})$$

O resultado (II-15) para a energia livre no limite termodinâmico é exato. A seguir o utilizaremos para demonstrar um teorema sobre a teoria de campo médio.

## B) Interação com vizinhos mais próximos

Se num sistema com número de coordenação  $c$ , a interação de troca atingir apenas os vizinhos mais próximos, o Hamiltoniano é:

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle i,j \rangle}^N J_{ij} \vec{e}_i^\mu \cdot \vec{e}_j^\nu - \vec{H} \cdot \sum_i^N \vec{e}_i^\mu - \sum_i^N \vec{h}_i^\lambda \cdot \vec{e}_i^\mu \quad (\text{II-17})$$

onde o símbolo  $\langle ij \rangle$  indica a soma apenas sobre os vizinhos mais próximos.

Vamos empregar a teoria do campo médio, substituindo a interação de dois spins pela de um spin com um meio, usando (II-4) e subtraindo a interação de cada spin com ele próprio:

$$\sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \vec{e}_i^\mu \cdot \vec{e}_j^\nu \rightarrow J_c \vec{q} \cdot \sum_i \xi_i \vec{e}_i^\mu - J \vec{q}^2 \frac{c}{2} N \quad (\text{II-18})$$

A função partição em campo médio é então

$$Z_{cm} =$$

$$\text{Tr}_{\{\vec{e}_i^\mu\}} \exp \left\{ \beta J_c \vec{q} \cdot \sum_i \xi_i \vec{e}_i^\mu - \beta J \frac{c}{2} N \vec{q}^2 + \beta \vec{H} \cdot \sum_i \vec{e}_i^\mu + \sum_i \beta \vec{h}_i^\lambda \cdot \vec{e}_i^\mu \right\} \quad (\text{II-19})$$

Como os traços sobre cada sítio são independentes, usando (II-9) se obtém:

$$Z_{cm} = e^{-\beta J \frac{c}{2} N \vec{q}^2} \frac{1}{c} \text{Tr}_{\{\vec{e}^\mu\}}^N \exp \left\{ \beta (\gamma_c \xi \vec{q} + \vec{H} + \vec{h}^\lambda) \cdot \vec{e}^\mu \right\} \quad (\text{II-20})$$

donde

$$\theta_{em} \equiv$$

$$\left[ \frac{J_c}{2} \bar{q}^2 - \frac{1}{\beta} \ln \text{Tr} \exp \left\{ \beta (J_c \bar{q} + \vec{H} + \vec{h}^2) \cdot \vec{e}^n \right\} \right] \quad (\text{II-21})$$

Se absorvermos  $J_c$  em  $J$ , obteremos o mesmo resultado formal que o de (II-15). Assim podemos concluir o seguinte teorema:

" A teoria de campo médio no modelo de Potts de  $q$ -estados, com qualquer distribuição aleatória, seja do campo ou da interação de troca, é exata no limite de alcance de interação infinito ".

A demonstração do teorema exposto é mera constatação das equações (II-15) e (II-21), quando obtivemos os mesmos resultados na solução exata com alcance infinito e na teoria de campo médio.

O caso particular de Ising, sem aleatoriedade, é conhecido na literatura.<sup>7</sup>



### C) Método das Réplicas

A demonstração anterior não depende do método das réplicas para cálculo, mas é instrutivo ver como o método é aplicável no caso do campo aleatório, como já se encontra na literatura para o modelo de Ising.<sup>25</sup>

Seja a distribuição contínua do campo

$$p(\vec{h}_i^\lambda) = (2\pi\sigma^2)^{-1/2} \exp - (\vec{h}_i^\lambda - \vec{H})^2 / 2\sigma^2 \quad (\text{II-22})$$

onde a média  $H$  é um campo uniforme e tomemos no Hamiltoniano (II-1) a interação de troca uniforme e o campo externo nulo. Então a réplica do Hamiltoniano é

$$\mathcal{H}_\alpha = -\frac{J}{2N} \sum_{i,j} \vec{e}_{i\alpha} \cdot \vec{e}_{j\alpha} - \sum_i \vec{h}_i^\lambda \cdot \vec{e}_{i\alpha} \quad (\text{II-23})$$

onde  $\alpha = 1, 2, \dots, n$ .

Agora, seguindo as equações (I-6) e (I-8), a energia livre é:

$$-\beta F = \lim_{n \rightarrow 0} n^{-1} \{ [Z^n] - 1 \} \quad (\text{II-24})$$

onde

$$Z = \prod_\alpha \prod_{\{\vec{e}_{i\alpha}\}} \exp(-\beta \mathcal{H}_\alpha) = \prod_{\{\vec{e}_i\}} \exp(-\beta \sum_\alpha \mathcal{H}_\alpha) \quad (\text{II-25})$$

Mas a média configuracional dá

$$[Z^N] = \int \prod_i [d\vec{h}_i p(\vec{h}_i)] Z^N = \text{Tr} \left\{ \exp \left( \frac{\beta J}{2N} \sum_{\alpha} \sum_{ij} \vec{e}_{i\alpha}^N \cdot \vec{e}_{j\alpha}^N \right) \right. \quad (\text{II-26})$$

$$\left. \prod_i \int \frac{d\vec{h}_i}{\sqrt{2\pi} \Delta} \exp \left[ -(\vec{h}_i - \vec{H})^2 / 2\Delta^2 + \beta \sum_{\alpha} \vec{e}_{i\alpha}^N \cdot \vec{h}_i \right] \right\}$$

e as integrais acima podem ser escritas como:

$$\int \frac{d\vec{h}_i}{\sqrt{2\pi} \Delta} \exp \left\{ - \left( \vec{h}_i - (\vec{H} + \beta \Delta^2 \sum_{\alpha} \vec{e}_{i\alpha}^N) \right)^2 / 2\Delta^2 + \right. \quad (\text{II-27})$$

$$\left. \left( \beta \Delta^2 \sum_{\alpha} \vec{e}_{i\alpha}^N \right)^2 / 2\Delta^2 + \beta \vec{H} \cdot \sum_{\alpha} \vec{e}_{i\alpha}^N \right\} =$$

$$\exp \left\{ \frac{(\beta \Delta)^2}{2} \left( \sum_{\alpha} \vec{e}_{i\alpha}^N \right)^2 + \beta \vec{H} \cdot \sum_{\alpha} \vec{e}_{i\alpha}^N \right\}$$

Daí a integral completa fica como:

$$[Z^N] = \text{Tr} \left\{ e^{\frac{\beta J}{2N} \sum_{\alpha} \left( \sum_i \vec{e}_{i\alpha}^N \right)^2} \prod_i \exp \left( \frac{(\beta \Delta)^2}{2} \left( \sum_{\alpha} \vec{e}_{i\alpha}^N \right)^2 + \beta \vec{H} \cdot \sum_{\alpha} \vec{e}_{i\alpha}^N \right) \right\} \quad (\text{II-28})$$

Usando a expressão (II-6) para linearizar o primeiro termo quadrático:

$$[Z^N] = \text{Tr} \left\{ \prod_{\alpha} \left( \int \frac{d\vec{x}_{\alpha}}{\sqrt{2\pi/N}} e^{-\frac{N}{2} \vec{x}_{\alpha}^2 + \sqrt{\beta J} \sum_i \vec{e}_{i\alpha}^N \cdot \vec{x}_{\alpha}} \right) \prod_i e^{\frac{1}{2} (\beta \Delta \sum_{\alpha} \vec{e}_{i\alpha}^N)^2 + \beta \vec{H} \cdot \sum_{\alpha} \vec{e}_{i\alpha}^N} \right\} \quad (\text{II-29})$$

e agora a fórmula (II-9), obtemos:

$$[Z^N] = \int \left( \prod_{\alpha} \frac{dx_{\alpha}}{\sqrt{2\pi/N}} \right) \exp N \left\{ -\sum_{\alpha} \frac{\vec{x}_{\alpha}^2}{2} + \right. \\ \left. \ln \text{Tr} \exp \left( \sum_{\alpha} (\sqrt{\beta\gamma} \vec{x}_{\alpha} + \beta \vec{H}) \cdot \vec{e}_{\alpha}^M + \frac{1}{2} (\beta \delta \sum_{\alpha} \vec{e}_{\alpha}^M) \right) \right\} \quad (\text{II-30})$$

Agora resolvemos a integral pelo método do ponto de sela,

com

$$\vec{x}_{\alpha}^{\text{máx}} = \frac{\text{Tr} (\sqrt{\beta\gamma} \vec{e}_{\alpha}^M) e^{-\beta A_{\text{ef}}}}{\text{Tr} e^{-\beta A_{\text{ef}}}} \equiv \sqrt{\beta\gamma} \vec{m}_{\alpha} \quad (\text{II-31})$$

onde

$$A_{\text{ef}} \equiv -(\gamma \vec{m}_{\alpha} + \vec{H}) \cdot \vec{e}_{\alpha}^M - \beta \delta \sum_{\alpha, \beta} \vec{e}_{\alpha}^M \cdot \vec{e}_{\beta}^M \quad (\text{II-32})$$

é o Hamiltoniano efetivo.

Assim, obtemos

$$[Z^N] = \exp N \left\{ -\beta \frac{\gamma}{2} \sum_{\alpha} \vec{m}_{\alpha}^2 + \right. \\ \left. \ln \text{Tr} \exp \left( \sum_{\alpha} \beta (\gamma \vec{m}_{\alpha} + \vec{H}) \cdot \vec{e}_{\alpha}^M + \frac{1}{2} (\beta \delta \sum_{\alpha} \vec{e}_{\alpha}^M)^2 \right) \right\} \quad (\text{II-33})$$

Podemos observar que a última equação é semelhante a (II-10), exceto pelo fato que aqui já promediamos sobre as configurações e replicamos o sistema; da mesma forma a equação (II-30) é similar a (II-10) e os cálculos executados nesta passagem são do mesmo tipo. Usando novamente (II-6), linearizamos o último termo quadrático:

$$e^{-\frac{1}{2}(\beta \sum_{\alpha} \vec{e}_{\alpha}^n)^2} = \int \frac{d\vec{s}}{\sqrt{2\pi} \sigma} \exp\left(-\frac{\vec{s}^2}{2\sigma^2} + \beta \sum_{\alpha} \vec{e}_{\alpha}^n \cdot \vec{s}\right) \quad (\text{II-34})$$

donde (II-33) fica

$$[Z^n] = \exp N \left\{ -\beta \frac{\gamma}{2} \sum_{\alpha} \vec{m}_{\alpha}^2 + \ln \text{Tr} \int \frac{d\vec{s}}{\sqrt{2\pi} \sigma} \exp\left(-\frac{\vec{s}^2}{2\sigma^2} + \beta \sum_{\alpha} (\vec{s} + \gamma \vec{m}_{\alpha} + \vec{H}) \cdot \vec{e}_{\alpha}^n\right) \right\} \quad (\text{II-35})$$

Supomos então a simetria de réplicas nos dê uma solução do problema:

$$\vec{m}_{\alpha} \equiv \vec{m}, \quad \forall \alpha, \quad (\text{II-36})$$

daí, usando novamente (II-9) vem

$$[Z^n] = \exp N \left\{ -\beta \frac{\gamma}{2} n \vec{m}^2 + \ln \int d\vec{s} p(\vec{s}) \text{Tr}^n e^{\beta(\vec{s} + \gamma \vec{m} + \vec{H}) \cdot \vec{e}^n} \right\} \quad (\text{II-37})$$

com

$$p(\vec{s}) = e^{-\vec{s}^2/2\sigma^2} / \sqrt{2\pi} \sigma$$

A expressão em (II-37) é analítica em  $N$  e  $n$ ; daí podemos trocar os limites definidos em (II-15) e (II-24); então se utilizarmos a regra de L'Hopital e expandirmos a exponencial, ou seja, usando

aqui os limites:

$$e^{ux} \underset{u \rightarrow 0}{\simeq} 1 + ux \quad (\text{II-38})$$

$$\frac{1}{n} \ln [A^n] \xrightarrow{n \rightarrow 0} \frac{1}{1} [A^n \ln A] \xrightarrow{n \rightarrow 0} [\ln A]$$

se chega à expressão

$$-\beta \beta = -\beta \frac{\partial}{\partial \vec{m}} \vec{m}^2 + \int d\vec{s} p(\vec{s}) \ln \text{Tr} \exp \{ \beta (\vec{s} + \vec{H} + \lambda \vec{m}) \cdot \vec{e}^n \} \quad (\text{II-39})$$

Como se vê, fazendo  $\xi = 1$  (II-39) coincide com (II-15) no caso do campo aleatório no limite termodinâmico se tomarmos ali uma distribuição  $p$  qualquer do campo  $\vec{s}$ .

### (III) CAMPO ALEATORIO DE POTTS

#### A) Cálculo direto da energia livre

Vamos usar a expressão obtida em (II-15) para calcular a energia livre do modelo de Potts com um campo aleatório e um uniforme, sendo o Hamiltoniano dado por

$$\mathcal{H} = -\frac{J}{2N} \sum_{i,j} \vec{e}_i^\mu \cdot \vec{e}_j^\nu - \sum_i \vec{h}_i^\lambda \cdot \vec{e}_i^\mu - \vec{H} \cdot \sum_i \vec{e}_i^\mu \quad (\text{III-1})$$

Na teoria de campo médio, apresentada no capítulo anterior, o Hamiltoniano efetivo é

$$\mathcal{H} = -J\vec{m} \cdot \sum_i \vec{e}_i^\mu + \frac{\gamma N}{2} \vec{m}^2 - \sum_i \vec{h}_i^\lambda \cdot \vec{e}_i^\mu - \vec{H} \cdot \sum_i \vec{e}_i^\mu \quad (\text{III-2})$$

onde definimos a magnetização

$$\vec{m} \equiv [\langle \vec{e}_i^\mu \rangle] \quad (\text{III-3})$$

sendo as médias térmica e configuracional dadas respectivamente por

$$\left\{ \begin{array}{l} \langle A \rangle = \frac{\text{Tr} A e^{-\beta \mathcal{H}}}{\text{Tr} e^{-\beta \mathcal{H}}} \\ [ \langle A \rangle ] = \int d\vec{h} P(\vec{h}) \langle A \rangle \end{array} \right. \quad (\text{III-4})$$

A energia livre por sítio, usando (I-5) será

$$-\beta\phi = -\beta\frac{J}{2}\vec{m}^2 +$$

$$\left[ \ln \text{Tr} \exp \left\{ \beta \left( (Jm+H)(\sum_{\mu,\lambda} d_{\mu,\lambda}^{-1}) + h(\sum_{\mu,\lambda} d_{\mu,\lambda}^{-1}) \right) / (q-1) \right\} \right] \quad (\text{III-5})$$

conforme as definições de (II-2).

Utilizaremos a seguinte distribuição de probabilidade do campo aleatório, com a simetria discreta do modelo:

$$p(\vec{h}^n) = \frac{1}{q} \sum_{\eta=1}^q \delta(\vec{h}^n - \vec{h}^\eta) \quad (\text{III-6})$$

sobre a qual promediaremos a expressão em (III-5), a fim de calcular a energia livre. Aqui tomamos

$$\vec{m} = m \vec{e}^1 \quad (\text{III-7})$$

ou seja, a magnetização na direção do campo externo.

A média sobre o campo aleatório se resume numa soma sobre os estados:

$$-\beta\phi = -\beta\frac{J}{2}\vec{m}^2 + \frac{1}{q} \sum_{\eta} \ln \text{Tr} \exp \left\{ A(\sum_{\mu,\lambda} d_{\mu,\lambda}^{-1}) + B(\sum_{\mu,\lambda} d_{\mu,\lambda}^{-1}) \right\} \quad (\text{III-8})$$

onde definimos por simplicidade

$$\begin{cases} A \equiv \beta(Jm+H)/(q-1) \\ B \equiv \beta h/(q-1) \end{cases} \quad (\text{III-9})$$

O traço dá

$$\begin{aligned} \text{Tr} e^{A(qd_{\mu,1}-1) + B(qd_{\mu,\bar{1}}-1)} &= \\ e^{(q-1)A + B(qd_{\mu,1}-1)} - A + B(qd_{\mu,\bar{1}}-1) & \quad \text{(III-10)} \\ e + \sum_{\mu \neq 1} e & \end{aligned}$$

e a energia livre resulta em

$$\begin{aligned} -\beta f &= -\beta \frac{J}{2} \vec{m}^2 + \\ \frac{1}{q} \left\{ \ln \left[ e^{(q-1)(A+B)} + (q-1)e^{-(A+B)} \right] + \right. & \quad \text{(III-11)} \\ \left. (q-1) \ln \left[ e^{(q-1)A-B} + e^{-A+(q-1)B} + (q-2)e^{-(A+B)} \right] \right\} & \end{aligned}$$

Então a energia livre fica

$$f = \frac{J}{2} m^2 - G(m, H, h) \quad \text{(III-12)}$$

com:

$$\begin{aligned} q\beta G(m, H, h) &\equiv \\ \ln \left[ e^{(q-1)(A+B)} + (q-1)e^{-(A+B)} \right] + & \quad \text{(III-13)} \\ (q-1) \ln \left[ e^{(q-1)A-B} + e^{-A+(q-1)B} + (q-2)e^{-(A+B)} \right] & \end{aligned}$$

Para  $H=0$  este é o resultado de Blankshtein, Shapir e Aharony<sup>15</sup>. O campo uniforme aparece no nosso resultado só adicionado a  $m$ , na forma  $m + H/J$ , de tal modo que substitui-se



$$G(m, h) \text{ em } G\left(m + \frac{H}{J}, h\right) \equiv G(m, H, h) \quad (\text{III-14})$$

Também coincide com o de Nishimori<sup>14</sup> para  $H=0$  se reescalarmos

$$\begin{cases} q \partial / (q-1) \rightarrow \partial \\ q H / (q-1) \rightarrow H \\ q h / (q-1) \rightarrow h \end{cases} \quad (\text{III-15})$$

e multiplicarmos e dividirmos os argumentos dos logaritmos em (III-13) por  $\exp(A+B)$ , obtendo

$$\begin{aligned} q \beta G = & \ln \left[ e^{q(A+B)} + (q-1) \right] + \\ & (q-1) \ln \left[ e^{qA} + e^{qB} + (q-2) \right] - q(A+B) \end{aligned} \quad (\text{III-16})$$

A equação autoconsistente para a magnetização pode ser obtida minimizando a energia livre de (III-12):

$$\partial f / \partial m = 0 \quad (\text{III-17})$$

Então vem

$$\mathcal{J}m = \partial G / \partial m \quad (\text{III-18})$$

e daí obtemos

$$\begin{aligned} qm = & \frac{e^{(q-1)(A+B)} - e^{-(A+B)}}{(q-1)(A+B) - (A+B)} + \\ & \frac{e^{(q-1)A-B} + (q-1)e^{-A+(q-1)B} - (q-2)e^{-(A+B)}}{(q-1)A-B - \frac{1}{(q-1)}e^{-A+(q-1)B} - (q-2)e^{-(A+B)}} \end{aligned} \quad (\text{III-19})$$

Se somarmos e subtrairmos a unidade ao segundo termo da direita, após multiplicar denominador e numerador por  $\exp(A+B)$ .

vem:

$$q^m = \frac{e^{q(A+B)} - 1}{e^{q(A+B)} + q^{-1}} + \frac{q^A e^{qA}}{e^{qA} + e^{qB} + q^{-2}} - 1 \quad (\text{III-20})$$

e subtraindo a unidade do primeiro termo à direita fica

$$q^m = \frac{[e^{q(A+B)} - 1] - [e^{q(A+B)} + q^{-1}]}{e^{q(A+B)} + q^{-1}} + \frac{q^A e^{qA}}{e^{qA} + e^{qB} + q^{-2}} \quad (\text{III-21})$$

Finalmente, dividindo por  $q$ :

$$m = \frac{q^A}{e^{qA} + e^{qB} + q^{-2}} - \frac{1}{e^{q(A+B)} + q^{-1}} \quad (\text{III-22})$$

como encontramos no artigo de Nishimori, se reemplaçarmos à direita para cada  $m$  o termo:  $m+H/J$  e observarmos (III-9) e as escalas de (III-15).

Se em (III-19) colocarmos  $q=2$ , obtem-se, por sua vez, o resultado de Salinas e Wreszinski para o modelo de Ising:

$$2m = \tanh[\beta(\gamma_m + H + h)] + \tanh[\beta(\gamma_m + H - h)] \quad (\text{III-23})$$

com a energia livre de (III-12)

$$f = \frac{7}{2} m^2 -$$

$$\frac{1}{2\beta} \left\{ \ln [2 \cosh \beta(\gamma m + H + h)] + \right. \\ \left. \ln [2 \cosh \beta(\gamma m + H - h)] \right\} \quad (\text{III-24})$$

## B) Resultados Analíticos

Devido a complexidade do modelo de Potts, a equação autoconsistente (III-22) é transcendental. Por isso, existem poucos casos para os quais há solução analítica. Vamos estudar aqui as importantes situações limites de número de estados infinitos<sup>14</sup> e de temperaturas pequenas.<sup>15</sup> Ambos os casos já foram analisados para campo externo nulo.

### (1) Infinitos estados

Escalando as variáveis em (III-12) e (III-16) na forma:

$$\begin{cases} q^{\beta J} / (q-1) = \ln q / x \\ q^{\beta H} / (q-1) = z \ln q / x \\ q^{\beta h} / (q-1) = y \ln q / x \end{cases} \quad (\text{III-25})$$

obtemos

$$\begin{aligned} -\beta f = & -\frac{(q-1)}{q} \frac{m^2}{2x} \ln q + \frac{1}{q} \left\{ \ln \left[ q^{(m+y+z)/x} + q - 1 \right] \right. \\ & \left. + (q-1) \ln \left[ q^{(m+z)/x} + q^{y/x} + q - 2 \right] - (m+z+y) \ln q / x \right\} \quad (\text{III-26}) \end{aligned}$$

Estamos prontos agora para calcular o diagrama de fases no importante caso do limite de infinitos estados:

$$\begin{aligned} \lim_{q \rightarrow \infty} -\beta f / \ln q = \\ -\frac{m^2}{2x} + \lim_{q \rightarrow \infty} \ln \left[ q^{(m+z)/x} + q^{y/x} + q \right] / \ln q \quad (\text{III-27}) \end{aligned}$$

Então, definindo a função

$$\bar{f} = \lim_{q \rightarrow \infty} \beta f / \ln q \quad (\text{III-28})$$

segue:

$$\bar{f} = \frac{m^2}{2x} - \lim_{q \rightarrow \infty} \frac{\ln [q^{(m+z)/x} + q^{y/x} + q]}{\ln q} \quad (\text{III-29})$$

A minimização em relação ao parâmetro de ordem dá

$$m = \frac{q^{(m+z)/x}}{q^{(m+z)/x} + q^{y/x} + q} \quad (\text{III-30})$$

Podemos distinguir as seguintes fases possíveis:

$$\begin{aligned} \text{ferromagnética:} & \left\{ \begin{array}{l} (m+z) > x, \\ \text{então } m=1, \text{ daí } \bar{f} = -1/2x - z/x \\ (m+z) > y, \end{array} \right. \\ \text{paramagnética-1:} & \left\{ \begin{array}{l} y > x, \\ \text{então } m=0, \text{ daí } \bar{f} = -y/x \\ y > m+z, \end{array} \right. \\ \text{paramagnética-2:} & \left\{ \begin{array}{l} y < x, \\ \text{então } m=0, \text{ daí } \bar{f} = -1 \\ m+z < x, \end{array} \right. \end{aligned} \quad (\text{III-31})$$

As superfícies de transição de primeira ordem (pois há uma variação brusca no parâmetro de ordem) obtém-se igualando as energias livres correspondentes as fases:

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{ferro - para 1} : \frac{1}{2} + z = y \\ \text{ferro - para 2} : \frac{1}{2} + z = x \\ \text{para 1 - para 2} : y = x \end{array} \right.$$

(III-32)

Elas estão representadas na figura 1.

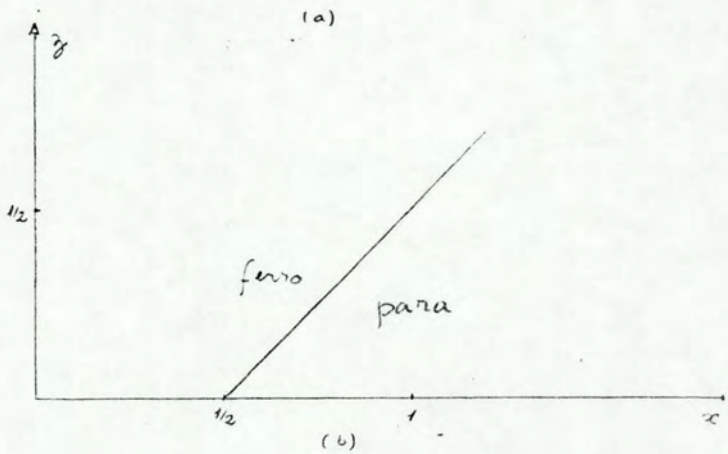
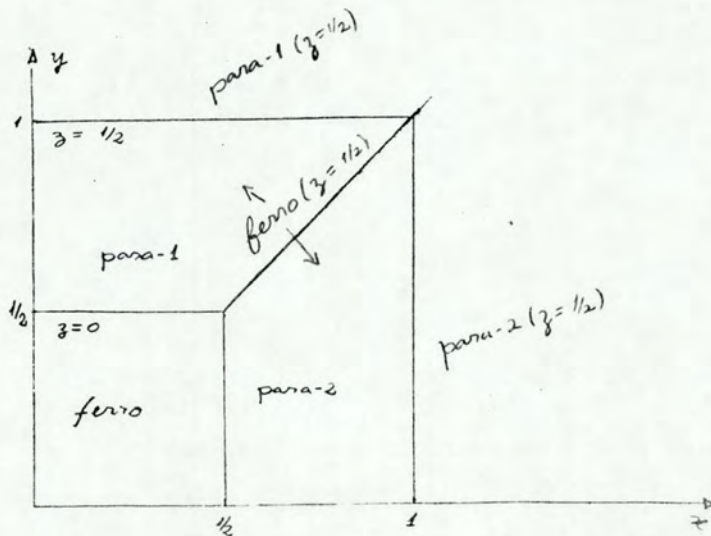


Figura 1: Gráficos da transição de fase, para  $q=\infty$ ; em (a) vemos  $y$  por  $x$  a  $z=0$  e  $z=1/2$ ; em (b) vemos  $z$  por  $x$  para qualquer valor de  $y$ .

As fase paramagnética-1 e paramagnética-2 tem parâmetro de ordem de spin-glass equivalente ao caso sem campo uniforme: <sup>14</sup>

$$Q_c|_{m=0} \equiv \left[ \frac{\langle \vec{e}_i^x \rangle \cdot \langle \vec{e}_i^y \rangle}{q^{y/x} + q} \right]_{m=0}^2 \equiv z^e \quad (\text{III-33})$$

cujos valores adquiridos são respectivamente 1 e 0, daí a transição também é de primeira ordem.

Observa-se ainda que, tomando campo aleatório nulo, a fase paramagnética-1 não existe. Já entre as fases paramagnética-2 e ferromagnética há uma linha de coexistência dada por (III-32) a qual termina num ponto singular, com magnetização  $m=1/2$ , onde temperatura e campo uniforme são infinitos; podemos relacionar este ponto com um ponto crítico trivial.

## (2) Baixas temperaturas

Outro caso importante é o limite onde  $KT/J \ll 1$ . Neste limite definimos

$$\hat{f} \equiv \lim_{\beta \rightarrow \infty} f \quad (\text{III-34})$$

e assim (III-12) e (III-16) produzem, observando (III-9):

$$\hat{f} = \frac{1}{2} m^2 - \lim_{\beta \rightarrow \infty} \frac{1}{q\beta} \left\{ \ln [e^{q(A+B)} + q - 1] + (q-1) \ln [e^{qA} + e^{qB} + q - 2] - q(A+B) \right\} \quad (\text{III-35})$$

ou seja

$$\hat{f} = \frac{J}{2} m^2 -$$

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} \frac{(q-1)}{q\beta} \ln \left[ e^{\frac{q\beta}{(q-1)}(Jm+H)} + e^{\frac{q\beta h}{(q-1)}} \right] \quad (\text{III-36})$$

Minimizando:

$$m = \frac{q\beta(Jm+H)/(q-1)}{e^{\frac{q\beta(Jm+H)}{(q-1)}} + e^{\frac{q\beta h}{(q-1)}}} \quad (\text{III-37})$$

obtemos uma expressão que pode ser obtida também tomando o limite diretamente em (III-22); há duas fases possíveis:

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{ferromagnética: } Jm + H > h, \text{ então } m = 1, \text{ daí } \hat{f} = -J/2 - H \\ \text{paramagnética-1: } Jm + H < h, \text{ então } m = 0, \text{ daí } \hat{f} = -h \end{array} \right. \quad (\text{III-38})$$

Isto implica na seguinte linha de transição de primeira ordem:

$$J/2 + H = h \quad (\text{III-39})$$

A energia livre (III-36) obtemos no caso de campo uniforme forte, daí resultando na mesma natureza da transição de fase. É também da mesma natureza da primeira transição em (III-32), fortemente descontínua.



### C) Resultados numéricos

Um caso de grande importância em que aparecem alguns resultados na literatura e de considerável interesse experimental, como um ferromagneto cúbico em um campo magnético diagonal por exemplo, é o modelo de Potts de três estados; resolvemos numericamente, com o auxílio do computador COBRA do IFUEFRGS, obtendo as curvas de transição de fase nos planos (y-x) e (z-x), para distintos valores de z e y respectivamente, com as variáveis definidas em (III-25). O programa utilizado encontra os mínimos da energia livre (III-26), ou ainda, de:

$$\bar{f}_q \equiv q \beta t / \ln q \quad (\text{III-40})$$

donde

$$\bar{f}_q = (q-1) m^2 / 2x - (m+z+y) / x - \left\{ \ln \left[ q^{(m+z+y)/2x} + q - 1 \right] + (q-1) \ln \left[ q^{(m+z)/x} + q^{y/x} + q - 2 \right] \right\} / \ln q \quad (\text{III-41})$$

e compara os valores da energia livre em cada fase; o valor de menor energia é o mais estável, e quando ele se torna menos estável, há uma transição; aqueles valores de (x,y,z) que satisfazem esta condição formam uma superfície no diagrama de fases que separa a fase de menor parâmetro m (paramagnética) daquela de maior m (ferromagnética).

O resultado foi desenhado nas figuras 2 e 3, e o programa

esta no apêndice 2.

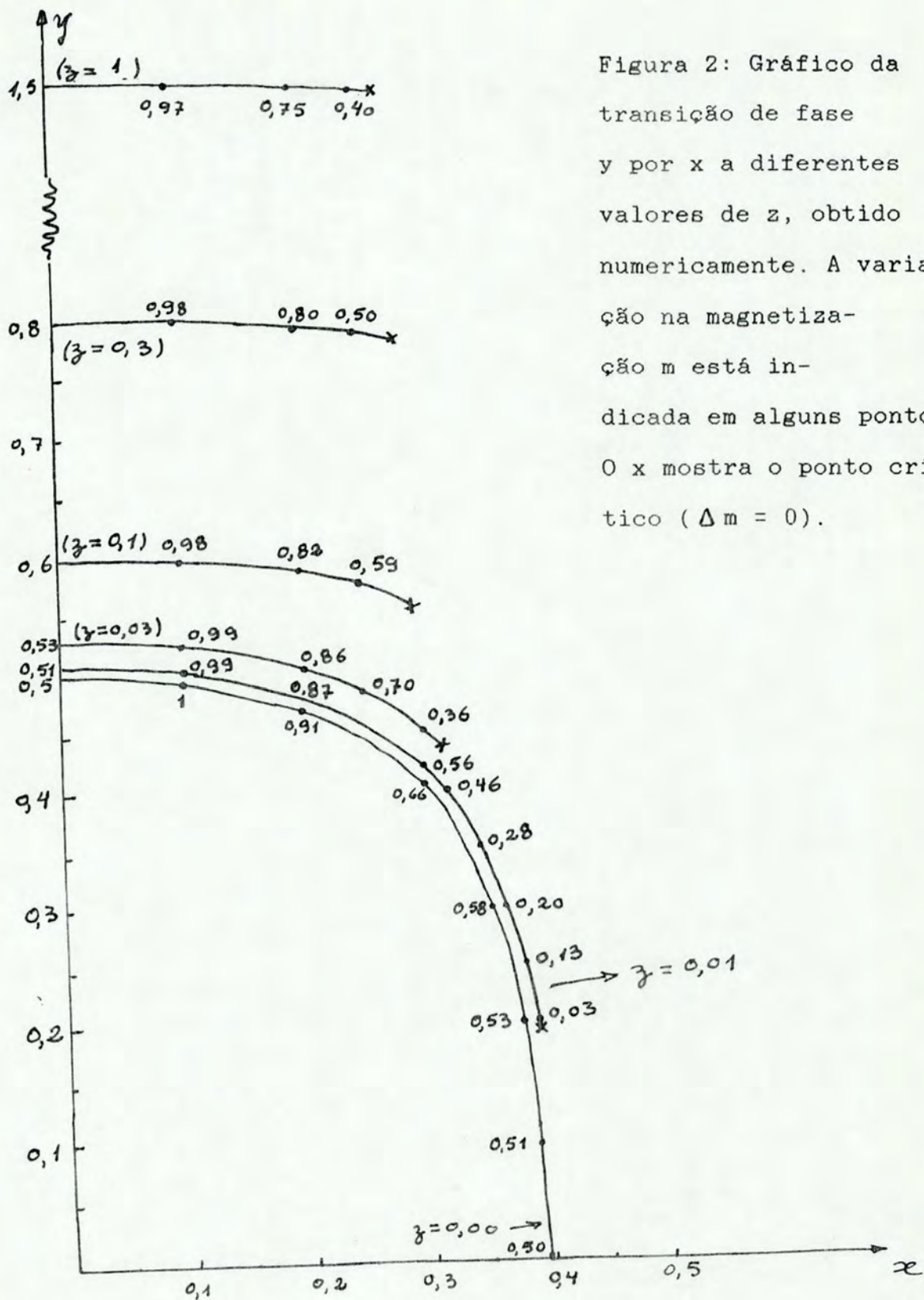


Figura 2: Gráfico da transição de fase  $y$  por  $x$  a diferentes valores de  $z$ , obtido numericamente. A variação na magnetização  $m$  está indicada em alguns pontos. O  $x$  mostra o ponto crítico ( $\Delta m = 0$ ).

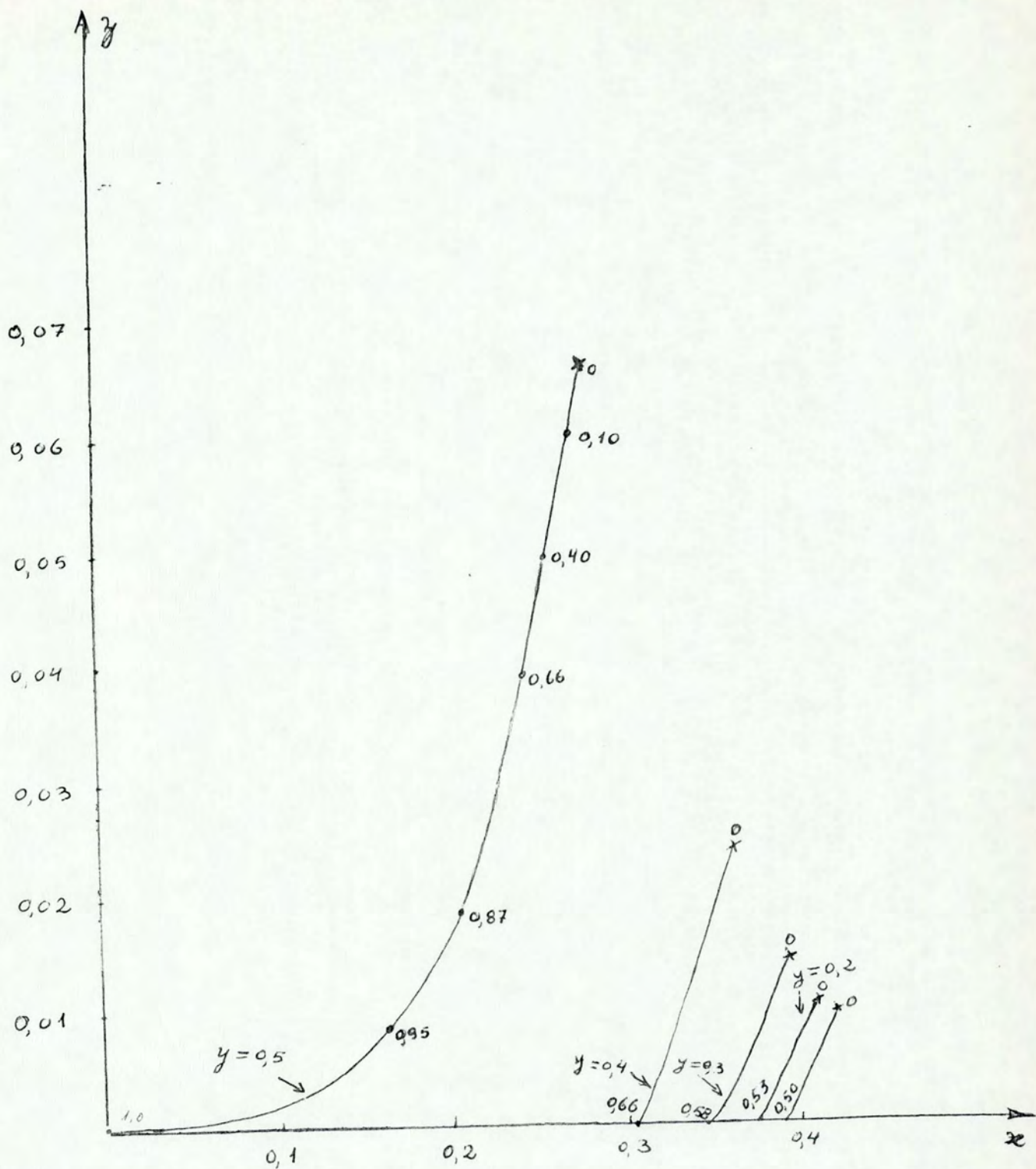
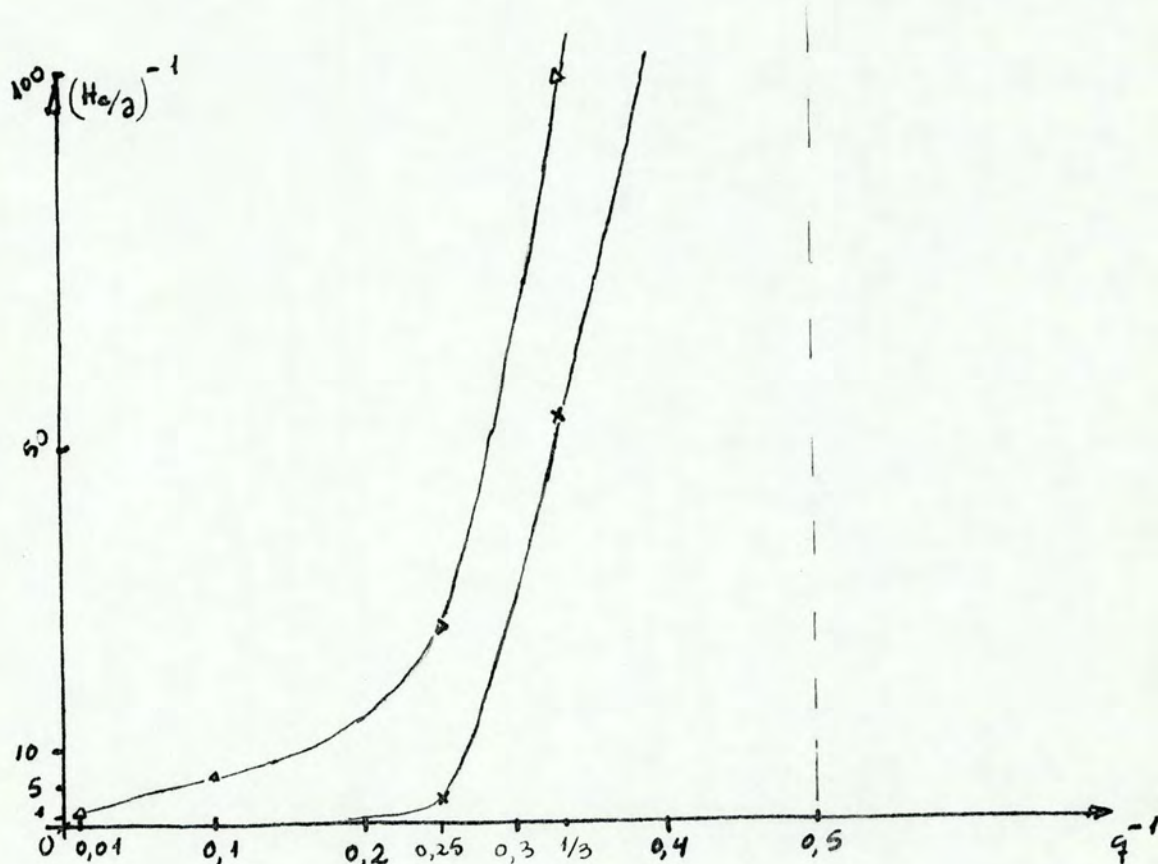


Figura 3: Gráfico da transição de fase  $\alpha$  por  $x$  a diferentes valores de  $y$ . Alguns  $\Delta m$  estão indicados nas curvas.

Outro resultado importante foi a obtenção de uma relação entre o campo crítico, definido como aquele campo uniforme necessário para que o ponto crítico se encontre à campo aleatório nulo, com o número de estados. O gráfico está na figura 4.



Representação: Resultado

- $\times$  : Analítico (Expansão de Landau)
- $\Delta$  : Numérico (expressão III-41)

Figura 4: Gráfico relacionando  $J/H_c$  com  $1/q$ ; à esquerda da linha, a transição é de primeira ordem; à direita é contínua.

Os gráficos 2 e 3 mostram que há uma competição quanto à descontinuidade da transição nos campos aleatório e uniforme. Como se observa, ao aumentarmos o campo uniforme, a região com transição de primeira ordem no diagrama de fases aumenta; o campo aleatório necessário para o ponto crítico é maior. Por sua vez, ao aumentarmos o campo aleatório aquela região também aumenta.

Isso concorda com a intuição, pois enquanto um campo externo tende a ordenar o sistema em sua direção, tornando contínua a transição, as impurezas produzem domínios com ordenamento local, aumentando a possibilidade de uma mudança brusca na magnetização.

A figura 4, por outro lado, nos indica que ao aumentarmos o número de estados do modelo, a transição vai tornando-se mais fortemente de primeira ordem, necessitando um campo uniforme cada vez maior para quebra-la. Esta competição também era esperada.

#### D) Expansão de Landau

Vamos nesta parte do trabalho proceder à expansão em série de potências do parâmetro de ordem da energia livre em (III-12). O objetivo aqui será a obtenção dos critérios necessários para a superfície de coexistência e da linha crítica, como uma funcionalidade entre os coeficientes da expansão. A suposição básica da teoria de Landau<sup>19</sup> está em que a energia livre permanece analítica próxima a região crítica, não havendo singularidades nesta vizinhança; além disso, a série converge, rapidamente, bastando portanto tomar apenas os termos de ordem mais baixa na expansão.

Primeiro calcularemos os coeficientes da expansão e a seguir obteremos os critérios analíticos para a superfície de coexistência e linha crítica.

##### (1) Os coeficientes

Trataremos aqui de obter os coeficientes da expansão da energia livre em (III-12) e (III-16) em potências da magnetização, até a quarta ordem. Definindo

$$\begin{cases} K \equiv \eta \beta \partial / (\eta - 1) \\ Z \equiv \eta \beta H / (\eta - 1) \\ Y \equiv \eta \beta h / (\eta - 1) \end{cases} \quad (\text{III-42})$$

escrevemos

$$-q\beta f = G(m, z, \gamma) - (q-1) \frac{\kappa}{2} m^2 \quad (\text{III-43})$$

onde

$$G(m, z, \gamma) \equiv \ln \left( e^{\kappa m + z + \gamma} + q - 1 \right) + (q-1) \ln \left( e^{\kappa m + z} + e^{\gamma} + q - 2 \right) - (\kappa m + z + \gamma) \quad (\text{III-44})$$

Usaremos a expansão:

$$\ln(e^{a+x} + b) = \ln(e^a + b) + \alpha x + (\alpha - \alpha^2) \frac{x^2}{2} + (\alpha - 3\alpha^2 + 2\alpha^3) \frac{x^3}{3!} + (\alpha - 7\alpha^2 + 12\alpha^3 - 6\alpha^4) \frac{x^4}{4!} + O(x^5) \quad (\text{III-45})$$

onde

$$\alpha \equiv \frac{e^a}{e^a + b} \quad (\text{III-46})$$

Então, para expandir  $G(m, h, H)$ , separaremos em duas partes:

$$\left\{ \begin{array}{l} G \equiv G_1 + (q-1)G_2 - (\kappa m + z + \gamma) \\ G_1 \equiv \ln(e^{\kappa m + z + \gamma} + q - 1) \\ G_2 \equiv \ln(e^{\kappa m + z} + e^{\gamma} + q - 2) \end{array} \right. \quad (\text{III-47})$$

Definindo:

$$\left\{ \begin{array}{l} A_1 \equiv e^{\gamma + z} + q - 1 \\ A_2 \equiv e^{\gamma} + e^z + q - 2 \end{array} \right. e \left\{ \begin{array}{l} \alpha_1 \equiv e^{\gamma + z} / A_1 \\ \alpha_2 \equiv e^z / A_2 \end{array} \right. \quad (\text{III-48})$$

obtemos a expansão de cada termo em (III-47) na forma

$$G_i =$$

$$G_{i_0} + G_{i_1} m + G_{i_2} \frac{m^2}{2} + G_{i_3} \frac{m^3}{6} + G_{i_4} \frac{m^4}{24} + O(m^5) \quad (\text{III-49})$$

com coeficientes dados por

$$\left\{ \begin{array}{l} G_{i_0} = \ln A_i \\ G_{i_1} = K \alpha_i \\ G_{i_2} = K^2 \alpha_i (1 - \alpha_i) \\ G_{i_3} = K^3 \alpha_i (2\alpha_i - 1)(\alpha_i - 1) \\ G_{i_4} = K^4 \alpha_i (\alpha_i - 1) (6\alpha_i - 1 - 6\alpha_i^2) \end{array} \right. \quad (\text{III-50})$$

e a energia livre expandida até quarta ordem na magnetização será

$$-q \beta \phi \equiv f \approx f_0 + f_1 m + f_2 \frac{m^2}{2} + f_3 \frac{m^3}{6} + f_4 \frac{m^4}{24} \quad (\text{III-51})$$

com os coeficientes dados em (III-50), sendo que

$$f_m = G_{1_m} + (q-1) G_{2_m} - (q-1) \frac{K}{2} m^2 f_{m,2} - K m f_{m,1} - (Z+Y) f_{m,0} \quad (\text{III-52})$$

A dependência dos coeficientes com os campos  $Y(h)$  e  $Z(H)$  pode no entanto ser separada se tomarmos o limite de campo fraco:

$$H/2 \ll 1 \rightarrow Z \ll 1 \quad (\text{III-53})$$



donde

$$g \approx f(H=0) + \frac{\partial f}{\partial H}(H=0) H + \frac{\partial^2 f}{\partial H^2}(H=0) H^2 + O(H^3) \quad (\text{III-54})$$

Mas

$$\begin{cases} \partial f / \partial H \equiv q \beta m \\ \frac{\partial^2 f}{\partial H^2} = q \beta \frac{\partial m}{\partial H} \equiv q \beta \chi_T \end{cases} \quad (\text{III-55})$$

daí, ficamos com:

$$g \approx f(H=0) + q \beta m H + q \beta \chi_T H^2 \quad (\text{III-56})$$

Assim, até a primeira ordem no campo uniforme, (III-52)

fica:

$$g = G_1(m, \gamma, z=0) + (q-1) G_2(m, \gamma, z=0) -$$

$$(q-1) \frac{K}{2} m^2 - (K m + \gamma) + (q-1) m z \quad (\text{III-57})$$

Isto confere com a expansão de (III-43) até primeira ordem em Z:

$$g = \left. \frac{\partial G}{\partial z} \right|_{z=0} z + G(m, \gamma, 0) - (q-1) \frac{K}{2} m^2 \quad (\text{III-58})$$

Agora

$$\left. \frac{\partial G}{\partial z} \right|_{z=0} = \frac{e^{K m + \gamma}}{e^{K m + \gamma} + q - 1} + \frac{(q-1) e^{K m}}{e^{K m} + e^{\gamma} + q - 2} - 1 \quad (\text{III-59})$$

é idêntico à expressão (III-22) se tomarmos lá  $Z=0$ ; daí

$$\left. \frac{\partial G}{\partial z} \right|_{z=0} = (\eta - 1) m(z=0) \quad (\text{III-60})$$

e voltamos ao resultado (III-57) pois:

$$G(m, 0, \gamma) = G_1(z=0) + (\eta - 1) G_2(z=0) - (km + \gamma) \quad (\text{III-61})$$

Assim as definições (III-48) se simplificam:

$$\begin{cases} A_1 = A_2 = e^\gamma + \eta - 1 \equiv A \\ \alpha_1 = e^\gamma / A = e^\gamma \alpha_2 \end{cases} \quad (\text{III-62})$$

Se definirmos a variável

$$\tau = \frac{e^\gamma - 1}{e^\gamma + \eta - 1} = \alpha_1 - \alpha_2 \quad (\text{III-63})$$

e notarmos que

$$\alpha_1 + (\eta - 1)\alpha_2 = 1 \quad (\text{III-64})$$

obtemos a relação para  $\alpha_1$  e  $\alpha_2$  com a nova variável aleatória  $\tau$ :

$$\begin{cases} \eta \alpha_1 = 1 + (\eta - 1)\tau \\ \eta \alpha_2 = 1 - \tau \end{cases} \quad (\text{III-65})$$

Esta função do campo aleatório cresce monotonicamente, adquirindo os valores  $0 < \tau < 1$ , para  $0 < Y < \infty$ . Para invertermos basta calcular:

$$[e^Y + (q-1)]\tau = e^Y - 1, \quad e^{Y(1-\tau)} = 1 + (q-1)\tau,$$

$$e^Y = \frac{1 + (q-1)\tau}{1-\tau} \rightarrow$$

$$Y = \ln \left\{ \frac{[1 + (q-1)\tau]}{(1-\tau)} \right\}, \quad \beta h = (q-1)Y/q \quad (\text{III-66})$$

As expressões para os coeficientes em (III-51) saem das equações (III-65) e (III-50). Assim obtemos

$$\left\{ \begin{aligned} g_0 &= q \ln A - Y \\ g_1 &= q \beta h + \kappa [\alpha_1 + (q-1)\alpha_2] - \kappa \\ g_2 &= (q-1) \frac{\kappa^2}{q^2} \left\{ [1 + (q-1)\tau](1-\tau) + (1-\tau)(q+\tau-1) \right\} - (q-1)\kappa \\ g_3 &= (q-1) \frac{\kappa^3}{q^3} \left\{ [2 + 2(q-1)\tau - q](\tau-1)[1 + (q-1)\tau] + \right. \\ &\quad \left. [(1-\tau-q)(2-2\tau-q)(1-\tau)] \right\} \\ g_4 &= (q-1) \frac{\kappa^4}{q^4} \left\{ \alpha_1(\alpha_1-1)(6\alpha_1-1-6\alpha_1^2) + (q-1)(\alpha_2-1)\alpha_2(6\alpha_2-1-6\alpha_2^2) \right\} \end{aligned} \right. \quad (\text{III-67a})$$

Dai obtemos explicitamente

$$\left\{ \begin{aligned} g_0 &= q \ln [e^{\beta h} + (q-1)e^{-\beta h/(q-1)}] \\ g_1 &= q \beta h \\ g_2 &= -q \beta^2 \left[ 1 - \frac{\beta^2}{(q-1)}(1-\tau^2) \right] \\ g_3 &= q (\beta^3)^3 \frac{(q-2)}{(q-1)} (1-\tau)^2 (1+2\tau) \\ g_4 &= \frac{q(\beta^4)^4}{(q-1)^3} (q^2-6q+6)(1-\tau) \left\{ (1+\tau) - \frac{6\tau^2 [(q^2-5q+5) - (q^2-3q+3)\tau]}{(q^2-6q+6)} \right\} \end{aligned} \right. \quad (\text{III-67b})$$

Definimos finalmente a expansão

$$f = f_0 + f_1 m + \frac{\eta}{2} m^2 + \omega m^3 + \nu m^4 \quad (\text{III-68})$$

donde

$$\left\{ \begin{aligned} f_0 &= -\frac{1}{\beta} \ln \left[ e^{\beta h} + (q-1) e^{-\beta h/(q-1)} \right] \\ f_1 &= -H \\ \eta &= \frac{2}{T} [T - T_c], \quad T_c = T_c(0)(1-z^2); \quad T_c(0) = \frac{2}{k_B(q-1)} \\ \omega(z) &= \omega(0)(1-z)^2(1+2z) \\ \nu(z) &= \nu(0)(1-z) \left\{ (1+z) - \frac{6z^2}{(q^2-6q+6)} \left[ (q^2-5q+5) - (q^2-3q+3)z \right] \right\} \end{aligned} \right. \quad (\text{III-69})$$

Então temos que para campo aleatório nulo vem:

$$\left\{ \begin{aligned} \eta(0) &= \frac{\beta J}{T} \left[ T - \frac{2}{k_B(q-1)} \right] \\ \omega(0) &= -\beta \frac{J^3}{6} \frac{(q-2)}{(q-1)^2} \\ \nu(0) &= -\beta \frac{J^4}{24} \frac{(q^2-6q+6)}{(q-1)^3} \end{aligned} \right. \quad (\text{III-70})$$

Para  $(q^2 - 6q + 6) > 0$  temos  $\nu(0) < 0$ , e devemos utilizar termos de ordem mais elevada na expansão, para satisfazer a estabilidade da energia livre. Isto implica que

$$1,268 < q < 4,732$$

(III-71a)

são os valores de  $q$  que podem ser estudados com a expansão até quarta ordem, ou seja:  $q = 2, 3$ , ou  $4$ .

Além disso, temos  $U(\tau) < 0$  para  $\tau > \tau^*(q)$ , com:

$$\begin{cases} \tau^*(2) \simeq 0,577 \\ \tau^*(3) \simeq 0,542 \\ \tau^*(4) \simeq 0,465 \end{cases} \quad \text{(III-71b)}$$

No modelo de Ising, os coeficientes da expansão serão

$$\begin{cases} f_0 = -\frac{1}{\beta} \ln [\cosh \beta h] \\ f_1 = -H \\ \pi = \frac{2}{T} (T - T_c); \quad T_c = \frac{J}{K_3} \cosh^{-2} \beta h \\ \omega = 0 \\ U = \frac{\beta^3 J^4}{12} \cosh^{-2} \beta h (1 - 3 t_g h^2 \beta h) \end{cases} \quad \text{(III-72)}$$

que se obtém de (III-69) para  $q=2$ . A diferença do resultado da literatura estão comentados no apêndice (2) e no capítulo (IV-B). Não oferece problema algum, contudo, pois os coeficientes fornecem a mesma linha de transição e ponto tricrítico.

## (2) Linha de transição e ponto crítico

Uma transição de fase é de primeira ordem se ocorrer uma variação brusca na primeira derivada da energia livre em relação ao campo, isto é, havendo dois mínimos, aquele com menor energia se torna maior e o sistema passa para uma fase mais estável, com um salto na magnetização. Quando acontece de o salto tornar-se tão pequeno quanto se queira, ocorre um ponto crítico, onde termina a transição.

Precisamos aqui das primeiras quatro derivadas da energia livre em (III-68):

$$\begin{cases} f' = 4v m^3 + 3w m^2 + r m - H \\ f'' = 12v m^2 + 6w m + r \\ f''' = 24v m + 6w \\ f^{(iv)} = 24v \end{cases} \quad (\text{III-73})$$

para obter os critérios para a linha de transição e o ponto crítico. Explanaremos a seguir as requisitos matemáticos para que os mínimos da função tenham mesmo valor e para que a sua derivada tenha um ponto de inflexão, e depois aplicaremos estes resultados aos conceitos de transição de fase. Da condição de extremo temos

$$f' = 0 \quad \therefore \begin{cases} 2 \text{ mínimos: } \begin{cases} m_p ; f(m_p) = f_p \quad (f'' > 0) \\ m_f ; f(m_f) = f_f \end{cases} \\ 1 \text{ máximo: } m_n ; f(m_n) = f_n \quad (f'' < 0) \end{cases} \quad (\text{III-74})$$

se  $f^{(iv)} > 0$ . Então a relação:

se  $f'''(m_t) = 0$  então  $f''(m_t)$  é mínimo (III-75)

implica que quando  $m_t = m_m$  então  $f_p = f_f$ , ou seja, pela simetria do polinômio  $f$ , se o mínimo da segunda derivada coincidir com o máximo de  $f$ , os valores de  $f$  para os dois mínimos coincidem. Isto está representado na figura 5.

Assim, as condições

$$\left\{ \begin{array}{l} f'''(m_t) = 0 \\ f'(m_t) = 0 \end{array} \right. \quad \text{(III-76)}$$

dão a linha de transição  $r_t = r(H_t)$ . Assim

$$6.w + 24.u.m_t = 0, \quad m_t = -w/4u,$$

$$f'(m_t) = -H - w.r/4u + 3w.w^2/16u^2 - 4u.w^3/64u^3 = 0, \text{ donde:}$$

$$w.r/4u = 2w^3/16u^2 - H, \quad 4u.r/9w^3 = 2/9 - 16u^2.H/9w^3,$$

ou ainda, definindo as variáveis tipo temperatura e campo:

$$\left\{ \begin{array}{l} R \equiv \frac{4u}{9w^2} r \\ Z \equiv \frac{-16u^2}{27w^3} H \end{array} \right. \quad \text{(III-77)}$$

segue:

$$R_t = \frac{1}{9} (2 + 27 Z_t) \quad \text{(III-78)}$$

para a expressão da linha de transição nas variáveis adimensionais  $R$  e  $Z$ . Este resultado coincide com o resultado da literatura.<sup>26</sup>

Para encontrar o ponto crítico basta que haja um ponto de

inflexão em  $f'$  (figura 6):

$$\begin{cases} f'''(m_c) = 0 \\ f''(m_c) = 0 \end{cases} \rightarrow m_p = m_f \equiv m_c \quad (\text{III-79})$$

Logo

$$m_c = \frac{-w}{4u} \quad (\text{III-80})$$

$$f''(m_c) = r - 6w/4u + 12u \cdot w^2/16u^3 = 0, \quad 4u \cdot r/w^3 = 3, \text{ daí}$$

$$R_c = 1/3 \quad (\text{III-81a})$$

e colocando em (III-78):

$$Z_c = 1/27 \quad (\text{III-81b})$$

definindo o ponto onde termina a transição de primeira ordem, isto é, onde não há variação brusca na primeira derivada, e ocorre uma divergência na segunda derivada da energia livre<sup>19</sup>, proporcional ao inverso da susceptibilidade, conforme a lei de Curie-Weiss:

$$, \quad \Delta m = 0 ;$$

$$f'' \sim \chi_T^{-1} ; \quad \chi_T(R) \sim \frac{1}{R-R_c} \rightarrow \chi_T(R_c) = \infty \therefore f_c'' = 0$$

Usando os valores de (III-69) para os coeficientes da energia livre (III-68), obtemos uma dependência no campo aleatório para a superfície e linha de pontos críticos.

Podemos construir então o diagrama de fases em função das



tres variáveis:  $(R_0, Z_0, \tau)$ , que serão definidas logo abaixo, separando a dependência na temperatura e no campo uniforme do campo aleatório.

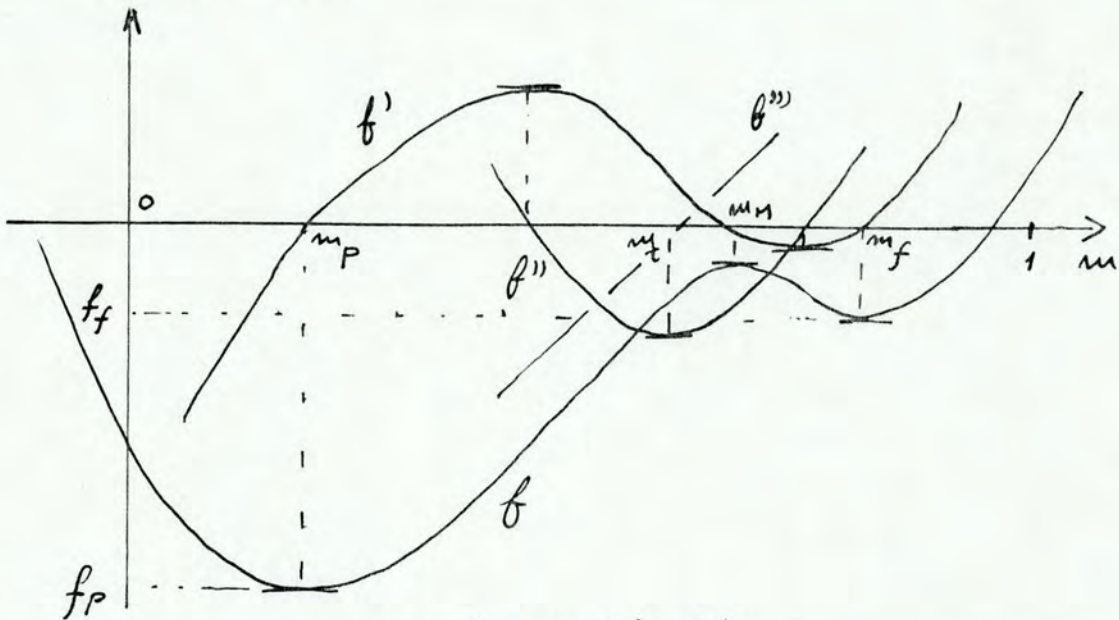


Figura 5: Definimos  $\begin{cases} \text{mín } f'' \equiv f''(m_t) \\ \text{máx } f \equiv f(m_n) \end{cases}$

Observa-se que quando  $m_t = m_n \Rightarrow f_p = f_f$

e há uma linha de transição. A região com  $f'' < 0$  é instável.

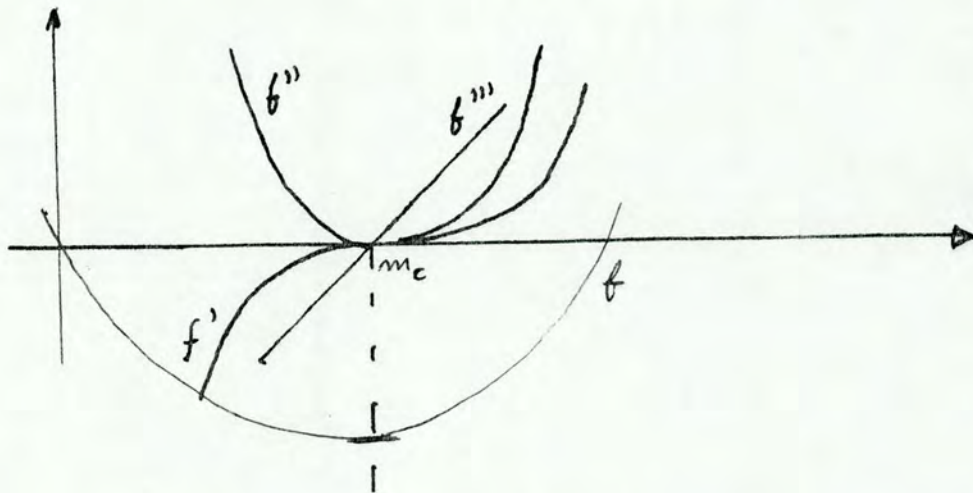


Figura 6: Se não ocorrer extremos, mas um ponto de inflexão em  $f'$ , então  $f''$  e  $f'''$  tem a mesma raiz, então há um ponto crítico.

$$( f''(m_c) \sim X_{T_c}^{-1} = 0 )$$

(3) Diagrama de fases.

Utilizando as equações (III-78) e (III-81) para a construção analítica da superfície de coexistência e linha crítica respectivamente, partimos das escalas em (III-77), definindo:

$$\left\{ \begin{array}{l} R(\tau) \equiv R_1(\tau) f_n(\tau); \quad R_1(\tau) \equiv R_0 + R\tau, \quad R_0 \equiv R(0) \\ Z(\tau) \equiv Z_0 f_H(\tau); \quad Z_0 \equiv Z(\tau=0) \end{array} \right. \quad (\text{III-82})$$

onde, de (III-70) vem:

$$\left\{ \begin{array}{l} R_1 \equiv \frac{4\nu_0}{9\omega_0^2} \gamma = \frac{-2}{3} \frac{(\eta^2 - 6\eta + 6)(\eta - 1)}{(\eta - 2)^2} \frac{K_B}{T} (T - T_c) \\ Z_0 \equiv \frac{-16\nu_0^2}{27\omega_0^3} H = \frac{2}{9} \frac{(\eta^2 - 6\eta + 6)^2}{(\eta - 2)^3} H/\gamma \end{array} \right. \quad (\text{III-83})$$

e de (III-67), as "funções de aleatoriedade" são:

$$\left\{ \begin{array}{l} f_n(\tau) = \\ (1-\tau)^{-3} (1+2\tau)^{-2} \left\{ (1+\tau) - \frac{6\tau^2}{(\eta^2 - 6\eta + 6)} \left[ (\eta^2 - 5\eta + 5) - (\eta^2 - 3\eta + 3)\tau \right] \right\} \\ f_H(\tau) = \\ (1-\tau)^{-4} (1+2\tau)^{-3} \left\{ (1+\tau) - \frac{6\tau^2}{(\eta^2 - 6\eta + 6)} \left[ (\eta^2 - 5\eta + 5) - (\eta^2 - 3\eta + 3)\tau \right] \right\} \end{array} \right. \quad (\text{III-84})$$

A aproximação até segunda ordem (não há efeito de primeira ordem) no campo aleatório dá:

$$\left\{ \begin{array}{l} f_n(\tau) = 1 + \left[ 5 - 6 \frac{(\eta^2 - 5\eta + 5)}{(\eta^2 - 6\eta + 6)} \right] \tau^2 + O(\tau^3) \\ f_H(\tau) = 1 + \left[ 7 - 12 \frac{(\eta^2 - 5\eta + 5)}{(\eta^2 - 6\eta + 6)} \right] \tau^2 + O(\tau^3) \end{array} \right. \quad (\text{III-85})$$

Podemos então reescrever (III-78) e (III-81) como:

$$\left\{ \begin{array}{l} 9 R_{1,t} f_H(\tau_t) = 2 + 27 Z_{0,t} f_H(\tau_t) \\ R_{1,c} f_H(\tau_c) = 1/3 \\ Z_{0,c} f_H(\tau_c) = 1/27 \end{array} \right. \quad (\text{III-86})$$

Para os casos em que esta análise é válida, pelo argumento em (III-71),  $q=2,3$  e  $4$ , obtemos os seguintes valores para o campo uniforme crítico, da última equação, observando (III-83) e na aproximação (III-85):

$$\begin{aligned} q=2 : H/\gamma &= 0, f_H = (1-\tau^2) \Rightarrow H_c = 0 \\ q=3 : H/\gamma &= Z_0/2, f_H = (1+3\tau^2) \Rightarrow H_c/\gamma = (1-3\tau^2)/54 \\ q=4 : H/\gamma &= 9 Z_0, f_H = (1+13\tau^2) \Rightarrow H_c/\gamma = (1-13\tau^2)/3 \end{aligned} \quad (\text{III-87})$$

Pode-se notar que o campo crítico está aumentando com o número de estados. Isto quer dizer que para  $q=2,3,4$  o campo uniforme necessário para se ter um ponto crítico, ou seja, terminar uma transição de primeira ordem, aumenta com  $q$ .

Para procedermos à passagem do sistema de variáveis usado aqui e o de (III-25), para  $q=3$ , devemos fazer as transformações:

$(R_0, \tau, Z_0) \rightarrow (x, y, z)$ , com (no limite  $\tau \ll 1$ ):

$$\left\{ \begin{array}{l} z = 2 \ln 3 / 3\beta\gamma; R_0 = 4/\beta\gamma - 2, R_2 = 2\tau^2 \rightarrow R_1 = \frac{6z}{\ln 3} - 2(1-\tau^2) \\ y = H/\gamma; \tau \rightarrow \beta H/2 = \gamma \ln 3 / 3z \\ z = H/\gamma; Z_0 = H/2\gamma \rightarrow Z_0 = z/2 \end{array} \right. \quad (\text{III-88})$$

Outro detalhe importante é que a energia livre (III-68) se encontra na literatura sobre o modelo de Potts com campo externo se tomarmos a magnetização ortogonal ao campo nula ( $s_{\perp}=0$ ) e a magnetização paralela  $s_{\parallel}=m$ .

#### (IV) SOLUÇÕES FORMALMENTE RIGOROSAS

##### A) O método de van Hemmen

Um método rigoroso foi desenvolvido recentemente <sup>27</sup> para tratar o problema da interação de troca aleatória; neste capítulo o generalizamos para o modelo de Potts com aleatoriedade ou no campo ou na interação de troca. O segundo caso será tratado no quinto capítulo, enquanto o primeiro o será aqui.

O artigo de van Hemmen trabalha com o seguinte Hamiltoniano de Ising:

$$\mathcal{H} = -\frac{\mathcal{J}_0}{N} \sum_{(i,j)} s_i s_j - \sum_{(i,j)} \mathcal{J}_{ij} s_i s_j - H \sum_i s_i \quad (\text{IV-1})$$

Colocando os parâmetros

$$\vec{m} = (m, q_1, q_2), \quad \begin{cases} m \equiv \frac{1}{N} \sum_i s_i \\ q_1 \equiv \frac{1}{N} \sum_i \xi_i s_i \\ q_2 \equiv \frac{1}{N} \sum_i \eta_i s_i \end{cases} \quad (\text{IV-2})$$

para a interação aleatória na forma:

$$\mathcal{J}_{ij} = \mathcal{J}/N (\xi_i \eta_j + \xi_j \eta_i) \quad (\text{IV-3})$$

reescreve o Hamiltoniano da maneira seguinte:

$$-\beta \mathcal{H}/N \equiv Q(\vec{m}) = \beta \left( \mathcal{D}_0 \frac{m^2}{2} + \mathcal{D} q_1 q_2 + H m \right) \quad (\text{IV-4})$$

A seguir, introduz as funções convexas:

$$C(t) = \ln \langle \exp(t\sigma) \rangle \quad (\text{IV-5})$$

e sua transformada de Legendre:

$$C^*(m) = \sup_{-\infty < t < \infty} \{ mt - C(t) \} \quad (\text{IV-6})$$

para a variável estocástica  $\mathcal{V}$ , e obtém, a partir da lei dos grandes números, que para uma sequência de variáveis independentes  $\mathcal{V}_i$ , distribuídas identicamente com média zero e variância finita, no limite de  $N$  infinito, a probabilidade

$$P \{ m \leq S \leq m + dm \} \sim e^{-N C^*(m)} dm \quad (\text{IV-7})$$

onde

$$S \equiv \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \mathcal{V}_i \quad (\text{IV-8})$$

Agora van Hemmen retorna ao Hamiltoniano em (IV-4), e define:

$$C(\vec{t}) \equiv \lim_{N \rightarrow \infty} N^{-1} \ln \langle \exp(N \vec{t} \cdot \vec{m}) \rangle, \quad (\text{IV-9a})$$

dai obtendo

$$C(\vec{t}) = \left[ \ln \cosh(t_1 + \xi t_2 + \eta t_3) \right] \quad (\text{IV-9b})$$

onde o brácket indica a expectância e a última expressão é válida para quase qualquer configuração aleatória dos  $\xi_i$  e  $\eta_j$ .

Assim, generalizando o resultado de (IV-7), finalmente obtém

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \langle e^{-\beta \chi} \rangle \sim \int d\vec{m} \exp N \{ Q(\vec{m}) - C^*(\vec{m}) \} \quad (\text{IV-10})$$

o que produz a seguinte energia livre:

$$-\beta f = \max_{\vec{m}} \{ Q(\vec{m}) - C^*(\vec{m}) \} \quad (\text{IV-11})$$

Aqui a entropia média é

$$-C^*(\vec{m}) = \sup_{\vec{E}} \{ C(\vec{E}) - \vec{m} \cdot \vec{E} \} \quad (\text{IV-12})$$

Recentemente este método foi empregado para o problema do campo aleatório de Ising por Salinas e Wreszinski,<sup>28</sup> sendo que ao invés dos parâmetros de (IV-2) temos:

$$\vec{m} = (m_0, m_1) \equiv \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (h_i, 1) s_i \quad (\text{IV-13})$$

donde o Hamiltoniano é escrito como

$$-\beta \mathcal{H}/N = \beta (r/2 m_1^2 + H m_1 + m_0) \quad (\text{IV-14})$$

Nesta publicação foi utilizada uma distribuição de probabilidade discreta. Os autores em primeiro lugar realizaram a média em (IV-

9), agora na forma:

$$C(\vec{T}) = \left[ \ln T_r \left\{ e^{(t_1 + t_2 h) s} \right\} \right] \quad (\text{IV-15})$$

e depois calcularam o extremo em (IV-12), colocando o valor obtido em (IV-11). A minimização aí indicada está na sequência do artigo, formalmente:

$$\frac{\partial Q}{\partial \vec{m}} = \frac{\partial C^*}{\partial \vec{m}} \quad (\text{IV-16})$$

Procuramos neste capítulo simplificar a tarefa deste ponto, a fim de encontrar a energia livre sem necessidade de inverter a equação do extremo:

$$\frac{\partial C}{\partial \vec{T}} = \vec{m} \quad (\text{IV-17})$$

Além disso vamos utilizar este método para o modelo de Potts, com o Hamiltoniano dado por:

$$\mathcal{H} = -\frac{J}{2} N \vec{m}^2 - N m_0 - N \vec{H} \cdot \vec{m} \quad (\text{IV-18})$$

onde definimos os parâmetros

$$m^\mu \equiv (m_0, \vec{m}) \equiv \frac{1}{N} \sum_i^N (\vec{h}_i^\lambda, 1) \cdot \vec{e}_i^\mu \quad (\text{IV-19})$$

A energia livre será dada por



$$-\beta \phi = \max_{m^N \in \mathbb{R}^q} \{ Q(m^N) - C^*(m^N) \} \quad (\text{IV-20})$$

com as definições

$$Q(m^N) = -\beta H(m^N)/N \quad (\text{IV-21a})$$

$$C^*(m^N) = \sup_{t^N \in \mathbb{R}^q} \{ m^N t^N - C(t^N) \} \quad (\text{IV-21b})$$

$$C(t^N) = \lim_{N \rightarrow \infty} N^{-1} \ln \langle \exp(N t^N m_{iN}) \rangle \quad (\text{IV-21c})$$

Tomando  $\vec{t}$  na direção de um vetor de Potts, então a função  $C$  fica, observando (IV-19):

$$C(t^N) = \lim_{N \rightarrow \infty} N^{-1} \ln \left\{ \text{Tr} \prod_i \exp(t_0 \vec{h}_i \cdot \vec{e}_i^N + \vec{t} \cdot \vec{e}_i^N) \right\} =$$

$$\lim_{N \rightarrow \infty} N^{-1} \sum_i \ln \left\{ \text{Tr} \exp(t_0 \vec{h}_i \cdot \vec{e}_i^N + \vec{t} \cdot \vec{e}_i^N) \right\} = \quad (\text{IV-22})$$

$$\left[ \ln \text{Tr} \exp \left\{ t_0 h(q d_{\mu, 2}^{-1}) + t(q d_{\mu, 1}^{-1}) \right\} / (q-1) \right]$$

Os extremos de (IV-11) e (IV-12) podem ser escritos como:

$$\left\{ \begin{array}{l} \partial C / \partial t^N = m_N \end{array} \right. \quad (\text{IV-23a})$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial Q}{\partial m^N} = \frac{\partial C^*}{\partial m^N} \end{array} \right. \quad (\text{IV-23b})$$

Agora podemos calcular a entropia colocando a primeira equação em (IV-23) na segunda e observando (IV-21):

$$\begin{aligned} \frac{\partial Q}{\partial m_\mu} &= \sup_{t^\mu} \left\{ \frac{\partial}{\partial m_\mu} [m_\nu t^\nu - C(t^\mu)] \right\} = \\ & \sup_{t^\mu} \left\{ \delta_{\mu\nu} t^\nu + m_\nu \frac{\partial t^\nu}{\partial m_\mu} - \frac{\partial C}{\partial m_\mu} \right\} = \\ & \sup_{t^\mu} \left\{ t_\mu + \frac{\partial C}{\partial t^\nu} \frac{\partial t^\nu}{\partial m_\mu} - \frac{\partial C}{\partial t^\nu} \frac{\partial t^\nu}{\partial m_\mu} \right\} = \sup t_\mu \end{aligned} \quad (\text{IV-24})$$

Pondo esta igualdade nas expressões (IV-21b) e (IV-20) obtemos

$$-\beta \phi(\beta) = \max_{m_\mu \in \mathbb{R}^q} \left\{ Q(m^\mu) - m^\mu \frac{\partial Q}{\partial m^\mu} + C\left(\frac{\partial Q}{\partial m^\mu}\right) \right\} \quad (\text{IV-25})$$

onde, de (IV-18),

$$\frac{\partial Q}{\partial m^\mu} = \beta(1, \partial \vec{m} + \vec{H}) = \sup(t_0, \vec{t}) \quad (\text{IV-26})$$

e a energia livre, de (IV-22) e (IV-25), fica, sendo o traço uma soma sobre os estados de spin, (ou seja, sobre  $\mu$ )

$$-\beta \phi(\beta) = \max_{m^\mu} \left\{ -\beta \frac{1}{2} \vec{m}^2 + C\left(\frac{\partial Q}{\partial m^\mu}\right) \right\} \quad (\text{IV-27a})$$

$$C\left(\frac{\partial Q}{\partial m^\mu}\right) = \left[ \ln \left\{ e^{\beta h \frac{(q d_{\mu, i} - 1) + \beta(\partial m + H)}{(q-1)}} + \sum_{\mu=2}^q e^{\beta h \frac{(q d_{\mu, \bar{i}} - 1) - \beta(\partial m + H)}{(q-1)}} \right\} \right] \quad (\text{IV-27b})$$

Para calcular a média configuracional em (IV-27b) necessitamos conhecer a distribuição de probabilidade do campo. Vamos escolher uma distribuição discreta, com igual probabilidade

para qualquer dos  $q$  estados, como uma generalização daquela usada na literatura<sup>28</sup> para a função de (IV-15):

$$p(\vec{h}^\lambda) = \frac{1}{q} \sum_{\eta}^q f(\vec{h}^\lambda - \vec{h}_\eta) \quad (\text{IV-28})$$

Com ela, (IV-27b) se torna:

$$C\left(\frac{\partial Q}{\partial m^\mu}\right) = \frac{1}{q} \left\{ \ln \left[ e^{\beta(\sum m + H + h)} + (q-1)e^{-\beta(\sum m + H + h)/(q-1)} \right] + (q-1) \ln \left[ e^{\beta(\sum m + H) - \frac{\beta h}{(q-1)}} + e^{-\beta(\frac{\sum m + H}{(q-1)} + \beta h)} + (q-2)e^{-\beta(\frac{\sum m + H + h}{(q-1)})} \right] \right\} \quad (\text{IV-29})$$

e a energia livre resulta, com as escalas de (III-42) e rearranjando (IV-29), em

$$q\beta\phi(\beta) = (q-1)\frac{\kappa}{2}m^2 + (\kappa m + z + y) - \ln \left[ e^{\kappa m + z + y} + q-1 \right] - (q-1) \ln \left[ e^{\kappa m + z} + e^y + q-2 \right] \quad (\text{IV-30})$$

que é o mesmo de resultado de (III-12).

Podemos agora obter as relações autoconsistentes para os parâmetros de ordem, usando (IV-23a),

$$\begin{cases} \vec{m} = \partial C / \partial \vec{e} = [ \langle \vec{e}^\mu \rangle ] \\ m_0 = \partial C / \partial t_0 = [ \langle \vec{h}^\lambda \cdot \vec{e}^\mu \rangle ] \end{cases} \quad (\text{IV-31})$$

O cálculo pode ser realizado promediando primeiro termica e a seguir configuracionalmente, ou ainda derivando a expressão (IV-29). Ele está feito no apêndice (1), e nos dá os seguintes

resultados:

$$\left. \begin{aligned}
 q^m &= \frac{e^{(q-1)(A+B)} - e^{-(A+B)}}{(q-1)(A+B) - (A+B)} + \frac{e}{e + (q-1)e} \\
 (q-1) & \frac{e^{(q-1)A-B} - \frac{1}{(q-1)} e^{-A+(q-1)B} - \frac{(q-2)}{(q-1)} e^{-(A+B)}}{(q-1)A-B - A+(q-1)B - (A+B)} + \frac{e}{e + e + (q-2)e} \quad (IV-32a) \\
 q \frac{m_0}{h} &= \frac{e^{(q-1)(A+B)} - e^{-(A+B)}}{(q-1)(A+B) - (A+B)} + \frac{e}{e + (q-1)e} \\
 (q-1) & \frac{-\frac{1}{(q-1)} e^{(q-1)A-B} + e^{-A+(q-1)B} - \frac{(q-2)}{(q-1)} e^{-(A+B)}}{(q-1)A-B - A+(q-1)B - (A+B)} + \frac{e}{e + e + (q-2)e} \quad (IV-32b)
 \end{aligned} \right\}$$

onde usamos as escalas de (III-9).

A primeira equação ainda pode ser escrita como:

$$m = \frac{e^{k_m + z}}{e^{k_m + z} + e + q - 2} - \frac{1}{e^{k_m + z + y} + q - 1} \quad (IV-33)$$

coincidindo com o resultado de (III-22) e o da literatura<sup>14</sup>, obtida derivando a energia livre, a partir de:

$$\partial f / \partial m = 0 \quad \text{ou} \quad m = - \partial f / \partial H \quad (IV-34)$$

No modelo de Ising, com  $q=2$ , a energia livre (IV-30) e a equação autoconsistente para o parâmetro de ordem (o segundo parâmetro não é de ordenamento, pois se anula com o campo

aleatório) ficam como em (III-23) e (III-24). A diferença do resultado da literatura <sup>28</sup> para a energia livre está no fato que aqui as equações da autoconsistência já foram utilizadas em (IV-23b) para a magnetização, enquanto lá apenas foi usada a equação equivalente de (IV-23a). A ambiguidade, no entanto, é apenas aparente, pois ambos resultados dependem da minimização em relação ao parâmetro de ordem, e no ponto fixo deste coincidem.

## B) Justificativa do Método

Vamos tentar justificar nesta seção, seguindo a literatura<sup>22</sup>, o método à van Hemmen usado no capítulo anterior, bem como o emprego do cálculo direto (III-5) ou (I-8) para a energia livre dos sistemas aleatórios. O modelo usado terá o Hamiltoniano colocado na forma geral, onde definimos as componentes  $\alpha_i^m$ :

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}(\alpha_i^m), \text{ com } m^m \equiv \frac{1}{N} \sum_i^N \alpha_i^m \quad (\text{IV-35})$$

Temos inicialmente

$$-\beta f(\beta) = \lim_{N \rightarrow \infty} N^{-1} \ln \text{Tr} e^{-\beta \mathcal{H}(\alpha_i^m)} \quad (\text{IV-36})$$

Para calcular o traço vamos introduzir as deltas de Dirac na sua representação como integral de Fourier:

$$\delta(Nm^m - \sum_i \alpha_i^m) = \int dt^m e^{i N t^m (m^m - \frac{1}{N} \sum_i \alpha_i^m)} \quad (\text{IV-37})$$

Assim, escrevendo

$$\text{Tr} e^{-\beta \mathcal{H}(\alpha_i^m)} = \text{Tr} \int dm^m \delta(Nm^m - \sum_i \alpha_i^m) e^{-\beta \mathcal{H}(m^m)} \quad (\text{IV-38})$$

o traço pode ser representado como

$$\begin{aligned} \text{Tr} e^{-\beta \mathcal{H}(\alpha^i)} &= \int dm^\mu \int dt_\mu e^{i N t_\mu (m^\mu - \frac{1}{N} \sum_i \alpha^i) - \beta \mathcal{H}(m^\mu)} \\ \text{Tr} \int dm^\mu \int dt_\mu e & \end{aligned} \quad (\text{IV-39})$$

ou ainda:

$$\begin{aligned} \text{Tr} e^{-\beta \mathcal{H}} &= \int dm_\mu e^{-\beta \mathcal{H}(m^\mu)} \int dt^\mu e^{i N t_\mu m^\mu} \frac{1}{\text{Tr} \prod_i} e^{-i t_\mu \alpha^i} \\ \int dm_\mu e^{-\beta \mathcal{H}(m^\mu)} \int dt^\mu e^{i N t_\mu m^\mu} \frac{1}{\text{Tr} \prod_i} e^{-i t_\mu \alpha^i} & \end{aligned} \quad (\text{IV-40})$$

Após substituir  $t_\mu \rightarrow i t_\mu$ , vem

$$\begin{aligned} \text{Tr} e^{-\beta \mathcal{H}(\alpha^i)} &= \int dm_\mu e^{-\beta \mathcal{H}(m^\mu)} \int dt^\mu \exp N \left\{ -t_\mu m^\mu + \frac{1}{N} \sum_i \ln \text{Tr} e^{t_\mu \alpha^i} \right\} \\ \int dm_\mu e^{-\beta \mathcal{H}(m^\mu)} \int dt^\mu \exp N \left\{ -t_\mu m^\mu + \frac{1}{N} \sum_i \ln \text{Tr} e^{t_\mu \alpha^i} \right\} & \end{aligned} \quad (\text{IV-41})$$

e finalmente, resolvendo pelo método do ponto de sela, obtemos

$$-\beta f(\rho) = \max_{m^\mu \in \mathbb{R}^q} \left\{ Q(m^\mu) - C^*(m^\mu) \right\} \quad (\text{IV-42})$$

onde definimos:

$$Q(m^\mu) \equiv -\beta \mathcal{H}(m^\mu) / N \quad (\text{IV-43})$$

e

$$-C^*(m^\mu) \equiv \max_{t^\mu \in \mathbb{R}^q} \left[ C(t^\mu) - m_\mu t^\mu \right] \quad (\text{IV-44})$$

sendo a função

$$C(t^n) \equiv \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_i \ln \{ \text{Tr} \exp(t_n \alpha_i^n) \} \quad (\text{IV-45})$$

equivalente, pela hipótese ergódica para as variáveis aleatórias (a média configuracional para cada sítio é igual à média sobre todos sítios à uma dada configuração do sistema) à:

$$C(t^n) = \left[ \ln \text{Tr} \exp(t_n \alpha^n) \right] \quad (\text{IV-46})$$

A prova de (IV-24) será refinada aqui.

Dada a transformada de Legendre (IV-44), temos o mapeamento de  $\mathbb{R}^q$  em  $\mathbb{R}^q$ , na notação tensorial:

$$t^n \rightarrow \partial_\mu C(t^n) = m_\mu, \quad \partial_\mu \equiv \frac{\partial}{\partial x_\mu} \quad (\text{IV-47})$$

cuja aplicação inversa é

$$m^\mu \rightarrow [\partial_\mu C(m^\mu)]^{-1} \equiv \partial_\mu C^*(m^\mu) \quad (\text{IV-48})$$

donde:

$$m^\mu = (\partial^\mu C^*)^{-1} (\partial_\mu C^*(m^\mu)) = \partial^\mu C (\partial_\mu C^*(m^\mu)) \quad (\text{IV-49})$$

Mas de (IV-42) vem



$$\partial_\mu Q(m^\mu) = \partial_\mu C^\dagger(m^\mu) \quad (\text{IV-50})$$

e obtemos

$$m^\mu = \partial^\mu C(\partial_\mu Q(m^\mu)) \quad (\text{IV-51})$$

Agora, comparando com (IV-47) se chega à:

$$\partial_\mu Q(m^\mu) = t_\mu \quad \text{Q.E.D.} \quad (\text{IV-52})$$

Finalmente, colocando em (IV-44) e (IV-42):

$$-\beta f(\beta) = \max_{m^\mu} \left\{ Q(m^\mu) - m^\mu \frac{\partial Q}{\partial m^\mu} + C[\partial_\mu Q(m^\mu)] \right\} \quad (\text{IV-53})$$

é a expressão para a energia livre, como em (IV-25).

Os termos homogêneos de grau  $n$  no parâmetro  $m_\mu$  dão contribuição à parte aleatória da energia livre do tipo:

$$A_\mu = Q_n(m^\mu) - m^\mu \partial_\mu Q_n(m^\mu) = (1-n) Q_n(m^\mu) \quad (\text{IV-54})$$

Assim, por exemplo, os termos quadráticos dão contribuição

$$Q_2 = a_{\mu\nu} m^\mu m^\nu \rightarrow A_2 = -Q_2 \quad (\text{IV-55})$$

os termos lineares

$$Q_1 = a_\mu m^\mu \rightarrow A_1 = 0, \quad \text{etc.} \quad (\text{IV-56})$$

Daí, para o Hamiltoniano

$$\mathcal{H}(m^\mu) = -\frac{J}{2} N \vec{m}^2 - N m_0 - N \vec{m} \cdot \vec{H} \quad (\text{IV-57})$$

com:

$$\left\{ \begin{array}{l} m_0 \equiv \frac{1}{N} \sum_i^N \vec{h}_i^\lambda \cdot \vec{e}_i^p \\ \vec{m} \equiv \frac{1}{N} \sum_i^N \vec{e}_i^p \end{array} \right\} \Leftrightarrow m^\mu = (\vec{m}, m_0) \quad (\text{IV-58})$$

(  $\mu = 1, \dots, q$  )  
(  $p = 1, \dots, q$  )

obtemos

$$-\beta \theta(\beta) = \max_{m^\mu} \left\{ -\beta \frac{J}{2} m^2 + \left[ \ln \text{Tr}_{\{\vec{e}^p\}} \exp \left\{ \beta (\frac{J}{2} \vec{m} + \vec{H} + \vec{h}^\lambda) \cdot \vec{e}^p \right\} \right] \right\} \quad (\text{IV-59})$$

coincidindo com a expressão (II-15) ou (III-5), demonstrando portanto que aquela é rigorosa.

## (V) VIDRO DE SPIN DE POTTS

### Método da ergodicidade

Um sistema caracterizado pela interação de troca aleatória pode ser descrito pelo Hamiltoniano:

$$-\mathcal{H}/N = \frac{\partial_0}{2} \vec{m}^2 + \frac{\mathcal{J}}{2} \vec{q}^2 + \vec{H} \cdot \vec{m} \quad (\text{V-1})$$

onde

$$\left\{ \begin{array}{l} \vec{m} \equiv \frac{1}{N} \sum_i^N \vec{e}_i^P \\ \vec{q} \equiv \frac{1}{N} \sum_i^N \xi_i \vec{e}_i^P \end{array} \right. \quad (\text{V-2})$$

estando a aleatoriedade nos coeficientes  $\xi_i$ .

Seguiremos nesta parte do capítulo o método desenvolvido no anterior, que é geral, ou seja, serve para qualquer Hamiltoniano de Potts com aleatoriedade. Dessa forma, as fórmulas (IV-53) e (IV-54) aplicadas ao modelo acima produz a seguinte energia livre: (aqui definimos as médias  $\vec{q} \equiv [\langle \vec{e}_i^P \xi_i \rangle]$  e  $\vec{m} \equiv [\langle \vec{e}_i^P \rangle]$ )

$$-\beta f(\beta) = -\beta \frac{\partial_0}{2} (\vec{m}^2 + \mathcal{J} \vec{q}^2) + C \left( \frac{\partial \mathcal{Q}}{\partial \vec{m}^2} \right) \quad (\text{V-3})$$

(o máximo aqui será considerado implícito),

com

$$C(t^{\mu}) = \left[ \ln \text{Tr} \exp(t^{\mu} \alpha_{\mu}) \right] \quad (\text{V-4})$$

onde usamos a definição (IV-35) e generalizamos (IV-2), com a diferença que aqui trataremos com apenas uma variável aleatória independente:

$$\begin{aligned} m_{\mu} &= (\vec{m}, \vec{q}) \\ \alpha_{\mu} &= (1, \xi) \vec{e}^{\mu} \end{aligned} \quad (\text{V-5})$$

e a derivada do Hamiltoniano dá

$$\frac{\partial Q}{\partial m^{\mu}} = \beta (\partial_0 \vec{m} + \vec{H}, \partial \vec{q}) \quad (\text{V-6})$$

Devemos agora promediar sobre a aleatoriedade com uma dada distribuição de probabilidade; no caso contínuo como é correto imaginar aqui, podemos escolher a distribuição gaussiana, por exemplo. Daí a expressão formal para a energia livre fica

$$\begin{aligned} -\beta f(\beta) &= -\beta/2 (\partial_0 \vec{m}^2 + \partial \vec{q}^2) + \\ &\int d\xi P(\xi) \ln \text{Tr} \exp \left\{ \beta (\partial_0 \vec{m} + \vec{H} + \partial \xi \vec{q}) \cdot \vec{e}^{\mu} \right\} \end{aligned} \quad (\text{V-7})$$

Este resultado é exato na teoria de campo médio como estudamos no segundo capítulo.

## B) Método de Réplicas

Devido a dificuldade de resolver-se a integral em (V-7), deve-se utilizar um método desenvolvido inicialmente por Sherrington e Kirkpatrick para o modelo de Ising<sup>30</sup> e bastante estudado quanto à estabilidade de sua solução.<sup>31,32,33</sup> A versão apresentada aqui será outra mais moderna na literatura,<sup>22</sup> também usada para o vidro de spin, e generalizaremos aqui para Potts.

O Hamiltoniano é "replicado" n vezes:

$$-\frac{\mathcal{H}_\alpha}{N} = \frac{\partial_0}{2} \vec{m}_\alpha^2 + \frac{\partial}{2} \vec{q}_\alpha^2 + \vec{H} \cdot \vec{m}_\alpha \quad (\text{V-8})$$

A técnica para o cálculo da energia livre é

$$-\beta F = [\ln Z] = \lim_{n \rightarrow 0} n^{-1} \ln \{ [Z^n] - 1 \} \quad (\text{V-9})$$

sendo

$$Z^n = \prod_\alpha^n Z_\alpha \quad (\text{V-10})$$

onde a função partição é

$$Z_\alpha = \prod_{\{\vec{e}_{\alpha,i}\}} \exp \{ -\beta \mathcal{H}_\alpha(\vec{e}_{\alpha,i}) \} \quad (\text{V-11})$$

Assim

$$Z^N = \text{Tr}_{\{\vec{e}_i^N\}} \prod_{\alpha} \exp \{-\beta \mathcal{H}_{\alpha}\} \quad (\text{V-12})$$

pois o traço sobre estados é independente da réplica. Para linearizarmos os termos quadráticos empregamos a relação (II-6):

$$e^{\beta/2 (\sum_0 \vec{u}_{\alpha}^2 + \sum \vec{q}_{\alpha}^2)} = \int \frac{d\vec{v}_{\alpha} d\vec{v}'_{\alpha}}{(2\pi/N)^{q-1}} e^{-\frac{N}{2} (\vec{v}_{\alpha}^2 + \vec{v}'_{\alpha}^2)} \exp \left\{ \sqrt{\beta/2} \vec{u}_{\alpha} \cdot \vec{v}_{\alpha} + \sqrt{\beta/2} \vec{q}_{\alpha} \cdot \vec{v}'_{\alpha} \right\} \quad (\text{V-13})$$

Observando (V-2), (V-12) pode ser escrito como

$$Z^N = \text{Tr} \left\{ \prod_{\alpha} \left[ \frac{d\vec{v}_{\alpha} d\vec{v}'_{\alpha}}{(2\pi/N)^{q-1}} e^{-\frac{N}{2} (\vec{v}_{\alpha}^2 + \vec{v}'_{\alpha}^2)} \prod_i \exp \left[ \left( \sqrt{\beta/2} \vec{v}_{\alpha} + \sqrt{\beta/2} \vec{v}'_{\alpha} \xi_i + \beta \vec{H} \right) \cdot \vec{e}_{i,\alpha}^N \right] \right] \right\} \quad (\text{V-14})$$

ou seja:

$$Z^N = \int \prod_{\alpha} \left\{ \frac{d\vec{v}_{\alpha} d\vec{v}'_{\alpha}}{(2\pi/N)^{q-1}} \right\} e^{-\frac{N}{2} \sum_{\alpha} (\vec{v}_{\alpha}^2 + \vec{v}'_{\alpha}^2)} \prod_i \prod_{\alpha} \exp \left\{ \left( \sqrt{\beta/2} \vec{v}_{\alpha} + \sqrt{\beta/2} \vec{v}'_{\alpha} \xi_i + \beta \vec{H} \right) \cdot \vec{e}_{i,\alpha}^N \right\} \quad (\text{V-15})$$

A média configuracional, usando a relação (II-9), e a seguinte propriedade da média generalizada numa distribuição simétrica em relação à média (segundo a tabela Abramowitch):

$$\lim_{N \rightarrow \infty} [f^N]^{1/N} = \text{máx } f = [f] \quad (\text{V-16})$$

fica, após passar a média para dentro da integral e realizar o limite  $N \gg 1$

$$[Z^N] = \int \prod_{\alpha} \left\{ \frac{d\vec{u}_{\alpha} d\vec{v}_{\alpha}}{(2\pi/N)^{q-1}} \right\} \exp N \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{\alpha} (\vec{u}_{\alpha}^2 + \vec{v}_{\alpha}^2) + \ln \left[ \text{Tr} \prod_{\alpha} e^{(\sqrt{\beta\gamma_0} \vec{u}_{\alpha} + \sqrt{\beta\gamma} \vec{v}_{\alpha} + \vec{H}) \cdot \vec{e}_{\alpha}^N} \right] \right\} \quad (\text{V-17})$$

Resolvendo pelo método do ponto de sela no limite termodinâmico estas integrais tomam o valor maximizado de cada componente e réplica do argumento

$$[Z^N] \xrightarrow{N \rightarrow \infty} \exp N \left\{ -\frac{\beta}{2} \sum_{\alpha} (\gamma_0 \vec{m}_{\alpha}^2 + \gamma \vec{q}_{\alpha}^2) + \ln \left[ \text{Tr} \prod_{\alpha} e^{\beta (\gamma_0 \vec{m}_{\alpha} + \gamma \vec{q}_{\alpha} + \vec{H}) \cdot \vec{e}_{\alpha}^N} \right] \right\} \quad (\text{V-18})$$

posto que os valores máximos da exponencial dão as variáveis de integração:

$$\begin{cases} \vec{u}_{\alpha}^{\text{máx}} = \left[ \frac{\text{Tr} (\sqrt{\beta\gamma_0} \vec{e}_{\alpha}^N) e^{-\beta A}}{\text{Tr} e^{-\beta A}} \right] \equiv \sqrt{\beta\gamma_0} \vec{m}_{\alpha} \\ \vec{v}_{\alpha}^{\text{máx}} = \left[ \frac{\text{Tr} (\sqrt{\beta\gamma} \vec{e}_{\alpha}^N) e^{-\beta A}}{\text{Tr} e^{-\beta A}} \right] \equiv \sqrt{\beta\gamma} \vec{q}_{\alpha} \end{cases} \quad (\text{V-19})$$

onde a função

$$A = \sum_{\alpha} -(\sqrt{\beta_0} \vec{u}_{\alpha} + \sqrt{\beta} \vec{v}_{\alpha} + \vec{H}) \cdot \vec{e}_{\alpha}^n \equiv$$

$$- \sum_{\alpha} (\partial_0 \vec{m}_{\alpha} + \partial \vec{q}_{\alpha} + \vec{H}) \cdot \vec{e}_{\alpha}^n \quad (\text{V-20})$$

é uma espécie de Hamiltoniano efetivo.

Então a expressão (V-9) para a energia livre se torna:

$$-n N \beta f = \lim_{\substack{n \rightarrow 0 \\ N \rightarrow \infty}} \exp N \left\{ -\frac{\beta}{2} \sum_{\alpha} (\partial_0 \vec{m}_{\alpha}^2 + \partial \vec{q}_{\alpha}^2) + \right.$$

$$\left. \ln \left[ \text{Tr}_{\alpha} \prod_{\alpha} \exp \beta (\partial_0 \vec{m}_{\alpha} + \partial \vec{q}_{\alpha} + \vec{H}) \cdot \vec{e}_{\alpha}^n \right] \right\} - 1 \quad (\text{V-21})$$

Expandindo a exponencial no limite das réplicas tendendo à zero

vem

$$- \beta f = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{n} \left\{ -\frac{\beta}{2} \sum_{\alpha} (\partial_0 \vec{m}_{\alpha}^2 + \partial \vec{q}_{\alpha}^2) + \right.$$

$$\left. \ln \left[ \text{Tr}_{\alpha} \prod_{\alpha} e^{\beta (\partial_0 \vec{m}_{\alpha} + \partial \vec{q}_{\alpha} + \vec{H}) \cdot \vec{e}_{\alpha}^n} \right] \right\} \quad (\text{V-22})$$

(a troca dos limites, bem como a continuação analítica de  $n$  para os reais pode ser realizada, como demonstrado na literatura<sup>12</sup>).

Se considerarmos a solução simétrica de réplicas

$$\left\{ \begin{array}{l} \vec{m}_{\alpha} \equiv \vec{m} \\ \vec{q}_{\alpha} \equiv \vec{q} \end{array} \right. \quad (\text{V-23})$$



chegamos a seguinte energia livre:

$$-\beta f(\beta) = -\frac{\beta}{2} (\gamma_0 \vec{m}^2 + \gamma_4 \vec{q}^2) +$$

$$\left[ \ln \text{Tr} \exp \left\{ \beta (\gamma_0 \vec{m} + \gamma_4 \vec{q} + \vec{H}) \cdot \vec{e}^n \right\} \right] \quad (\text{V-24})$$

Aqui usamos a regra de L'Hopital para

$$\frac{1}{n} \ln [f^n] \xrightarrow{n \rightarrow 0} \frac{[f^n \ln f]}{[f^n]} \xrightarrow{n \rightarrow 0} [\ln f] \quad (\text{V-25})$$

O resultado de (V-24) é exatamente o mesmo de (V-7), daí se conclui que este método de réplicas é correto ainda com a solução simétrica (V-23).

O método utilizado por Sherrington e Kirkpatrick difere deste porque, em primeiro lugar, há aqui apenas uma variável independente,  $\xi$ ; já para eles, existem  $N^2$ :  $\gamma_{ij}$ ; além disso, a distribuição de probabilidade naquele artigo é:

$$p(\gamma_{ij}) = \left( \frac{N}{2\pi\gamma^2} \right)^{1/2} \exp \left[ -N(\gamma_{ij} - \gamma_0)^2 / 2\gamma^2 \right] \quad (\text{V-26})$$

então aqui deveríamos promediar (V-22) com uma distribuição da forma

$$p(\xi) = \frac{e^{-\xi^2 / 2\sigma^2}}{\sqrt{2\pi} / \sigma} \quad (\text{V-27})$$

a fim de obter um resultado semelhante; esta integral não pode,

contudo, ser resolvida exatamente como antes.

Cabe ainda ressaltar a existência de um método de cálculo da literatura,<sup>10</sup> com a técnica de réplicas de Sherrington-Kirkpatrick, mas com a distribuição envolvendo uma interação de troca vetorial, com a mesma simetria dos vetores de Potts a saber:

$$P\{\vec{\tau}_{ij}\} = (2\pi \tau^2)^{-\frac{(q-1)}{2}} \exp\left\{-\frac{(\vec{\tau}_{ij} - \vec{\tau}_0)^2}{2\tau^2}\right\} \quad (V-28)$$

### C) Método de Sherrington-Kirkpatrick

Para calcular (V-9), Sherrington-Kirkpatrick resolvem primeiro a integral da média e depois linearizam, isto é:

$$[Z^m] = \int \prod_{ij} [p(\lambda_{ij}) d\lambda_{ij}] \text{Tr} \exp(-\beta \sum_{\alpha} \mathcal{H}_{\alpha}) \quad (\text{V-29})$$

com a distribuição dada em (V-26).

A generalização para o modelo de Potts encontra-se já na literatura,<sup>23</sup> mas como não está realizada explicitamente, vamos proceder aqui a sua explanação.

Usando

$$\int p(x) e^{ax} dx = e^{a\mu + a^2\sigma^2/2} \quad (\text{V-30})$$

para  $p(x) = \frac{e^{-(x-\mu)^2/2\sigma^2}}{\sqrt{2\pi}\sigma}$

$$p(x) = \frac{e^{-(x-\mu)^2/2\sigma^2}}{\sqrt{2\pi}\sigma}$$

com o Hamiltoniano

$$\mathcal{H}_{\alpha} = - \sum_{i,j}^N \lambda_{ij} \vec{e}_{i\alpha}^{\mu} \cdot \vec{e}_{j\alpha}^{\nu} - H \cdot \sum_i^N \vec{e}_{i\alpha}^{\mu} \quad (\text{V-31})$$

(V-29) fica:

$$\int p(\tau) d\tau e^{\beta \tau \sum_{\alpha} \vec{e}_{\alpha}^{\mu} \cdot \vec{e}_{\alpha}^{\nu}} = \exp \left\{ \beta \frac{\tau_0}{N} \left( \sum_{\alpha} \vec{e}_{\alpha}^{\mu} \cdot \vec{e}_{\alpha}^{\nu} \right) + \frac{(\beta \tau)^2}{2N} \left( \sum_{\alpha} \vec{e}_{\alpha}^{\mu} \cdot \vec{e}_{\alpha}^{\nu} \right)^2 \right\} \quad (V-32)$$

Então

$$[Z^n] = T_n \prod_i e^{\beta \bar{H} \cdot \sum_{\alpha} \vec{e}_{i\alpha}^{\mu}}$$

$$\prod_{ij} \exp \left\{ \beta \frac{\tau_0}{N} \sum_{\alpha} (\vec{e}_{i\alpha}^{\mu} \cdot \vec{e}_{j\alpha}^{\nu}) + \frac{(\beta \tau)^2}{2N} \sum_{\alpha, \beta} (\vec{D}_{i\alpha i\beta}^{\mu\mu} \times \vec{D}_{j\alpha j\beta}^{\nu\nu}) \right\} \quad (V-33)$$

onde definimos o tensor:

$$\vec{D}_{\alpha i \beta j}^{\mu\nu} = \vec{e}_{i\alpha}^{\mu} \cdot \vec{e}_{j\beta}^{\nu} \quad (V-34a)$$

tal que vale a relação

$$\vec{D}_{i\alpha i\alpha}^{\mu\mu} \times \vec{D}_{j\alpha j\alpha}^{\nu\nu} = (q-2) \vec{e}_{i\alpha}^{\mu} \cdot \vec{e}_{j\alpha}^{\nu} + (q-1) \quad (V-34b)$$

(usando a definição do produto escalar do modelo). Daí, reordenando os termos:

$$\left\{ \begin{aligned} \sum_{ij} \sum_{\alpha} \vec{e}_{i\alpha}^{\mu} \cdot \vec{e}_{j\alpha}^{\nu} &= \sum_{\alpha} \left( \sum_i \vec{e}_{i\alpha}^{\mu} \right)^2 \\ \sum_{ij} \sum_{\alpha, \beta} \vec{D}_{i\alpha i\beta}^{\mu\mu} \times \vec{D}_{j\alpha j\beta}^{\nu\nu} &= 2 \sum_{(\alpha\beta)} \left( \sum_i \vec{D}_{i\alpha i\beta}^{\mu\mu} \right)^2 + \sum_{\alpha} \left( \sum_i \vec{D}_{i\alpha i\alpha}^{\mu\mu} \right)^2 \end{aligned} \right. \quad (V-35)$$

onde o parenteses embaixo do somatório indica a soma restrita, a equação (V-32) fica:

$$[Z^n] = \text{Tr} \exp \left\{ \beta \vec{H} \cdot \sum_{\alpha} \sum_i \vec{e}_{i\alpha}^n + \beta \frac{\rho_0}{N} \sum_{\alpha} \left( \sum_i \vec{e}_{i\alpha}^n \right)^2 + \left( \frac{\beta J}{N} \right)^2 \left[ \sum_{(\alpha\beta)} \left( \sum_i \vec{D}_{i\alpha i\beta}^{nn} \right)^2 + \frac{(q-2)}{2} \sum_{\alpha} \left( \sum_i \vec{e}_{i\alpha}^n \right)^2 \right] \right\} \quad (\text{V-36})$$

Agora usando a identidade (II-6) para linearizar os termos quadráticos se chega à

$$[Z^n] = \text{Tr} \int \prod_{\alpha} \left\{ \frac{d\vec{x}_{\alpha}}{\sqrt{(2\pi/N)^{q-1}}} \exp \left[ -\frac{N}{2} \vec{x}_{\alpha}^2 + \sqrt{2\beta\rho_0 + (q-2)(\beta J)^2} \vec{x}_{\alpha} \cdot \sum_i \vec{e}_{i\alpha}^n + \beta \vec{H} \cdot \sum_i \vec{e}_{i\alpha}^n \right] \right\} \cdot \int \prod_{(\alpha\beta)} \left\{ \frac{d\vec{y}_{\alpha\beta}}{(2\pi/N)^{q-1}} \exp \left[ -\frac{N}{2} \vec{y}_{\alpha\beta}^2 + \beta J \sum_i \vec{y}_{\alpha\beta} \cdot \vec{D}_{i\alpha i\beta}^{nn} \right] \right\} \quad (\text{V-37})$$

Realizando o traço sobre os sítios e usando (II-9)

$$[Z^n] = \int \left( \prod_{\alpha} \frac{d\vec{x}_{\alpha}}{(2\pi/N)^{q-1/2}} \right) \left( \prod_{(\alpha\beta)} \frac{d\vec{y}_{\alpha\beta}}{(2\pi/N)^{q-1}} \right) \exp N \left\{ -\frac{1}{2} \left[ \sum_{\alpha} \vec{x}_{\alpha}^2 + \sum_{(\alpha\beta)} \vec{y}_{\alpha\beta}^2 \right] + \ln \text{Tr} \exp \left[ \sqrt{2\beta\rho_0 + (q-2)(\beta J)^2} \sum_{\alpha} \vec{x}_{\alpha} \cdot \vec{e}_{\alpha}^n + \beta \vec{H} \cdot \sum_{\alpha} \vec{e}_{\alpha}^n + \beta J \sum_{(\alpha\beta)} \vec{y}_{\alpha\beta} \cdot \vec{D}_{\alpha\beta}^{nn} \right] \right\} \quad (\text{V-38})$$

Resolvemos a integral pelo método do ponto de sela, com os máximos

$$\left\{ \begin{aligned} \vec{x}_{\alpha}^{\text{máx}} &= \sqrt{2\beta\gamma_0 + (q-2)(\beta\gamma)^2} \vec{M}_{\alpha}; & \vec{M}_{\alpha} &\equiv \frac{\text{Tr} \vec{e}_{\alpha}^{\mu} e^{-\beta A}}{\text{Tr} e^{-\beta A}} \\ \vec{y}_{\alpha\beta}^{\text{máx}} &= \beta\gamma \overleftrightarrow{Q}_{\alpha\beta}; & \overleftrightarrow{Q}_{\alpha\beta} &\equiv \frac{\text{Tr} \overleftrightarrow{D}_{\alpha\beta}^{\mu\nu} e^{-\beta A}}{\text{Tr} e^{-\beta A}} \end{aligned} \right. \quad (\text{V-39})$$

para o Hamiltoniano efetivo

$$A \equiv [2\beta\gamma_0 + (q-2)\beta\gamma^2] \sum_{\alpha} \vec{M}_{\alpha} \cdot \vec{e}_{\alpha}^{\mu} + \vec{H} \cdot \sum_{\alpha} \vec{e}_{\alpha}^{\mu} + \beta\frac{\gamma^2}{2} \sum_{(\alpha\beta)} \overleftrightarrow{Q}_{\alpha\beta} \times \overleftrightarrow{D}_{\alpha\beta}^{\mu\nu} \quad (\text{V-40})$$

Aqui definimos os parâmetros de ordem de magnetização  $\vec{M}_{\alpha}$  e de spin-glass  $\overleftrightarrow{Q}_{\alpha\beta}$ .

Então (V-9) fica, expandindo a exponencial em (V-38) para  $n \rightarrow 0$ :

$$\begin{aligned} n\beta f &= \beta [2\gamma_0 + (q-2)\beta\frac{\gamma^2}{2}] \sum_{\alpha} \vec{M}_{\alpha}^2 + \frac{(\beta\gamma)^2}{2} \sum_{(\alpha\beta)} \overleftrightarrow{Q}_{\alpha\beta}^2 - \\ \ln \text{Tr} \exp &\left\{ \beta\gamma^2 \sum_{(\alpha\beta)} \overleftrightarrow{Q}_{\alpha\beta} \times \overleftrightarrow{D}_{\alpha\beta}^{\mu\nu} + \beta\vec{H} \cdot \sum_{\alpha} \vec{e}_{\alpha}^{\mu} + \right. \\ &\left. 2\beta [2\gamma_0 + (q-2)\beta\frac{\gamma^2}{2}] \sum_{\alpha} \vec{M}_{\alpha} \cdot \vec{e}_{\alpha}^{\mu} \right\} \end{aligned} \quad (\text{V-41})$$

como na literatura.

Em termos dos novos campos:

$$\left\{ \begin{array}{l} Q_{\mu\nu}^{\alpha\beta} \equiv \vec{D}_{\alpha\beta}^{\mu\nu} \times \vec{Q}_{\alpha\beta} \\ M_{\mu}^{\alpha} \equiv \vec{M}_{\alpha} \cdot \vec{e}_{\mu}^{\alpha} \end{array} \right. \quad (\text{V-42})$$

para a energia livre vem

$$\begin{aligned} n\beta f(n) &= \frac{1}{2} \left(\frac{\beta J}{q}\right)^2 \sum_{(\alpha\beta)} \sum_{\mu\nu}^q (Q_{\mu\nu}^{\alpha\beta})^2 + \\ &\frac{\beta}{q} \left[2_0 + (q-2)\beta \frac{J^2}{2}\right] \sum_{\alpha} \sum_{\mu}^q (M_{\mu}^{\alpha})^2 - \\ \ln T_{\gamma} \exp &\left\{ (\beta J)^2 \sum_{(\alpha\beta)} Q_{\mu\nu}^{\alpha\beta} + \beta H \sum_{\alpha} I_{\mu}^{\alpha\alpha} + \right. \\ &\left. 2\beta \left[2_0 + (q-2)\beta \frac{J^2}{2}\right] \sum_{\alpha} M_{\mu}^{\alpha} \right\} \end{aligned} \quad (\text{V-43})$$

Nas fases não ferromagnéticas a solução canônica é

$$\left\{ \begin{array}{l} M_{\mu}^{\alpha} = 0 \\ Q_{\mu\nu}^{\alpha\beta} = Q^{\alpha\beta} I_{\mu\nu} \end{array} \right. \quad (\text{V-44})$$

Daí, a expansão de Landau para a energia livre em campo externo nulo dá

$$\begin{aligned} n\beta f(\{Q^{\alpha\beta}\}) &= \\ &\frac{1}{2} \left(\frac{\beta J}{q}\right)^2 \sum_{(\alpha\beta)} (Q^{\alpha\beta})^2 \sum_{\mu\nu} \left[ (q-2) I_{\mu\nu} + (q-1) \right] - \ln \left\{ \frac{T_{\gamma}}{\mu^4} \exp \left[ (\beta J)^2 \sum_{(\alpha\beta)} Q^{\alpha\beta} I_{\mu\nu} \right] \right\} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{(q-1)}{2} (\beta\gamma)^2 \sum_{(\alpha\beta)} (Q^{\alpha\beta})^2 - \ln \left\{ \sum_{\mu,\nu} \exp \left[ (\beta\gamma)^2 \sum_{(\alpha\beta)} Q^{\alpha\beta} (q d_{\mu,\nu} - 1) \right] \right\} = \\
&\frac{(q-1)}{2} (\beta\gamma)^2 \sum_{(\alpha\beta)} (Q^{\alpha\beta})^2 - \ln \left\{ q e^{\frac{(\beta\gamma)^2 \sum_{(\alpha\beta)} Q^{\alpha\beta} (q-1)}{2}} + q(q-1) e^{-\frac{(\beta\gamma)^2 \sum_{(\alpha\beta)} Q^{\alpha\beta}}{2}} \right\} \\
&= \\
&(q-1) \frac{(\beta\gamma)^2}{2} \sum_{(\alpha\beta)} (Q^{\alpha\beta})^2 - \ln q - \\
&\ln \left\{ e^{\frac{q(\beta\gamma)^2 \sum_{(\alpha\beta)} Q^{\alpha\beta}}{2} + (q-1)} \right\} \tag{V-45}
\end{aligned}$$

A expansão do logaritmo dá:

$$\begin{aligned}
\ln \left\{ 1 + \frac{1}{q} \left( \sum_{n=1}^{\infty} \frac{a^n}{n!} \right) \right\} &= \frac{a}{q} + \\
\frac{(q-1)}{2} \frac{a^2}{q^2} + (q-1) \frac{(q-2)}{6} \frac{a^3}{q^3} + o(a^4) &\tag{V-46}
\end{aligned}$$

Dai

$$\begin{aligned}
n \beta f &= \frac{1}{2} (\beta\gamma)^2 (q-1) \sum_{(\alpha\beta)} (Q^{\alpha\beta})^2 [1 - (\beta\gamma)^2] \\
&- (\beta\gamma)^6 \left\{ \frac{1}{6q} (q-1)(q-2) \sum_{(\alpha\beta)} (Q^{\alpha\beta})^3 + \right. \\
&\left. (q-1) \sum_{(\alpha\beta\gamma)} Q^{\alpha\beta} Q^{\beta\gamma} Q^{\gamma\alpha} \right\} + o(Q^4) \tag{V-47}
\end{aligned}$$



Assumindo simetria de réplicas ( $Q^{\alpha\beta} = Q$ )

$$\begin{aligned}
 -\beta f(q) &= \frac{1}{4} (\beta J)^2 (q-1) Q^2 [1 - (\beta J)^2] \\
 &+ \frac{(\beta J)^6}{12} (q-1)(6-q) Q^3 + O(Q^4)
 \end{aligned}
 \tag{V-48}$$

e a condição de minimização produz<sup>23</sup>

$$Q = \frac{2}{(q-6)} \frac{1}{(\beta J)^2} \left[ \frac{1}{(\beta J)^2} - 1 \right]
 \tag{V-49}$$

o que dá uma transição contínua para  $q < 6$  à temperatura crítica  $\beta_c J = 1$  e de primeira ordem para  $q > 6$ .

A dependência na distribuição de probabilidade não é essencial: basta reescalarmos as variáveis de modo apropriado. A solução deste último método, com simetria de réplicas, no entanto, não está correta, por apresentar instabilidade na fase ferromagnética, como foi demonstrado na literatura.<sup>32</sup>

## CONCLUSOES

Neste trabalho obtivemos algumas conclusões interessantes, que podemos agrupar nos seguintes pontos:

(i) No segundo capítulo encontramos a generalização de um conhecido resultado em teoria de campo médio para o modelo de Potts com aleatoriedades.

(ii) Encontramos a dependência da transição de fase do modelo de Potts em impurezas e campo externo; o ponto crítico foi analisado, observando-se que a transição se torna mais descontínua com o aumento da dispersão do campo e do número de estados, bem como com a diminuição da temperatura e do campo uniforme. Estes resultados constam do terceiro capítulo.

(iii) Demonstramos, no quarto capítulo, a rigorosidade dos métodos utilizados normalmente para cálculo da média configuracional da energia livre dos modelos aleatórios. Uma justificativa da teoria do campo médio, baseada na hipótese da ergodicidade foi apresentada.

(iv) A solução simétrica do método de réplicas mostrou-se correta para o modelo de campo aleatório, e numa nova versão ainda para o vidro de spin.

Algumas análises a serem realizadas neste modelo são a dependência do diagrama de fases quanto à distribuição de probabilidades; o ponto tricrítico que aparece na fase com magnetização transversal ao campo não nula; e sua aplicação, relativamente recente, ao problema interdisciplinar de redes de neurônios.

APENDICES

(1) Cálculo dos parâmetros de ordem

Vamos demonstrar aqui as equações (IV-32). Temos

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{q d_{n,i-1}}{(q-1)} \right\rangle &= \\ \frac{e^{\frac{t+t_0 h (q d_{n,i-1})}{(q-1)}} + \sum_{\mu \neq 1}^q \frac{-1}{(q-1)} e^{-\frac{t}{(q-1)} + t_0 h \frac{(q d_{n,i-1})}{(q-1)}}}{e^{\frac{t+t_0 h (q d_{n,i-1})}{(q-1)}} + \sum_{\mu \neq 1}^q e^{-\frac{t}{(q-1)} + t_0 h \frac{(q d_{n,i-1})}{(q-1)}}} \end{aligned} \quad (2-a)$$

então

$$\begin{aligned} m &= \left[ \left\langle \frac{q d_{n,i-1}}{(q-1)} \right\rangle \right] = \frac{1}{q} \sum_{\eta} \left\langle \frac{q d_{n,i-1}}{(q-1)} \right\rangle = \\ \frac{1}{q} &\left[ \frac{e^{\frac{t+t_0 h}{(q-1)}} - e^{-\frac{(t+t_0 h)}{(q-1)}}}{e^{\frac{t+t_0 h}{(q-1)}} + (q-1) e^{-\frac{(t+t_0 h)}{(q-1)}}} \right] + \\ (q-1) &\left[ \frac{e^{\frac{t-t_0 h}{(q-1)}} - \frac{-1}{(q-1)} e^{-\frac{t}{(q-1)} + t_0 h} - \frac{(q-2)}{(q-1)} e^{-\frac{(t+t_0 h)}{(q-1)}}}{e^{\frac{t-t_0 h}{(q-1)}} + e^{-\frac{t}{(q-1)} + t_0 h} + (q-2) e^{-\frac{(t+t_0 h)}{(q-1)}}} \right] \end{aligned} \quad (2-b)$$

Agora:

$$\left\{ \begin{aligned} t &= \beta(\Sigma_m + H) \equiv (q-1)(K_m + Z)/q \\ t_{oh} &= \beta_h \equiv (q-1)Y/q \end{aligned} \right.$$

então, reagrupando, vem:

$$\begin{aligned} q_m &= \frac{e^{K_m + Z + Y} - 1}{e^{K_m + Z + Y} + (q-1)} + \frac{q e^{K_m + Z} [e^{K_m + Z} + e^Y + q - 2]}{e^{K_m + Z} + e^Y + (q-2)} \\ &= \frac{e^{K_m + Z + Y} - 1}{e^{K_m + Z + Y} + q - 1} - 1 + \frac{q e^{K_m + Z}}{e^{K_m + Z} + e^Y + q - 2} \\ &= \frac{e^{K_m + Z + Y} - 1 - [e^{K_m + Z + Y} + (q-1)]}{e^{K_m + Z + Y} + (q-1)} + \frac{q e^{K_m + Z}}{e^{K_m + Z} + e^Y + q - 2} \\ &= \frac{q e^{K_m + Z}}{e^{K_m + Z} + e^Y + q - 2} - \frac{q}{e^{K_m + Z + Y} + q - 1} \quad (2-c) \end{aligned}$$

O segundo parâmetro vamos obter diretamente da derivação de

$$\begin{aligned} C(t^m): & \quad e^{t+t_{oh}} - e^{\frac{-(t+t_{oh})}{(q-1)}} \\ q \frac{m_0}{h} &= \frac{e^{t+t_{oh}} - e^{\frac{-(t+t_{oh})}{(q-1)}}}{e^{t+t_{oh}} + (q-1)e^{\frac{-(t+t_{oh})}{(q-1)}}} + \\ (q-1) & \frac{\frac{-1}{(q-1)} e^{\frac{t-t_{oh}}{(q-1)}} + e^{\frac{-t}{(q-1)} + t_{oh}} - \frac{(q-2)}{(q-1)} e^{\frac{-(t+t_{oh})}{(q-1)}}}{e^{\frac{t-t_{oh}}{(q-1)}} + e^{\frac{-t}{(q-1)} + t_{oh}} + (q-2)e^{\frac{-(t+t_{oh})}{(q-1)}}}} \quad (2-d) \end{aligned}$$

dai

$$q \frac{m_0}{h} = \frac{e^{K_m + Z + Y} - 1}{e^{K_m + Z + Y} + q - 1} + \frac{e^{K_m + Z} + (q-1)e^Y - (q-2)}{e^{K_m + Z} + e^Y + (q-2)} \quad (2-e)$$

No caso  $q=2$  segue

$$\begin{cases} 2m = tgh \beta (J_m + H + h) + tgh \beta (J_m + H - h) \\ 2 \frac{m_0}{h} = tgh \beta (J_m + H + h) - tgh \beta (J_m + H - h) \end{cases} \quad (2-f)$$

Expandindo em série de potências da magnetização, temos, para  $H=0$

$$\begin{aligned} \frac{m_0}{h} = & tgh \beta h - \left( \frac{tgh \beta h}{1 - tgh^2 \beta h} \right) m^2 + \left( \frac{tgh \beta h}{1 - tgh^2 \beta h} \right)^3 m^4 \\ & - 2 \left( \frac{tgh \beta h}{1 - tgh^2 \beta h} \right)^5 m^6 + O(m^8) \end{aligned} \quad (2-g)$$

Agora, se de (2-b) e (2-d) resolvermos  $t$  e  $t_0 h$  em função de  $m$  e  $\frac{m_0}{h}$ , para  $q=2$  obtemos:

$$\left\{ \begin{aligned} t &= \frac{1}{4} \ln \left[ \frac{(1+m+\frac{m_0}{h})}{(1-m-\frac{m_0}{h})} \frac{(1+m-\frac{m_0}{h})}{(1-m+\frac{m_0}{h})} \right] \\ t_0 h &= \frac{1}{4} \ln \left[ \frac{(1+m+\frac{m_0}{h})}{(1-m-\frac{m_0}{h})} \frac{(1-m+\frac{m_0}{h})}{(1+m-\frac{m_0}{h})} \right] \end{aligned} \right. \quad (2-h)$$

donde a energia livre fica:

$$\begin{aligned} -\beta \mathcal{F}(\beta) &= \\ \beta \left( \frac{3}{2} m^2 + H m + \mu_0 \right) + C^*(\vec{m}) & \quad (2-i) \end{aligned}$$

com

$$\begin{aligned} C^*(\vec{m}) &= \ln 2 - \\ \frac{1}{4} \ln \left\{ \left[ 1 - \left( m + \frac{m_0}{h} \right)^2 \right] \left[ 1 - \left( m - \frac{m_0}{h} \right)^2 \right] \right\} - \\ \frac{m}{4} \ln \left[ \frac{(1+m)^2 - \left( \frac{m_0}{h} \right)^2}{(1-m)^2 - \left( \frac{m_0}{h} \right)^2} \right] - \frac{m_0}{4h} \ln \left[ \frac{\left( 1 + \frac{m_0}{h} \right)^2 - m^2}{\left( 1 - \frac{m_0}{h} \right)^2 - m^2} \right] & \quad (2-j) \end{aligned}$$

Colocando (2-g) em (2-i) e expandindo, vem

$$\mathcal{F} = A + B m^2 + C m^4 + O(m^6) \quad (2-h)$$

onde os coeficientes são

$$\left\{ \begin{array}{l} A = -\frac{1}{\beta} \ln 2 - \frac{1}{\beta} \ln \cosh \beta h \\ B = -\frac{J}{2} + \frac{1}{2\beta} \cosh^2 \beta h \\ C = \frac{1}{12\beta} \cosh^6 \beta h [1 - 3 \operatorname{tg}^2 \beta h] \end{array} \right. \quad (2-1)$$

ou, se expandirmos a primeira equação em (2-f) para m:

$$\begin{aligned} m = & \cosh^{-2} \beta h (\beta J m) - \left( \frac{\cosh^2 \beta h - 3 \operatorname{senh}^2 \beta h}{3 \cosh^4 \beta h} \right) (\beta J m)^3 \\ & + O(m^5) \end{aligned} \quad (2-m)$$

e colocarmos em (2-k) os novos coeficientes serão

$$\left\{ \begin{array}{l} A = -\frac{1}{\beta} \ln \cosh \beta h \\ B = -\beta \frac{J^2}{2} \cosh^{-2} \beta h + \frac{J}{2} \equiv \frac{J}{2T} (T - T_c); \\ \quad T_c = \frac{J}{k_B} \cosh^{-2} \beta h \\ C = \frac{\beta^3 J^4}{12} \cosh^{-2} \beta h [1 - 3 \operatorname{tg}^2 \beta h] \end{array} \right. \quad (2-n)$$

que dão as mesmas expressões que as de (2-1) para:

$$B = 0, C = 0.$$



A ambiguidade segue do fato que a energia livre está sujeita a condição de maximização, o que implica em encontrarmos o ponto fixo em  $(2-m)$ . Podemos recorrer  $n$ -vezes, mas a energia só terá seus coeficientes alterados por um fator; apenas no ponto fixo obteremos uma independência na magnetização, desaparecendo a ambiguidade.

(2) Programa numérico para o capítulo (III-C)

```
C
C   MAIN PROGRAM.
C
DOUBLE PRECISION HX,HXI,HXF,HY,HYT,HYF,HZ,INC
DOUBLE PRECISION FMIN(100),XMIN(100),MI,MF,IVM
DOUBLE PRECISION HHX,HHY,HHZ,QQQ
INTEGER I,J,K
OPEN(UNIT=4,FILE="DAVID.DAT41",FORM="UNFORMATTED")
READ(4)HXI,HXF,HYI,HYF,HZ,INC,QQQ
CLOSE(UNIT=4)
OPEN(UNIT=3,FILE="DAVID.OUTPUT1")
WRITE(3,100)HXI,HXF,HYI,HYF,HZ,INC,QQQ
100  FORMAT(1X,"XI:XF:YI:YF:Z:INCREMENTO:","4X,(F8.4,4X),//")
MI=-0.02D+00
MF=1.02D+00
IVM=0.0001D+00
DO 50 HX=HXI,HXF,INC
DO 40 HY=HYI,HYF,INC
HHX=HX
HHY=HY
HHZ=HZ
CALL MINIMO(MI,MF,IVM,XMIN,FMIN,J,HHX,HHY,HHZ,QQQ)
110  WRITE(3,110)HX,HY,HZ
FORMAT(1X,"X=",F10.5," Y=",F10.5," Z=",F10.5,/)
IF(J.EQ.0)GO TO 40
WRITE(3,120)
120  FORMAT(1X,9X,"X",9X,"!",9X,"F")
DO 10 I=1,J
WRITE(3,130)XMIN(I),FMIN(I)
130  FORMAT(1X,4X,F11.6,4X,"!",4X,F21.10)
10   CONTINUE
WRITE(3,150)
150  FORMAT(1X,/,1X,39("----"),/)
40   CONTINUE
50   CONTINUE
STOP
END
SUBROUTINE MINIMO(INICIAL,FINAL,INC1,XMIN,FMIN,J,HX,HY,HZ,QQQ)

C
C   SUBROTINA MINIMO.
C
C   OBJETIVO:
C   DETERMINAR OS PONTOS DE MINIMO DE UMA FUNCAO
C   DADA NO INTERVALO ESPECIFICADO.
C
C   PARAMETROS DE ENTRADA:
C   INICIAL - PONTO INICIAL DO INTERVALO [ DOUBLE P. ].
C   FINAL - PONTO FINAL DO INTERVALO [ DOUBLE P. ].
C   INC1 - TAMANHO DO PASSO [ DOUBLE P. ].
C
C   PARAMETROS DE SAIDA:
C   XMIN - VETOR DE 100 POSICOES CONTENDO AS ASCISSAS
C   DOS PONTOS DE MINIMO [ DOUBLE P. ].
C   FMIN - VETOR DE 100 POSICOES CONTENDO OS VALORES MI-
C   NIMOS DA FUNCAO [ DOUBLE P. ].
C   J - NUMERO DE PONTOS DE MINIMO DA FUNCAO [ INTEGER ].
C
C   METODO USADO:
C   LUSO.
C
DOUBLE PRECISION INICIAL,FINAL,INC1,INC2,XMIN,FMIN,HX,HY,HZ
DOUBLE PRECISION M1,M2,V1,V2,FLAG1,FLAG2,INT1,INT2,VAL,X,QQQ
INTEGER I,J,K
```

```

DIMENSION FMIN(100),XMIN(100),VAL(22),X(22)
J=0
M1=INICIAL
M2=INICIAL+INC1
INC2=INC1/10.
V1=FUNCAO(M1,HX,HY,HZ,QQQ)
V2=FUNCAO(M2,HX,HY,HZ,QQQ)
FLAG2=(V2-V1)/DABS(V2-V1)
10 FLAG1=FLAG2
M1=M2
M2=M2+INC1
IF(M1.GE.FINAL)GO TO 40
V1=FUNCAO(M1,HX,HY,HZ,QQQ)
V2=FUNCAO(M2,HX,HY,HZ,QQQ)
FLAG2=(V2-V1)/DABS(V2-V1)
IF((FLAG1*FLAG2).EQ.(1.))GO TO 10
C -----> A LINHA ABaixo SELECIONA SOENTE MINIMOS.
C IF((FLAG1.EQ.1.).AND.(FLAG2.EQ.-1.))GO TO 10
INT1=M1-INC1
INT2=M2
VAL(1)=FUNCAO(INT1,HX,HY,HZ,QQQ)
X(1)=INT1
DO 20 I=2,21
X(I)=INT1+(I-1)*INC2
VAL(I)=FUNCAO(X(I),HX,HY,HZ,QQQ)
IF(VAL(I).LE.VAL(I-1))GO TO 20
K=I-1
GO TO 30
20 CONTINUE
30 J=J+1
XMIN(J)=X(K)
FMIN(J)=VAL(K)
GO TO 10
40 RETURN
END

C
C FUNCAO -----
C
DOUBLE PRECISION FUNCTION FUNCAO(M,X,Y,Z,QQQ)
DOUBLE PRECISION M,X,Y,Z,T,T1,T2,T3,QQQ
T=DLOG(QQQ)
T1=((QQQ-1)/2)*M**2*(M+Z+Y)/X
T2=DLOG(QQQ**((M+Y+Z)/X)+(QQQ-1))/T
T3=(QQQ-1)*DLOG(QQQ**((M+Z)/X)+QQQ**((Y/X)+(QQQ-2)))/T
FUNCAO=T1-T2-T3
RETURN
END

```

## REFERENCIAS

- 1- IMRY, Y.; MA, S-K. Random-Field Instability of the Ordered State of Continuous Symmetry. Phys. Rev. Lett., 35(21):1399-401, New York, Nov. 1975.
- 2- AHARONY, A. Tricritical points in systems with random fields. Phys. Rev. B, 18(7):3318-27, Oct. 1978.
- 3- EDWARDS, S. F; ANDERSON, P. W. Theory of spin glasses. J. Phys. E, 5:965-74, London, May. 1975.
- 4- HORNREICH, R. M.; SCHUSTER, H. G. Thermodynamic properties of the random-field spherical model. Phys. Rev. B, 26(5): 3929-39, New York, Set. 1982.
- 5- GOLDSCHMIDT, Y. Y.; AHARONY, A. First-order transitions in anisotropic magnets with random fields and random uniaxial anisotropies. Phys. Rev. B, 32(1):264-76, New York, Jul.1985.
- 6- HORNER, H. Dynamics of Spin Glasses and Related Models of Neural Network. A ser publicado.
- 7- STANLEY, H. E. Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena, Oxford, cap. 6, 1971.
- 8- POTTS, R. B. Some Generalized Order-Disorder Transformations. Proc. Camb. Philos. Soc., 48(1): 106-9, London, 1952.
- 9- WU, F. Y. The Potts model. Rev. Mod. Phys., 54(1):235-68, New York, Jan. 1982.
- 10- NISHIMORI, H.; STEPHEN, M. J. Gauge-invariant frustrated Potts spin-glass. Phys. Rev. B, 27(9):5644-52, New York, May 1983.

- 11- EMERY, V. J. Critical Properties of many-component systems. Phys. Rev. B, 11(1):239-47, New York, Jan. 1975.
- 12- VAN HEMMEN, J. L.; PALMER, R. G. The replica method and a solvable spin glass model. J. Phys. A, 12(4): 563-80, London, 1979.
- 13- THEUMANN, W. K.; FONTANARI, J. F. The Spherical-Model Limit in a Random-Field. J. Stat. Phys., 45(1/2): 99-112, Bélgica, Oct. 1986.
- 14- NISHIMORI, H. Potts model in random fields. Phys. Rev. B, 28(7):4011-15, New York, Oct. 1983.
- 15- BLANKSCHTEIN, D.; SHAPIR, Y.; AHARONY, A. Potts model in random fields. Phys. Rev. B, 29(3):1263-7, New York, Feb. 1984.
- 16- GOLNER, G. R. Investigation of the Potts Model Using Renormalization-Group Techniques. Phys. Rev. B, 8(7): 3419-22, New York, Oct 1973.
- 17- PYTTE, E. Renormalization-Group calculation of first- and second-order phase transitions in the Potts model. Phys. Rev. B, 22(9):4450-61, New York, Nov. 1980.
- 18- THEUMANN, W. K; FONTANARI, J. F. Em andamento.
- 19- LANDAU, L. D.; LIFCHITZ, E. Physique Statistique, Moscou, cap. 14, 1976.
- 20- ANDELMAN, D. First- and second-order phase transitions with random fields at low temperatures. Phys. Rev. B, 27(5):3079-80, New York, Mar. 1983.
- 21- KAUFMAN, M.; KLUNZINGER, P. E.; KHURAMA, A. Multicritical points in an Ising random-field model. Phys. Rev. B, 34(7): 4766-70, New York, Oct. 1986.

- 22- PROVOST, J. P.; WALLE, G. Ergodicity of the coupling constant and the symmetric n-replicas trick for a class of mean-field spin-glass model. Phys. Rev. Lett., 50(8):598-600, New York, Feb. 1983.
- 23- ELDERFIELD, D.; SHERRINGTON, D. The curious case of the Potts spin glass. J. Phys. C, 16:1497-503, London, 1983.
- 24- BOGOLUBOV JR, N. N.; ERMILOV, A. N.; KURBATOV, A. M.; PRONIN, P. M. Free energy and ordering in random quenched Potts model. Physica, 133A:425-41, Amsterdam, 1985.
- 25- SCHNEIDER, T.; PYTTE, E. Random-field instability of the ferromagnetic state. Phys. Rev. B, 15(3):1519-22, New York, Feb. 1977
- 26- BLANKSCHTEIN, D.; AHARONY, A. Effects of symmetry-breaking perturbations on the three-state Potts model. J. Phys. C, 13:4635-48, London, 1980.
- 27- VAN HEMMEN, J. L. Classical spin-glass model. Phys. Rev. Lett., 49(6):409-12, New York, Aug. 1982.
- 28- SALINAS, S. R.; W. F. WRESZINSKI. On the Mean-Field Ising Model in a Random External Field. J. Stat. Phys., 41(1/2):299-313, Bélgica, Oct. 1985.
- 29- VAN HEMMEN, J. L.; ZAGREBNOV, V. A. Storing extensively many weighted pattern in a saturated neural network. J. Phys. A, 20: 3989-99, London, 1987.
- 30- SHERRINGTON, D.; KIRKPATRICK, S. Solvable Model of a Spin-Glass. Phys. Rev. Lett., 35(26):1792-95, New York, Dec. 1975.
- 31- THOULESS, D. J.; ANDERSON, P. W.; PALMER, R. G. Solution of 'Solvable Model of a spin glass'. Philos. Magaz., 35(3):593-601, London, 1977.

- 32- ALMEIDA, J. R. L.; THOULESS, D. J. Stability of the Sherrington-Kirkpatrick solution of a spin glass model. J. Phys. A. 11(5):983-90, London, 1978.
- 33- KIRKPATRICK, S.; SHERRINGTON, D. Infinite-ranged models of spin-glasses. Phys. Rev. B. 17(11):4384-403, New York, Jun. 1978.
- 34- SHERRINGTON, D. Potts and Related Glasses. Progr. Theor. Phys. Suppl. 87:180-90, New York, 1986.
- 35- ABRAMOWITZ, M.; STEGUN, I. A. Handbook of Mathematical functions, pag 10. Washington, 1966.
- 36- IMRY, Y. Random External Fields. J. Stat. Phys. 34(5/6): 849-61, Belgica, 1984.

## ABSTRACT

In this work we study the thermodynamic properties of magnetic systems with impurities, which are representable as a random field or a spin glass in the Potts model. We obtain several new results, both formal and explicit.

We find the necessary requirements for the existence of a critical point in the phase diagram for the random fields problem, involving temperature, external field and impurities. We also find particular numerical and analytical solutions, with special interest on the  $q=3$  states.

Parallely we establish correlations between the various rigorous methods of calculation for the Potts model with randomness. We study the mean field theory, generalizing some well-known results. We justify this theory by applying the van Hemmen's method on the random fields and spin glass problems. Finally we establish the correction for the replicas trick in the Potts model.