

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL  
INSTITUTO DE FÍSICA  
Programa de Pós-Graduação em Física

# Modelo de Blume-Capel na rede aleatória

Amanda de Azevedo Lopes

Porto Alegre  
2016

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL  
INSTITUTO DE FÍSICA  
Programa de Pós-Graduação em Física

# Modelo de Blume-Capel na rede aleatória \*

Amanda de Azevedo Lopes

Dissertação realizada sob orientação do Prof. Rubem Erichsen Jr. e apresentada ao Instituto de Física da UFRGS em preenchimento parcial dos requisitos para a obtenção do título de Mestre em Física.

**Porto Alegre**  
**2016**

\* Trabalho financiado pela agência CAPES.

## Agradecimentos

Ao Prof. Rubem pela dedicação na orientação deste trabalho;

Aos meus amigos Sabrina, Vinícius, Nicole, Lucas, Rafael, Marion, Stock, Rui por todas as conversas e, principalmente, pelos momentos de descontração;

Ao Demétrius, pela amizade, risadas e discussões intermináveis;

À Mariana, pela amizade, compreensão, paciência e conversas durante todos esses anos;

Ao Daniel, pelo apoio, paciência e carinho em todos os momentos;

À minha família, pela paciência e apoio, principalmente nos momentos mais difíceis.

---

## Resumo

O presente trabalho estuda o modelo de Blume-Capel na rede aleatória e também analisa a inclusão de um termo de campo cristalino aleatório e de um termo de campo local aleatório. Ao resolver o modelo na rede aleatória, uma técnica de conectividade finita foi utilizada, na qual cada spin é conectado a um número finito de outros spins. Os spins foram conectados de acordo com uma distribuição de Poisson, os termos de campo aleatório seguiram uma distribuição bimodal e as interações entre os spins foram consideradas uniformes. Desse modo, só há desordem nas conexões entre os spins. O foco desse trabalho foi determinar como a natureza da transição de fase é alterada com a conectividade e se há um comportamento reentrante das linhas de transição de fase. A técnica de réplicas é usada para obter equações de ponto de sela para a distribuição de campos locais. Um *Ansatz* de simetria de réplicas foi utilizado para a função de ordem e esse foi escrito em termos de uma distribuição bidimensional de campos efetivos, onde uma das componentes é associada com um termo linear dos spins e a outra com o termo de campo cristalino. Com isso, equações para as funções de ordem e a energia livre podem ser obtidas. Uma técnica de dinâmica populacional é usada para resolver numericamente a equação auto-consistente para a distribuição de campos locais e outros parâmetros, como a magnetização, a atividade da rede e a energia livre. Os resultados indicam que a natureza da transição ferromagnética-paramagnética, a posição do ponto tricrítico e a existência de reentrância dependem fortemente do valor da conectividade e, nos casos com um termo de campo aleatório, dependem da intensidade dos campos aleatórios. No caso em que o campo cristalino é aleatório, o ponto tricrítico é suprimido para valores acima de um certo valor de aleatoriedade.

**Palavras-chave:** modelo de Blume-Capel, rede aleatória, conectividade finita, campo aleatório

## Abstract

The present work studies the Blume-Capel model in a random network and also analyses the inclusion of a random crystal-field term and a random field term. To solve the model in a random network a finite connectivity technique is used, in which each spin is connected to a finite number of other spins. The spins were connected according a Poisson distribution, the random field terms followed a bimodal distribution and the bonds between the spins were considered uniform. Thus, there is only a connection disorder. The focus of this work was on determining how the nature of the phase transition changes with the connectivity and the random fields and if there is a reentrant behavior of the phase boundaries. The replica technique is used to obtain saddle-point equations for the effective local-field distribution. The replica symmetric Ansatz for the order function is written in terms of a two-dimensional effective-field distribution, where one of the components is associated with a linear form in the spins and the other with the crystal-field term. This allows one to derive equations for the order function and for the free-energy. A population dynamics procedure is used to solve numerically a self-consistency equation for the distribution of the local field and with it some physical parameters, like magnetization and free-energy. The results obtained indicate that the nature of the F-P transition, the location of the tricritical point and the presence of a reentrant phase depend strongly on the connectivity. In the cases with a random field term, those are also dependent on the intensity of the fields. For the case with a random crystal-field term, the tricritical point is suppressed above a certain value of randomness.

**Keywords:** Blume-Capel model, random network, finite connectivity, random field

## Sumário

<b>1</b>	<b>Introdução</b>	<b>2</b>
<b>2</b>	<b>Sistemas magnéticos desordenados</b>	<b>5</b>
2.1	Conceitos fundamentais . . . . .	5
2.1.1	Modelo de Ising . . . . .	6
2.1.2	Modelo de Blume-Capel . . . . .	7
2.1.3	Transições inversas . . . . .	8
2.2	Descrição experimental e teórica de vidros de spin . . . . .	10
2.3	Conceitos teóricos gerais e modelos . . . . .	13
2.3.1	Parâmetro de ordem, quebra de simetria e ergodicidade . . . . .	13
2.4	Método das réplicas . . . . .	16
<b>3</b>	<b>Modelo de Blume-Capel na rede aleatória</b>	<b>19</b>
3.1	O modelo . . . . .	20
3.2	Cálculo da energia livre . . . . .	28
<b>4</b>	<b>Resultados</b>	<b>33</b>
4.1	Solução da equação de ponto de sela . . . . .	33
4.2	Rede aleatória . . . . .	35
4.3	Campo cristalino aleatório . . . . .	41
4.4	Campo local aleatório . . . . .	48
<b>5</b>	<b>Conclusões</b>	<b>53</b>

# 1 Introdução

Sistemas magnéticos desordenados são conhecidos há bastante tempo e são de grande interesse em física da matéria condensada. Propriedades incomuns em ligas metálicas foram observadas experimentalmente pela primeira vez na década de 70. Estas observações estimularam o interesse teórico para esse tipo de sistemas que, desde então, são estudados teórica e experimentalmente. Apesar dos muitos esforços utilizados para o estudo destes sistemas, muitos efeitos da desordem ainda não são completamente compreendidos [1]. Um exemplo de comportamento magnético que ocorre em sistemas desordenados que ainda não é totalmente compreendido é o estado de vidro de spin (VS). A fase VS apresenta um comportamento muito diferente das fases convencionais ferromagnéticas (F) e antiferromagnéticas (AF).

O nome de *spin glass*, ou vidro de spin, foi dado para o estado de uma classe de ligas magnéticas, por exemplo as ligas CuMn e AuFe. Essa fase recebeu esse nome pelo comportamento desses materiais, que devido à desordem, possuem as interações entre os spins alternando aleatoriamente entre F ou AF [2]. Com a competição entre as interações, nenhuma ordem magnética convencional (F ou AF) é estabelecida e o sistema torna-se frustrado, de modo que o estado fundamental é degenerado [3].

As observações dessa nova fase motivaram o interesse dos teóricos, que propuseram vários modelos para o melhor entendimento desses sistemas. Um dos primeiros modelos propostos foi o de Edwards e Anderson [4] em 1975, no qual um parâmetro de ordem de vidro de spin é introduzido. Este modelo considera interações de troca desordenadas e dependentes da distância entre os momentos magnéticos [5]. Ainda em 1975, Sherrington e Kirkpatrick (SK) [6] propuseram um modelo análogo ao de Edwards-Anderson e, com as interações de alcance infinito utilizadas, desenvolveram uma abordagem em teoria de campo médio. A solução deste modelo faz uso do método das réplicas com uma solução de simetria de réplicas. A escolha dessa solução de simetria de réplicas gera alguns resultados incorretos, como o aparecimento de valores negativos de entropia em baixas temperaturas e instabilidade na fase VS [2]. Embora o uso de réplicas implique nesta instabilidade na solução de VS com simetria de réplicas, o modelo SK tem sido utilizado extensivamente no estudo de sistemas magnéticos desordenados desde então.

Após o sucesso inicial da aplicação de modelos de vidros de spin no estudo de ligas magnéticas, nos anos seguintes muitos outros sistemas desordenados foram descritos através de métodos e ideias emprestadas da teoria de vidros de spin. Entre as áreas de aplicação estão: mercado financeiro [7–9], lasers aleatórios [10, 11], redes neurais [12–15]

e problemas de otimização [16].

Neste trabalho será estudado o modelo de Blume-Capel na rede aleatória. Através da introdução de uma conectividade finita no modelo será possível estudá-lo utilizando técnicas empregadas na teoria de VS. Técnicas de conectividade finita foram aplicadas a muitas áreas, como em redes neurais no modelo de Hopfield e em modelos de vidros de spin [17–23]. Em redes de spin, esta técnica foi usada para desenvolver modelos de VS solúveis que sejam mais semelhantes aos sistemas reais do que o modelo de vidro de spin totalmente conectado de SK [6]. Como em uma rede aleatória com conectividade finita cada spin interage com apenas um número finito de vizinhos, essa situação é mais próxima do comportamento de sistemas reais do que um modelo totalmente conectado.

O modelo de Blume-Capel (BC) [24, 25] é uma extensão do modelo clássico de Ising para spin-1, que inclui o efeito de um campo cristalino  $D$ . Ao incluir um estado não-magnético ( $\sigma = 0$ ) nesse modelo, é possível controlar a ocupação dos estados ativos ( $\sigma = \pm 1$ ) através do campo cristalino  $D$ . A presença desse campo cristalino aumenta a energia dos estados ativos em uma quantidade  $D$  acima do estado inativo. No limite em que o campo cristalino é muito forte ( $D \rightarrow \infty$ ), somente o estado  $\sigma = 0$  é ocupado, enquanto no limite em que o campo cristalino  $D \rightarrow -\infty$ , o modelo se reduz ao modelo de Ising com spin  $\frac{1}{2}$  [26]. Esse modelo possui um ponto, no qual a natureza da transição de fase muda de primeira ordem para segunda ordem, chamado de ponto tricrítico. Ou seja, para um valor crítico do campo cristalino, a transição ordem-desordem se torna uma transição de primeira ordem [27].

Esse modelo foi extensivamente estudado devido ao seu interesse teórico e suas aplicações práticas. Isto pode ser devido à sua rica estrutura de ponto fixo, apesar da aparente simplicidade do modelo [28]. Diferentes abordagens foram empregadas para o estudo desse modelo, como aproximação em teoria de campo médio [24, 25, 29], métodos variacionais [30], métodos de grupo de renormalização [26], teoria de campo efetivo [31, 32], simulações de Monte Carlo [33], entre outros métodos [34, 35]. Nas diferentes abordagens citadas acima, os resultados mostram uma transição ordem-desordem e um ponto tricrítico. Dependendo do tipo da abordagem e das considerações do modelo, a localização do ponto tricrítico pode ser um pouco diferente, mas qualitativamente os diagramas de fase são semelhantes.

O objetivo principal deste trabalho é investigar as propriedades do modelo BC em uma rede aleatória. A influência da introdução de um termo de campo local aleatório e de um termo de campo cristalino aleatório nas propriedades magnéticas serão analisadas, bem como a magnetização e o diagrama de fases desse modelo. Para melhor analisar os efeitos da solução do modelo BC na rede aleatória e da influência da introdução dos



campos aleatórios no modelo BC não será introduzida desordem nas interações entre os spins. Portanto, as interações entre os spins serão constantes, de modo que o sistema não apresentará uma fase VS.

Os métodos citados anteriormente [24–26, 29, 30] usam a teoria de campo médio convencional, isto é, com interações de longo alcance e conectividade infinita entre os spins. Entretanto, é possível questionar o que aconteceria com a transição de fase se os spins estivessem conectados com um número finito de outros spins. A existência de um ponto tricrítico depende da conectividade? Com isso, saber qual é o papel da conectividade na ordem da transição de fase está entre uma das propriedades do modelo BC a serem investigadas. Além disso, nas abordagens citadas no parágrafo anterior, os diagramas de fase não apresentam nenhum tipo de reentrância em nenhum dos métodos desenvolvidos. Há estudos [36,37] baseados em um modelo BC, que através da introdução de uma degenerescência entre os estados ativos e inativos, mostram que fenômenos de reentrância podem ocorrer. Portanto, outra propriedade a ser investigada é a existência de reentrância nesse modelo, que pode ser dependente da conectividade e das distribuições dos campos aleatórios.

Na literatura também há diversos estudos do modelo BC com campo cristalino aleatório ou campo magnético aleatório. Esses estudos mostram que a introdução de aleatoriedade no campo cristalino gera novas características no diagrama de fases [38–47]. Desta forma, é possível questionar como a introdução de uma desordem congelada, na forma de um campo aleatório, pode influenciar os diagramas de fase. Além dos diferentes métodos utilizados para estudar esse problema, em alguns casos a distribuição do campo cristalino aleatório também é diferente. Entretanto, apesar das diferenças nos métodos e na distribuição, em todos os casos os diagramas de fase encontrados exibem vários tipos de comportamento, como a presença de reentrância, ausência da transição de primeira ordem ou o comportamento do tipo BC com um ponto tricrítico.

A dissertação está organizada da seguinte forma: No capítulo 2 são expostos os conceitos fundamentais relativos ao entendimento de sistemas desordenados, bem como alguns conceitos e modelos teóricos. O capítulo 3 é destinado à apresentação do modelo BC em uma rede aleatória. No capítulo 4, são apresentados os resultados obtidos a partir dos cálculos realizados no modelo proposto. Na seção 4.1 é apresentada a solução da equação de ponto de sela, encontrada na seção 3.1. Nas seções 4.2 e seguintes são apresentados os resultados para os diferentes casos propostos - BC na rede aleatória, BC com campo cristalino aleatório e BC com campo local aleatório. E, no capítulo 5, são feitas as considerações finais.

---

## 2 Sistemas magnéticos desordenados

### 2.1 Conceitos fundamentais

Neste capítulo, serão expostos os conceitos fundamentais necessários para o entendimento da teoria de vidros de spin. É sabido que sistemas que apresentam magnetização espontânea são chamados de ferromagnetos. Neste tipo de materiais, a redução da temperatura pode levar o sistema de uma fase paramagnética, na qual não há magnetização, para uma fase ferromagnética, na qual todos spins estão alinhados na mesma direção e sentido. A magnetização espontânea é a medida da ordem de longo alcance e é o parâmetro de ordem que distingue a fase ferromagnética da paramagnética nestes materiais [48]. Na fase paramagnética os spins não estão alinhados devido a flutuações térmicas, mas através de um campo magnético aplicado (assumindo um campo suficientemente grande) é possível alinhar os spins na direção do campo. Na fase ferromagnética os spins estão ordenados (abaixo de uma temperatura crítica) e há uma magnetização espontânea líquida no sistema.

Um diagrama de fases é uma representação, normalmente em um plano, de regiões estáveis em uma fase de uma dada substância. Uma fase termodinâmica é uma região onde as propriedades termodinâmicas são funções analíticas dos parâmetros termodinâmicos. As diferentes fases são separadas por linhas, indicando transições de fase ou regiões onde o sistema apresenta instabilidade. Quando uma transição de fase ocorre, o sistema passa por uma mudança no seu comportamento. Nas transições de fase algumas propriedades termodinâmicas não são analíticas. Em transições de primeira ordem, algumas propriedades termodinâmicas do sistema, como a densidade de energia livre e a densidade de energia interna, são descontínuas. Em transições contínuas, ou transições de segunda ordem, as densidades citadas anteriormente são funções contínuas, mas o comportamento do sistema não é analítico, o qual pode ser observado como uma divergência no calor específico ou compressibilidade isotérmica [49].

Nem sempre somente o comportamento dos potenciais termodinâmicos é possível para caracterizar uma fase termodinâmica, sendo necessário definir um parâmetro de ordem que defina com maior precisão as diferentes fases do sistema. Esse parâmetro deve assumir um valor não-nulo apenas quando o sistema estiver em determinada fase, dependendo do ordenamento característico de cada fase. No caso de sistemas ferromagnetos, o parâmetro de ordem é a magnetização. Nas seções a seguir, transições de fase, parâmetros de ordem e a descrição de vidros de spin serão abordadas.

### 2.1.1 Modelo de Ising

O modelo de Ising [50] é um dos modelos mais simples que permite descrever o comportamento de sistemas magnéticos. Este modelo foi proposto pelo físico Wilhelm Lenz ao seu estudante Ernst Ising, que o resolveu unidimensionalmente em sua tese de doutorado em 1924. O modelo foi proposto para explicar a transição de fase de uma fase paramagnética (P) em altas temperaturas para uma fase ferromagnética (F) em temperaturas abaixo da temperatura de Curie  $T_C$  [51]. A temperatura de Curie é a temperatura a partir da qual um sistema ferromagnético perde suas propriedades magnéticas e passa a exibir um comportamento paramagnético. O modelo consiste em uma rede de spins (momentos magnéticos), que podem assumir apenas duas orientações  $\sigma = \pm 1$ , em relação ao eixo  $z$ . O hamiltoniano do modelo é descrito por

$$\mathcal{H} = -frJ_0N \sum_{i,j}^N \sigma_i \sigma_j - H \sum_i^N \sigma_i, \quad (1)$$

onde o parâmetro  $J_0$  representa a interação de troca entre os spins  $i$  e  $j$ , situados nos sítios  $i$  e  $j$ , respectivamente. A soma é realizada sobre todos os  $N$  sítios da rede e  $H$  representa um campo magnético externo.

A interação de troca influencia diretamente no ordenamento magnético dos spins, sendo que  $J_0$  positivo favorece o alinhamento ferromagnético e  $J_0$  negativo favorece o alinhamento antiferromagnético. Podemos observar isto da seguinte forma: a energia de dois spins vizinhos é dada por  $-J_0\sigma_i\sigma_j$  e é igual a  $-J_0$  se os spins estão paralelos e  $+J_0$  se eles estão antiparalelos. Portanto, se  $J_0 > 0$  o alinhamento entre os spins é favorecido e se  $J_0 < 0$  os spins tendem a se alinhar de forma antiferromagnética [52].

Dependendo do tipo de interações entre os spins e da temperatura do sistema, este pode ser encontrado no estado ferromagnético, antiferromagnético ou paramagnético (sem ordem magnética). Quando o sistema sofre uma mudança na temperatura, ou tem influência de alguma força externa, esse pode passar de uma fase magnética para outra, ou seja, uma transição de fase ocorre. O parâmetro de ordem que permite verificar a fase em que o sistema se encontra é a magnetização  $m$ . Em geral, o parâmetro de ordem é definido como uma quantidade que é nula acima do ponto crítico e positiva abaixo do ponto crítico e caracteriza as mudanças que ocorrem na transição de fase [53].

O modelo de Ising possui soluções analíticas para os casos uni e bidimensional. No caso unidimensional, o sistema não apresenta transição de fase. O caso bidimensional foi resolvido analiticamente por Onsager em 1944 [54]. Apresenta transição de fase e possui uma temperatura de Curie  $T_C$  finita, que pode ser determinada analiticamente ( $T_C = 2,269185$  [54]). Para dimensões maiores não há soluções analíticas, entretanto,

métodos numéricos como o de Monte Carlo, por exemplo, permitem obter resultados com excelente precisão [51, 55, 56].

### 2.1.2 Modelo de Blume-Capel

O modelo de Blume-Capel (BC) é um dos modelos de spin mais estudados em mecânica estatística. Este modelo foi elaborado em 1966 por Blume [24] e, independentemente, por Capel [25], e pode ser considerado como uma extensão do modelo de Ising para spin-1 considerando o efeito de uma interação de campo cristalino [27]. O modelo BC foi primeiramente resolvido usando a teoria de campo médio [24, 25], mas também foi extensivamente analisado usando cálculos de grupo de renormalização [57–60], simulações de Monte Carlo [33], entre outros métodos [31, 34]. Há diversos sistemas físicos nos quais este modelo pode ser bem aplicado, dentre os quais estão sistemas magnéticos e misturas de  $^3\text{He}$  –  $^4\text{He}$  [27]. O hamiltoniano do modelo BC pode ser definido como

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j + D \sum_i \sigma_i^2 \quad (2)$$

onde  $J$  é a interação de troca entre os spins, que pode ser F ( $J > 0$ ) ou AF ( $J < 0$ ), a soma é feita sobre todos os pares de spins distintos,  $D$  representa a interação de campo cristalino e os spins  $\sigma$  podem assumir os valores  $+1, 0, -1$ .

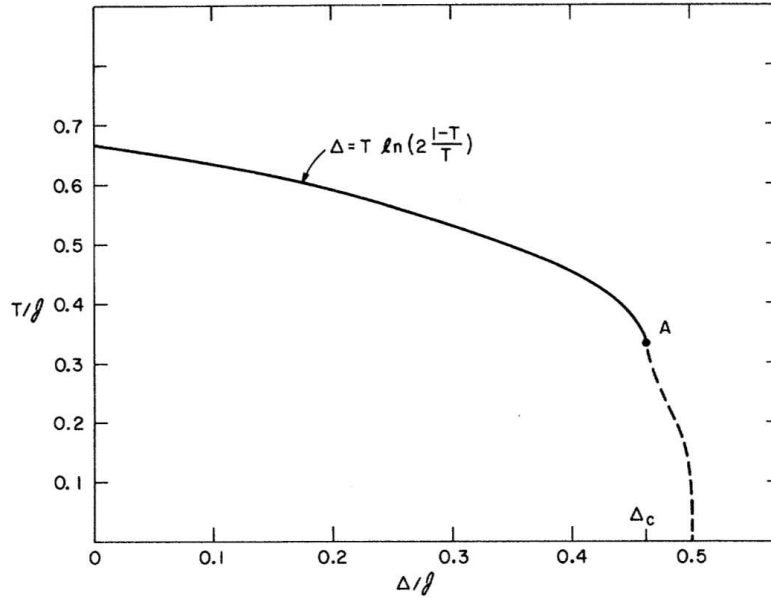
A ocupação dos estados ativos do sistema ( $\sigma = \pm 1$ ) e do estado inativo ( $\sigma = 0$ ) pode ser controlada através do campo cristalino  $D$ . O termo de campo cristalino aumenta a energia dos estados ativos em uma quantidade  $D$  acima do estado inativo. Conforme o valor do campo  $D$ , alguns casos particulares são bem conhecidos [25]:

- (I) No limite em que  $D \rightarrow -\infty$ , o modelo de Ising com dois estados é recuperado;
- (II) No limite  $D \rightarrow \infty$ , o modelo é equivalente ao caso com  $\sigma = 0$ , sem uma fase ordenada.

Portanto, é possível esperar que não exista ordenamento magnético para valores positivos suficientemente grandes de  $D$  e que exista uma fase ordenada em baixa temperatura para valores negativos e pequenos de  $D$  [25].

Os autores mostraram que a transição ordem-desordem passa a ser descontínua para um valor crítico de  $D$  [27]. O diagrama de fases é composto por uma linha de transição de fase contínua e outra linha de transição descontínua de primeira-ordem, que são ligadas por um ponto tricrítico [34], conforme pode ser visto na figura 2.1.1. Ou seja, para um valor crítico do campo cristalino, há um ponto em que a natureza da

transição de fase muda de contínua para descontínua e esse ponto é chamado de ponto tricrítico. O modelo BC é considerado um caso particular do modelo Blume-Emery-Griffiths (BEG), que inclui interações biquadráticas entre os spins [27].



**Figura 2.1.1:** Diagrama de fases no plano  $T/J - \Delta/J$  para a solução de campo médio.  $\Delta$  foi a notação utilizada no artigo original para o campo cristalino  $D$ . As linhas sólidas representam transições de segunda ordem; linhas tracejadas representam as transições de primeira ordem. O ponto tricrítico é representado pelo ponto  $A$ , com o valor crítico de campo cristalino indicado com  $\Delta_c$ . Extraído de Blume, Emery, Griffiths, referência [27].

### 2.1.3 Transições inversas

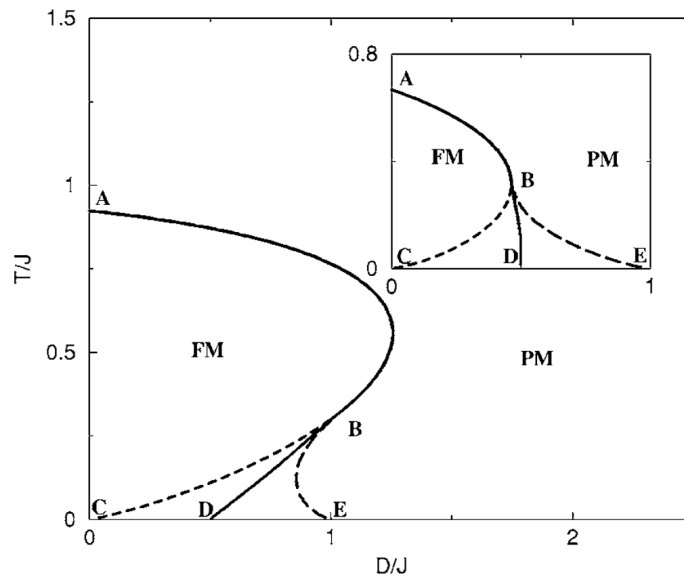
Transições inversas são um tipo de transições de fase em que a fase ordenada aparece em temperaturas maiores que a fase desordenada. Esse fenômeno é incomum e contraintuitivo, pois ocorre o inverso do esperado em uma transição de fase. Apesar disso, exemplos de substâncias que apresentam esse comportamento foram encontrados em vários tipos de sistemas, como em alguns tipos de ligas metálicas [37], polímeros [61] e em isótopos de  $\text{He}^3$  e  $\text{He}^4$  [36, 37].

As transições inversas podem ser classificadas de duas maneiras: derretimento e congelamento inverso. O derretimento inverso ocorre quando há uma transição entre uma fase  $P$  em baixas temperaturas e uma fase  $F$  em altas temperaturas. Ou seja, com o aumento da temperatura essa transição vai de uma fase desordenada para uma fase ordenada. Esse tipo de transição ocorre quando a entropia do estado ordenado é maior do que a entropia do estado desordenado. O congelamento inverso ocorre quando há o

aparecimento (reversível) de características de vidro em um sistema ao aumentar sua temperatura. Ou seja, essa transição ocorre entre uma fase P em baixas temperaturas e uma fase VS em altas temperaturas.

Por sua simplicidade de modelagem e resultados obtidos, o modelo BC pode ser usado para estudar esse tipo de transição inversa [36,37]. Nesse sistema, as interações  $J$  favorecem os estados  $\sigma = \pm 1$  (ativos) e o campo cristalino positivo favorecendo os estados  $\sigma = 0$  (inativos). A escolha desses parâmetros implica que  $J$  será responsável por introduzir um acoplamento ferromagnético que tenderá a levar o sistema a uma fase F e que  $D$  irá favorecer os estados inativos e, portanto, a fase P em temperaturas baixas.

Os autores [36,37] argumentam que, para que ocorra uma transição de derretimento inverso ou congelamento inverso é preciso que o estado não interagente seja favorecido energeticamente, enquanto o estado interagente é favorecido pela entropia. Quando o campo cristalino  $D$  é grande, o estado inativo é favorecido energeticamente. Portanto, para que uma transição inversa seja possível, uma vantagem entrópica dos estados ativos  $\sigma = \pm 1$  deve ser introduzida no sistema para que o modelo BC produza derretimento inverso. Essa vantagem é introduzida através da relação de degenerescência entre os estados ativos e inativos. Os autores assumem que o spin  $\sigma = 0$  seja  $l$  vezes degenerado e os estados  $\sigma = \pm 1$  são  $k$  vezes degenerados, sendo  $r = k/l \geq 1$  a relação de degenerescência que coordena a vantagem entrópica dos estados interagentes. Os re-



**Figura 2.1.2:** Diagrama de fases do modelo BC no plano  $T - D$  com degenerescência entre os estados ativos. Na imagem menor, não há degenerescência e não há derretimento inverso. Na imagem maior, há degenerescência e derretimento inverso. Extraído de Schupper e Shnerb [36,37].

sultados apresentados em [36, 37] são dependentes apenas da relação de degenerescência  $r$  e não dos parâmetros  $l$  e  $k$ . É importante salientar que o derretimento inverso não aparece espontaneamente no modelo BC, é preciso introduzir a vantagem entrópica para que isso ocorra.

A figura 2.1.2 apresenta, na imagem menor, os resultados do modelo BC original, sem a introdução da vantagem entrópica. A linha AB representa a linha de transição de segunda ordem entre as fases F e P. O ponto crítico é representado por B e abaixo desse ponto a transição é de primeira ordem. As linhas BC e BE são as espinodais das fases P e F, respectivamente. A linha BD representa a transição termodinâmica, ao longo dessa linha a energia livre das fases F e P é idêntica. Nesse caso, é fácil perceber que o sistema não apresenta um derretimento inverso. Quando a vantagem entrópica é introduzida, os estados ativos possuem maior entropia e a fase F ocupa uma área maior no diagrama de fases, uma consequência da vantagem entrópica dos estados ativos. O ponto tricrítico B é deslocado para a esquerda e agora há a possibilidade de um derretimento inverso de segunda ordem. A inclinação de BD também mudou, de modo que há a possibilidade de um derretimento inverso de primeira ordem. Portanto, esse diagrama indica a presença de derretimento inverso, pois com o aumento da temperatura a partir de uma fase P (desordenada), é possível obter uma fase F (ordenada).

## 2.2 Descrição experimental e teórica de vidros de spin

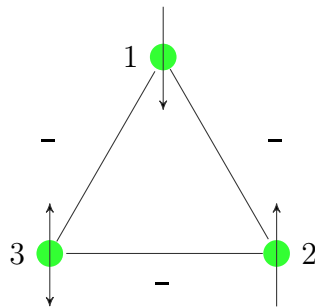
Para analisar as propriedades do modelo BC em uma rede aleatória, vamos usar técnicas utilizadas na teoria de VS. Apesar de não haver frustração no modelo que será estudado, já que as interações entre os spins serão consideradas como constantes, usaremos uma descrição de VS, pois a rede possui desordem, e para tratar essa desordem, ferramentas empregadas em VS são utilizadas. Nesta seção, e no resto do capítulo, descreveremos conceitos e técnicas utilizadas em VS.

Vidros de spin começaram a ser amplamente estudados na década de 1970. Uma questão em aberto era como medir e explicar o comportamento de congelamento desses sistemas e o comportamento semelhante ao de vidros em baixas temperaturas. Mesmo as abordagens teóricas mais simples requeriam métodos robustos e, desta maneira, a mecânica estatística teve um avanço em seus métodos [2, 3, 5, 6].

Mydosh descreveu os VS [62, 63] como materiais caracterizados pelo congelamento dos momentos magnéticos em direções aleatórias, sem uma ordem de longo alcance abaixo de uma temperatura de congelamento  $T_f$ . Além disso, ele descreve [63] que duas características são importantes para o surgimento de uma fase VS. São elas a aleatoriedade na posição dos spins ou do sinal das interações entre os spins e um tipo

de desordem, que pode ser nas ligações entre os spins. A combinação dessas duas características gera frustração, isto é, um dado spin não possui um alinhamento preferencial em relação aos vizinhos [5,63]. Um exemplo de frustração pode ser visto em um sistema com spins de Ising 2D com uma simetria de rede triangular e interações entre os vizinhos antiferromagnéticas, conforme na figura 2.2.1. O alinhamento “*up-down*” dos spins não pode ser satisfeito com este tipo de ligações.

Entretanto, há trabalhos que mostram que desordem e frustração não são características realmente necessárias para o surgimento de uma fase VS. Alguns exemplos que não possuem desordem e apresentam uma fase VS são os trabalhos de Bouchaud e Mézard [64], Marinari e Parisi [65,66] e Franz e Hertz [67]. Além desses trabalhos, o modelo de Franz *et al* [68] de um ferromagneto não possui desordem, nem frustração e possui uma fase VS.



**Figura 2.2.1:** Frustração em um sistema de três spins. Se olharmos o triângulo no sentido horário, o primeiro spin está orientado “*down*”, o segundo “*up*” e o terceiro spin estaria orientado “*down*”. Mas se olharmos o sistema no sentido anti-horário, o terceiro spin deveria estar “*up*”, em relação ao primeiro spin. Desta forma, o estado fundamental deste sistema é degenerado.

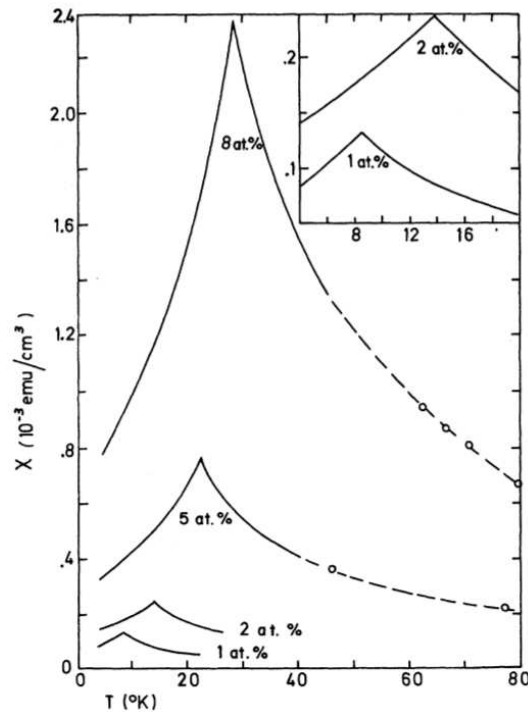
Como consequência da frustração, nenhuma configuração do estado fundamental da rede de spins minimiza simultaneamente todos os termos do Hamiltoniano. Portanto, o estado fundamental de um VS é degenerado. Há um número muito grande de diferentes configurações que podem levar o sistema a um mínimo local do espaço de configurações [3]. O modelo mais simples mostrando estas propriedades é o de Edwards-Anderson [4]. Há outra linha de modelos de VS que possuem aleatoriedade e frustração, mas que não possuem um espaço de configurações tão complicado, como o modelo de van Hemmen [3,69].

Ao falar do congelamento de spins abaixo de uma temperatura de congelamento  $T_f$  é possível observar que este estado possui uma magnetização espontânea local em um dado sítio  $i$ ,  $m_i = \langle S_i \rangle$  diferente de zero, embora a magnetização média  $M = \frac{1}{N} \sum_i m_i$  seja zero. A magnetização espontânea local influencia experimentalmente nas medidas de susceptibilidade; o valor de susceptibilidade medido é menor do que seria esperado [5].



Susceptibilidade magnética por sítio pode ser definida como a quantidade de magnetização  $m_i$  induzida no sítio  $i$  por um campo externo  $h_i$ , enquanto susceptibilidade magnética local é dada pela média  $\chi_{loc} = \frac{1}{N} \sum_i \chi_{ii}$ . Estas medidas evidenciam a existência de uma fase VS. Esta conexão entre susceptibilidade e a existência de momentos congelados pode ser observada na figura 2.2.2.

A figura 2.2.2 mostra os resultados de medidas de susceptibilidade em função da temperatura em ligas de  $AuFe$  com concentrações baixas de  $Fe$ . É possível observar que o pico, característico da transição de fase, aumenta e desloca-se para temperaturas maiores a medida que a concentração de  $Fe$  aumenta. Este pico na susceptibilidade é um indicativo da existência de magnetizações espontâneas locais diferentes de zero, ou seja, que há um estado de vidro de spin [5].



**Figura 2.2.2:** Susceptibilidade em função da temperatura para campo magnético baixo (5 gauss) em ligas de  $AuFe$ , onde at. % indica a concentração de  $Fe$ . Extraído de Cannella e Mydosh, referência [70].

Algumas propriedades encontradas experimentalmente são usadas para definir a fase VS: possuir os momentos magnéticos congelados abaixo de  $T_f$ , apresentar um pico na susceptibilidade magnética abaixo da temperatura de congelamento  $T_f$ , não possuir uma ordem magnética de longo alcance e possuir efeitos de histerese e remanência magnética que decai lentamente com o tempo abaixo de  $T_f$  quando há mudanças no campo magnético [3]. Esses resultados mostram que é difícil atingir o equilíbrio termodinâmico

em VS. A história da formação do material altera suas propriedades, o que pode ser exemplificado como uma dependência da superfície de energia livre com  $T$ , para temperaturas abaixo de  $T_f$ . Acima de  $T_f$  as barreiras entre os vales na superfície de energia são pequenas, mas algumas destas barreiras aumentam conforme a temperatura diminui, de modo que o sistema pode ficar preso em um mínimo local até conseguir relaxar para um vale estável [3].

## 2.3 Conceitos teóricos gerais e modelos

Conforme discutido na subseção anterior, sistemas desordenados como os VS apresentam frustração e desordem. Estas propriedades podem ser modeladas de várias formas, por exemplo, podemos considerar que há competição entre as interações dos spins, os quais estão localizados em posições aleatórias. Também é possível considerar que os spins estejam em uma rede regular e que suas interações sejam aleatórias, o que é descrito no modelo de Edwards-Anderson [4]. As interações neste modelo podem ser consideradas de curto ou longo alcance. É possível extrapolar o caso de longo alcance para alcance infinito, o que pode ser uma forma de definir uma teoria de campo médio. Este caso foi estudado por Sherrington e Kirkpatrick [6] em sistemas do tipo Ising. Também há outro tipo de modelo com as interações de alcance infinito, onde cada spin interage somente com um número finito de outros spins, mas estes podem estar em qualquer posição no sistema [17,18]. Este tipo de modelo pode ser visto como um modelo de longo alcance com conectividade, mas sem nenhum tipo de topologia de rede [5]. No presente trabalho estamos particularmente interessados neste último tipo de interações, onde o alcance das interações é infinito, mas a conectividade dos spins é finita.

Nos modelos que trataremos, vamos considerar que a desordem é congelada. Isto significa que as variáveis desordenadas permanecem fixas enquanto os spins podem flutuar. De um ponto de vista experimental, isto corresponde a uma situação em que a escala de tempo da desordem (interações entre os spins em um VS) é muito maior que a escala de tempo das flutuações dos spins [71]. Nas seções seguintes, faremos uma discussão sobre propriedades e métodos que descrevem sistemas desordenados.

### 2.3.1 Parâmetro de ordem, quebra de simetria e ergodicidade

Na introdução, mencionamos que a magnetização não poderia ser o parâmetro de ordem adequado para a, então nova, transição de fase e que posteriormente um novo parâmetro de ordem havia sido proposto para essa transição. Nesta subseção, vamos estudar o conceito de parâmetro de ordem, sua relação com simetria e transições de fase.

Também vamos relacionar este conceito à quebra de simetria do sistema em transições de fase e qual o efeito da quebra de simetria na ergodicidade do sistema.

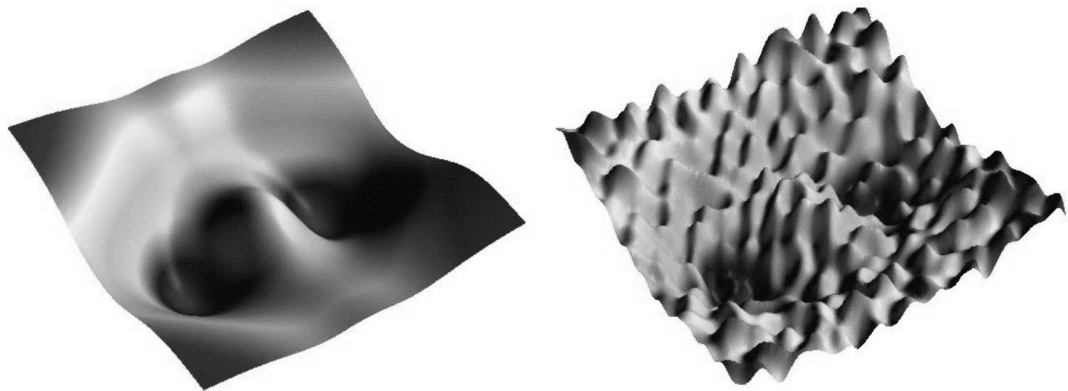
Um parâmetro de ordem é uma variável que caracteriza o estado de ordem de um sistema. A fase de um sistema está determinada por um conjunto de parâmetros de ordem que definem suas propriedades físicas. As transições de fase podem ser classificadas como transições contínuas ou transições de primeira ordem dependendo do comportamento do parâmetro de ordem do sistema, ou seja, se esse parâmetro é contínuo ou não na transição de fase. Por exemplo, em uma determinada fase um parâmetro de ordem possui valor zero e em outra fase, diferente de zero, mas a transição entre um valor nulo e não nulo desse parâmetro pode ser contínua ou descontínua. Em sistemas ferromagnéticos, o parâmetro de ordem é a magnetização, que caracteriza a fase ferromagnética ( $m \neq 0$ ) e a fase paramagnética ( $m = 0$ ). O parâmetro de ordem está relacionado a uma quebra de simetria do sistema, que pode ocorrer espontaneamente em transições de fase. Esta quebra de simetria física do sistema também está ligada à hipótese da ergodicidade.

A hipótese de ergodicidade foi primeiro definida por Boltzmann. Uma definição de ergodicidade é: dado um sistema em equilíbrio térmico durante um experimento, a trajetória descrita por este sistema no espaço de fase deve chegar suficientemente perto de qualquer ponto do espaço de fase acessível ao sistema, assumindo que o tempo seja longo o suficiente para o sistema percorrer esta trajetória. Decorre da hipótese da ergodicidade a propriedade de médias temporais do sistema serem idênticas às médias sobre o ensemble do espaço de fase [52].

Entretanto, muitas fases possuem quebras de simetrias e acabam por violar a hipótese de ergodicidade. Estes sistemas acabam explorando somente uma parte do espaço de fase. Por exemplo, em um sistema ferromagnético infinito ( $N \rightarrow \infty$ ) que apresente uma magnetização *up* nunca será encontrado posteriormente em um estado com a magnetização *down*. Por quê? A superfície de energia do sistema apresenta regiões com vales e barreiras de energia que desconectam os compartimentos que formam o espaço de fase. Apenas a parte do espaço de configurações com  $m$  positivo estará acessível e o sistema não poderá visitar o espaço de fases como um todo. Nesta situação há uma *quebra de ergodicidade* [5].

Em VS ocorre uma quebra espontânea de simetria, mas, ao contrário de outros sistemas, é difícil de definir qual simetria é quebrada. Esta dificuldade surge da possível relação da quebra de simetria com a desordem congelada do sistema. Além disso, a quebra de simetria não ocorre em uma certa temperatura  $T_c$ , mas pode ocorrer para qualquer temperatura abaixo de  $T_c$ . O espaço de fase será “dividido” em muitos vales, separados por infinitas barreiras de energia, ao contrário do caso da transição F-P, onde o

espaço de fases é “dividido” em apenas dois vales com uma barreira infinita. A cada novo decréscimo na temperatura, novas transições de fase com quebra de simetria ocorrem, dividindo cada vale em muitos outros vales menores separados por outras barreiras. Este processo ocorre continuamente com o decréscimo da temperatura até zero e, em cada um dos vales, há vários estados metaestáveis separados por barreiras finitas de energia [72]. Conseqüentemente, o ordenamento de VS não é único: há um número variado de estados com as mesmas propriedades macroscópicas, mas com diferentes configurações microscópicas. Os estados termodinâmicos do sistema são degenerados, separados por infinitas barreiras na superfície de energia [3]. Uma representação dessa superfície de energia pode ser vista na figura 2.3.1 .



**Figura 2.3.1:** Figura esquemática da superfície de energia livre, traçada em função de duas coordenadas de parâmetros de ordem. Na figura à esquerda, representação da superfície de energia de um sistema simples e na direita, de um sistema complexo, como no caso de VS. Extraído de Dellago et al, referência [73].

O parâmetro de ordem que pode descrever esse comportamento dentro dos vales foi primeiro descrito por Edwards e Anderson [4]. Eles argumentaram que, se em uma observação um determinado spin é  $\sigma_i^{(1)}$  e, depois de muito tempo, este spin seja estudado novamente, há uma probabilidade que  $\sigma_i^{(2)}$  esteja orientado na mesma direção, isto é

$$q = \langle \sigma_i^{(1)} \cdot \sigma_i^{(2)} \rangle \neq 0. \quad (3)$$

Se o parâmetro de ordem está definido apenas dentro de um vale da superfície de energia, esse parâmetro não possui informação sobre os outros vales e sua topologia. Dessa forma, podemos escrever o parâmetro de ordem como

$$q_{\alpha\beta} = \frac{1}{N} \sum_i \langle \sigma_i \rangle_{(\alpha)} \langle \sigma_i \rangle_{(\beta)}, \quad (4)$$

que mede a correlação entre os estados dos spins obtidos em diferentes experimentos  $\alpha$  e  $\beta$ . As médias  $\langle \dots \rangle_{(\alpha)}$  representam uma média térmica dentro do vale de índice  $\alpha$ . Como o sistema possui quebra de ergodicidade, as médias não são mais realizadas sobre todo o sistema, mas apenas sobre partes dele [72]. Este parâmetro de ordem de vidro de spin é uma função que descreve o ordenamento dos spins dentro de um vale e também como os vales estão correlacionados no espaço de fases [3]. Pode-se observar que  $q_{\alpha\beta} \leq 1$  e que o máximo,  $q_{\alpha\beta} = 1$ , ocorre quando os estados nos experimentos  $\alpha$  e  $\beta$  coincidem. Quanto menor a correlação entre os dois estados, menor o valor do parâmetro de ordem. Dessa maneira, quando os estados não estão correlacionados, o parâmetro de ordem será zero [72].

## 2.4 Método das réplicas

O método das réplicas foi amplamente utilizado em VS para lidar com médias das interações aleatórias entre os spins. Em princípio, cada observável depende da desordem  $J$ , incluindo a energia livre, o que poderia sugerir que as propriedades físicas de VS são diferentes para cada realização de  $J$ . A técnica de réplicas será utilizada para calcular a média da energia livre, como será visto a seguir.

Supõe-se um hamiltoniano do tipo

$$\mathcal{H}_J[\sigma] = - \sum_{i < j}^N J_{ij} \sigma_i \sigma_j, \quad (5)$$

onde as interações  $J_{ij}$  entre os spins são variáveis aleatórias congeladas. Cada spin pode interagir com qualquer outro spin do sistema, de forma que não existe uma estrutura espacial (dimensionalidade, estrutura da rede, primeiros vizinhos, etc) neste modelo [72]. Para cada valor de  $J$  calcula-se a função de partição

$$Z_J \equiv \sum_{\{\sigma\}} \exp\{-\beta \mathcal{H}_J[\sigma]\} \quad (6)$$

e a densidade de energia livre

$$f_J \equiv -\frac{1}{\beta N} \ln Z_J, \quad (7)$$

onde  $N$  é o número total de sítios e  $\beta = \frac{1}{k_B T}$  está relacionado à temperatura termodinâmica.

A teoria padrão da mecânica estatística lida com o problema de calcular  $f$  para um dado  $J$  constante. Entretanto, aqui supõe-se que as interações  $J$  não são conhecidas, mas são variáveis aleatórias com uma determinada distribuição conhecida, de forma que

não há um  $J$  fixo para calcular a energia livre.

Dessa forma, calcula-se então [2]

$$f = \sum_J P[J] f_J = \overline{f_J}, \quad (8)$$

que é a média da energia livre sobre a desordem. A média sobre a desordem  $J$  atua na função logarítmo da energia livre, o que torna o cálculo de (8) muito mais complicado, já que a desordem é congelada, isto é, fixa para cada integração sobre os spins.

Tendo isto em mente, o método das réplicas foi proposto como forma de simplificar o cálculo da equação acima. Este método foi usado por Sherrington e Kirkpatrick [6] como um método matemático para calcular a média sobre a distribuição de probabilidades da desordem  $J$ .

O método das réplicas consiste em calcular a média de  $f$  a partir da média da função de partição de  $n$  réplicas idênticas desacopladas do sistema inicial. As variáveis aleatórias ou a desordem são mantidas fixas em todas as réplicas, ou seja o conjunto de valores de  $J$  é igual em todas as réplicas. Considera-se a função de partição (6) elevada à  $n$ -ésima potência, o que equivale a função de partição das  $n$  réplicas não interagentes do sistema original. A seguinte identidade é usada

$$\ln A = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{A^n - 1}{n}, \quad (9)$$

com a qual é possível remover a média em  $J$  da função de partição de dentro do logaritmo em (8) e tomar a média somente sobre a função de partição replicada. Para  $n$  inteiro escreve-se

$$Z_J^n = \sum_{\{\sigma^1\}} \sum_{\{\sigma^2\}} \dots \sum_{\{\sigma^n\}} \exp\left\{-\sum_{\alpha=1}^n \beta H_J[\sigma^\alpha]\right\}, \quad (10)$$

onde  $n$  réplicas idênticas do sistema (com a mesma desordem) são introduzidas, o que equivale à função de partição do sistema original elevada à potência  $n$

$$Z_J^n = \prod_{\alpha=1}^n (Z_J)_\alpha, \quad (11)$$

A variável  $\alpha$  indica o índice de réplica, que assume os valores  $\{1, \dots, n\}$ . Resumindo, o método de réplicas consiste em definir a função  $f$  para  $n$  inteiro, estender esta função para uma função analítica de  $n$  e tomar o limite  $n \rightarrow 0$  [2, 72]

$$f = - \lim_{N \rightarrow \infty} \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{\beta n N} \ln Z_J^n. \quad (12)$$

O truque de réplicas, apesar do seu sucesso em inúmeras aplicações, enfrentou críticas, sendo as principais delas de natureza matemática. Uma das principais críticas será exposta brevemente. Essa crítica é sobre a troca dos limites  $N \rightarrow \infty$  e  $n \rightarrow 0$  na equação da energia livre. Essa crítica implica que, se a comutação do limite termodinâmico ( $N \rightarrow \infty$ ) e do limite  $n \rightarrow 0$  for válida, o problema pode ser resolvido através do método de ponto de sela com a extremização da energia livre sobre a função de ordem da distribuição de probabilidade dos campos locais. Esse problema foi estudado no caso do modelo SK por van Hemmen e Palmer [74]. Para resolver a energia livre pelo método de ponto de sela é preciso encontrar o conjunto de funções de ordem que extremizem a energia livre, porém encontrar esse conjunto de funções não é trivial. O procedimento usual é assumir um Ansatz para a solução. O Ansatz utilizado para resolver o modelo SK foi o Ansatz de simétrica de réplicas (RS). Esse Ansatz é definido de forma tornar a função de ordem invariante frente a permutações de spins entre diferentes réplicas. A validade dessa hipótese pode ser verificada pela análise de estabilidade via equação de Hesse, examinando se os autovalores são positivos. Essa análise foi feita para o modelo SK por de Almeida e Thouless [75] e foi encontrada uma região de instabilidade em baixas temperaturas na solução réplica-simétrica.

Foi concluído que a solução de simetria de réplicas não correspondia a um mínimo da energia livre e que a simetria de permutação entre as réplicas deveria ser quebrada. Uma proposta de solução quebra de simetria de réplicas (RSB) foi feita por Parisi [76]. A proposta de Parisi é que a quebra de simetria poderia ser feita em etapas, sendo que a assimetria é aumentada a cada etapa. A solução RSB forneceu uma solução para o modelo SK, com um número infinito de quebras de simetria. É possível verificar que a RSB é uma consequência dos inúmeros estados metaestáveis na energia livre, que podem ser medidos através do overlap entre réplicas. Entretanto, a aplicação de RSB em muitos problemas não é uma tarefa trivial.

Nesse trabalho será usada apenas a solução RS, sendo que uma extensão do presente trabalho com RSB seria interessante para trabalhos futuros, mesmo que não seja de fácil implementação. Acredita-se que a solução RS seja estável para esse problema, uma vez que não há uma fase VS. Uma forma de verificar se as soluções encontradas para esse modelo são realmente válidas é comparar os resultados obtidos com simulações de Monte Carlo para esse problema.

Em todo o desenvolvimento dessa seção foi considerado a existência de desordem nas interações  $J_{ij}$ . Vale ressaltar que, apesar de as interações  $J_{ij}$  serem consideradas constantes no modelo que será estudado, esse modelo possui desordem na rede devido ao parâmetro de conectividade  $c_{ij}$  ser aleatório. Portanto, a técnica de réplicas pode ser utilizada no modelo BC na rede aleatória.

### 3 Modelo de Blume-Capel na rede aleatória

Uma teoria de VS um pouco mais realista do que a teoria de campo médio tradicional lida com o caso, ainda em teoria de campo médio, em que cada spin interage apenas com um número finito de vizinhos. Os modelos de campo médio com conectividade infinita diferem de sistemas realistas com dimensão finita em dois aspectos: a sua conectividade é muito grande e há ausência de uma estrutura geométrica [21]. A ausência de uma estrutura geométrica é intrínseca à teoria de campo médio, mas é possível usar uma teoria com conectividade finita e obter um modelo um pouco mais realista [17–19]. Há várias motivações para estudar este tipo de sistema, uma delas é conseguir um melhor entendimento do problema de dimensões finitas, já que a noção de uma vizinhança é perdida no caso totalmente conectado [21]. Alguns exemplos de modelos que consideram conectividade finita são: VS em uma rede de Bethe e VS em uma rede aleatória desordenada com conectividade média fixa ou flutuante [22]. O estudo de VS possibilitou o desenvolvimento de novas técnicas matemáticas, como a quebra de simetria de réplicas [2, 77, 78]. Essas técnicas podem ser aplicadas em problemas complexos de otimização, como problemas do tipo K-SAT [79] e coloração de grafos [80].

Uma consequência dos modelos com conectividade finita é que a distribuição de campos locais torna-se uma função mais complicada do que no caso com interações de alcance infinito [19]. Nos sistemas com conectividade finita há conjunto infinito de parâmetros de ordem, ao contrário dos sistemas não-diluídos (como o modelo SK), onde somente um número finito de parâmetros de ordem surge [17, 18]. Conforme será exposto na subseção seguinte, como o número médio de conexões é finito, os termos de alta ordem na expansão de uma das exponenciais de interação dos spins não podem ser desprezados e dessa expansão surge um número infinito de parâmetros de ordem [18]. Entretanto, na solução de simetria de réplicas (*Replica Symmetric Ansatz*, RS) este conjunto de parâmetros de ordem pode ser descrito em termos dos momentos de uma distribuição de campos auxiliar, de forma que a manipulação destes parâmetros é simplificada [20].

Neste capítulo, será desenvolvida a teoria para o modelo de Blume-Capel com conectividade finita, um campo cristalino aleatório e um campo aleatório. Usa-se o método das réplicas para obter as equações de ponto de sela para a distribuição efetiva dos campos locais. A distribuição de campos locais é bidimensional, com uma das componentes associada a uma forma linear dos spins ( $\sim \sigma$ ) e a outra componente associada a uma forma quadrática ( $\sim \sigma^2$ ), que corresponde ao termo de campo cristalino.



### 3.1 O modelo

Seja o hamiltoniano de Ising com três estados, com campo aleatório, dado por

$$H(\vec{\sigma}) = -\frac{1}{c} \sum_{\langle i,j \rangle} c_{ij} J_{ij} \sigma_i \sigma_j + \sum_{i=1}^N D_i \sigma_i^2 - \sum_{i=1}^N \theta_i \sigma_i \quad (13)$$

onde  $\sigma_i = \{-1, 0, 1\}$  e  $\langle i, j \rangle$  significa uma soma sobre todos pares distintos de sítios. A matriz de conectividade  $\mathcal{C}$  indica se há uma conexão ( $c_{ij} = 1$ ) ou não ( $c_{ij} = 0$ ) entre um par de spins. Os elementos de matriz  $c_{ij}$  seguem a seguinte distribuição de probabilidade

$$p(c_{ij}) = \frac{c}{N} \delta_{c_{ij},1} + \left(1 - \frac{c}{N}\right) \delta_{c_{ij},0}, \quad (14)$$

onde  $c$  é o número médio de conexões por spin e deve permanecer finito no limite termodinâmico

$$c = \frac{1}{N} \sum_{ij} c_{ij}.$$

Assume-se  $J_{ij} = J$  constante, sem desordem nas ligações entre os spins. A variável  $\theta_i$  é a componente aleatória que pode seguir uma distribuição de probabilidades bimodal com média zero,

$$p(\theta_i) = (1 - p)\delta(\theta_i - \theta_0) + p\delta(\theta_i + \theta_0). \quad (15)$$

A variável  $D_i$  representa o campo cristalino aleatório que também pode ter uma distribuição bimodal

$$p(D_i) = (1 - s)\delta(D_i) + s\delta(D_i - D). \quad (16)$$

As variáveis  $p$  e  $s$  denotam a concentração dos campos aleatórios.

A termodinâmica do sistema é dada pela energia livre

$$f = - \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{\beta N} \langle \ln Z \rangle, \quad (17)$$

onde

$$Z = \sum_{\vec{\sigma}} e^{-\beta H(\vec{\sigma})} \quad (18)$$

é a função de partição.

Para calcular a média do logaritmo, será usado o método das réplicas descrito anteriormente. Usa-se a identidade de réplicas, com a qual é possível remover a média da função de partição de dentro do logaritmo e tomar a média somente sobre a função

de partição replicada. Desta forma, é possível reescrever a energia livre como

$$f = - \lim_{N \rightarrow \infty} \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{\beta n N} \ln \langle Z^n \rangle. \quad (19)$$

Com o método das réplicas,  $n$  réplicas não interagentes do sistema são criadas, o que equivale à função de partição original elevada à potência  $n$ . Escreve-se, então, a expressão para a função de partição replicada, com os índices  $\alpha$  correspondendo aos índices de réplica,

$$Z_\alpha = \sum_{\vec{\sigma}} \exp \left\{ \frac{\beta}{c} \sum_{i < j} c_{ij} J_{ij} \sigma_i^\alpha \sigma_j^\alpha \right\} \exp \left\{ -\beta \sum_{i=1}^N D_i (\sigma_i^\alpha)^2 \right\} \exp \left\{ \beta \sum_{i=1}^N \theta_i \sigma_i^\alpha \right\}. \quad (20)$$

Aqui,  $\sigma_i^\alpha$  representa o estado do spin do sítio  $i$  na réplica  $\alpha$ . A variável  $\alpha$  pode assumir valores entre 1 e  $n$  e os sítios  $i$  de 1 a  $N$ . A função de partição elevada à potência  $n$  pode ser escrita como

$$Z^n = \prod_{\alpha=1}^n Z_\alpha. \quad (21)$$

Substitui-se em (21) a expressão de  $Z_\alpha$ , reorganiza-se os termos e o produto em  $\alpha$  é passado para dentro da exponencial. Escreve-se a média de  $Z^n$ ,

$$\langle Z^n \rangle = \sum_{\vec{\sigma}^1, \dots, \vec{\sigma}^n} \left\langle e^{\beta \sum_{i,\alpha} \theta_i \sigma_i^\alpha} \right\rangle_{\{\theta_i\}} \left\langle e^{-\beta \sum_{i,\alpha} D_i (\sigma_i^\alpha)^2} \right\rangle_{\{D_i\}} \prod_{i < j} \left\langle e^{\frac{\beta}{c} c_{ij} J_{ij} \sum_{\alpha=1}^n \sigma_i^\alpha \sigma_j^\alpha} \right\rangle_{\{c_{ij}\} \{J_{ij}\}}.$$

Lembrando que  $J_{ij}$  havia sido definido como constante, a média é tomada somente sobre a conectividade  $c_{ij}$  e as variáveis aleatórias  $\theta_i$  e  $D_i$

$$\langle Z^n \rangle = \sum_{\vec{\sigma}^1, \dots, \vec{\sigma}^n} \left\langle e^{\beta \sum_{i,\alpha} \theta_i \sigma_i^\alpha} \right\rangle_{\{\theta_i\}} \left\langle e^{-\beta \sum_{i,\alpha} D_i (\sigma_i^\alpha)^2} \right\rangle_{\{D_i\}} \prod_{i < j} \left[ 1 + \frac{c}{N} \left( e^{\frac{\beta J}{c} \sum_{\alpha=1}^n \sigma_i^\alpha \sigma_j^\alpha} - 1 \right) \right]. \quad (22)$$

Como foi definido que  $c$  é um número finito e considera-se o limite termodinâmico  $N \rightarrow \infty$ , tem-se que  $\frac{c}{N} \rightarrow 0$  e é possível usar a aproximação  $1 + x \approx e^x$ ,

$$\langle Z^n \rangle \cong \sum_{\vec{\sigma}^1, \dots, \vec{\sigma}^n} \left\langle e^{\beta \sum_{i,\alpha} \theta_i \sigma_i^\alpha} \right\rangle_{\{\theta_i\}} \left\langle e^{-\beta \sum_{i,\alpha} D_i (\sigma_i^\alpha)^2} \right\rangle_{\{D_i\}} \prod_{i < j} \exp \left( \frac{c}{N} e^{\frac{\beta J}{c} \sum_{\alpha=1}^n \sigma_i^\alpha \sigma_j^\alpha} - 1 \right).$$

Os termos em uma das médias não dependem dos termos da outra média, de forma que é possível reescrever as médias

$$\langle Z^n \rangle = \sum_{\vec{\sigma}^1, \dots, \vec{\sigma}^n} \left\langle \exp \left[ \beta \sum_{i,\alpha} \theta_i \sigma_i^\alpha - \beta \sum_{i,\alpha} D_i (\sigma_i^\alpha)^2 + \frac{c}{2N} \sum_{i \neq j} \left( e^{\frac{\beta J}{c} \sum_{\alpha=1}^n \sigma_i^\alpha \sigma_j^\alpha} - 1 \right) \right] \right\rangle_{\{\theta_i\} \{D_i\}}. \quad (23)$$

Para tomar o traço sobre as variáveis de réplica, a seguinte identidade é introduzida:

$$1 = \sum_{\vec{\sigma}} \left[ \prod_{\alpha=1}^n \delta_{\sigma_\alpha, \sigma_i^\alpha} \right] \equiv \sum_{\vec{\sigma}} \delta_{\vec{\sigma}, \vec{\sigma}_i}. \quad (24)$$

Aqui  $\vec{\sigma}_i$  é um vetor  $n$ -dimensional que representa o estado de  $n$  réplicas no sítio  $i$ . Usando a igualdade (24) em (23), tem-se

$$\begin{aligned} \langle Z^n \rangle = & \sum_{\vec{\sigma}^1, \dots, \vec{\sigma}^n} \left\langle \exp \left[ \beta \sum_{i, \alpha} \theta_i \sigma_i^\alpha - \beta \sum_{i, \alpha} D_i (\sigma_i^\alpha)^2 \right. \right. \\ & \left. \left. + \frac{c}{2N} \sum_{i \neq j} \sum_{\vec{\sigma}, \vec{\tau}} \delta_{\vec{\sigma}, \vec{\sigma}_i} \delta_{\vec{\tau}, \vec{\sigma}_j} \left( e^{\frac{\beta J}{c} \sum_{\alpha=1}^n \sigma_\alpha \tau_\alpha} - 1 \right) \right] \right\rangle_{\{\theta_i\}, \{D_i\}} \end{aligned} \quad (25)$$

onde  $\vec{\tau} = (\tau_1, \dots, \tau_n)$  é um spin auxiliar.

Com a introdução da identidade (24), foi possível passar as variáveis de spin  $\sigma_i^\alpha$ , sobre as quais o traço da função de partição será tomado, para o argumento da exponencial “de fora”, já que, antes, parte desta dependência era somente na exponencial “de dentro”. Em modelos de VS tradicionais seria possível expandir a exponencial “de dentro” em uma série de potências [81, 82]. Entretanto, não é possível fazer esta expansão, uma vez que o número médio de conexões por spin  $c$  é finito.

Ao invés de introduzir um número infinito de parâmetros de ordem, vamos usar uma função de ordem da distribuição de probabilidade dos campos locais. Esta distribuição de campos locais corresponde à distribuição com menor energia para mudar o  $i$ -ésimo spin do estado fundamental para um estado excitado que envolva a mudança de um número finito de spins [18]. Para introduzir esta função de ordem, a identidade é usada [83]

$$\int \prod_{\vec{\sigma}} [dP(\vec{\sigma}) d\hat{P}(\vec{\sigma})] \exp \left\{ \sum_{\vec{\sigma}} \hat{P}(\vec{\sigma}) \left[ P(\vec{\sigma}) - \frac{1}{N} \sum_i \delta_{\vec{\sigma}, \vec{\sigma}_i} \right] \right\} = 1. \quad (26)$$

onde  $P(\vec{\sigma}) = \frac{1}{N} \sum_i \delta_{\vec{\sigma}, \vec{\sigma}_i}$  representa a fração de sítios com a configuração de réplica  $\vec{\sigma}$  e  $\hat{P}(\vec{\sigma})$  é uma densidade auxiliar.

Retornando à função de partição, introduz-se a identidade (26) na função de partição (25)

$$\begin{aligned} \langle Z^n \rangle = & \sum_{\vec{\sigma}^1, \dots, \vec{\sigma}^n} \left\langle \int \prod_{\vec{\sigma}} [dP(\vec{\sigma}) d\hat{P}(\vec{\sigma})] \exp \left\{ \beta \sum_{i, \alpha} \theta_i \sigma_i^\alpha - \beta \sum_{i, \alpha} D_i (\sigma_i^\alpha)^2 + \sum_{\vec{\sigma}} \hat{P}(\vec{\sigma}) P(\vec{\sigma}) + \right. \right. \\ & \left. \left. - \frac{1}{N} \sum_{\vec{\sigma}} \hat{P}(\vec{\sigma}) \sum_i \delta_{\vec{\sigma}, \vec{\sigma}_i} + \frac{c}{2N} \sum_{i \neq j} \sum_{\vec{\sigma}, \vec{\tau}} \delta_{\vec{\sigma}, \vec{\sigma}_i} \delta_{\vec{\tau}, \vec{\sigma}_j} \left( e^{\frac{\beta J}{c} \sum_{\alpha=1}^n \sigma_\alpha \tau_\alpha} - 1 \right) \right\} \right\rangle_{\{\theta_i\}, \{D_i\}}. \end{aligned} \quad (27)$$

A definição da função de ordem  $P$  é reescrita como

$$\sum_i \delta_{\vec{\sigma}, \vec{\sigma}_i} = NP(\vec{\sigma}), \quad i \neq j \quad (28)$$

e é usada em (27) para eliminar o somatório em  $i, j$  dentro da exponencial

$$\begin{aligned} \langle Z^n \rangle = & \sum_{\vec{\sigma}^1, \dots, \vec{\sigma}^n} \left\langle \int \prod_{\vec{\sigma}} [dP(\vec{\sigma}) d\hat{P}(\vec{\sigma})] \exp \left\{ \beta \sum_{i, \alpha} \theta_i \sigma_i^\alpha - \beta \sum_{i, \alpha} D_i (\sigma_i^\alpha)^2 + \right. \right. \\ & \left. \left. + \sum_{\vec{\sigma}} \hat{P}(\vec{\sigma}) P(\vec{\sigma}) - \frac{1}{N} \sum_{\vec{\sigma}} \hat{P}(\vec{\sigma}) \sum_i \delta_{\vec{\sigma}, \vec{\sigma}_i} + \frac{Nc}{2} \sum_{\vec{\sigma}, \vec{\tau}} (e^{\frac{\beta J}{c} \vec{\sigma} \cdot \vec{\tau}} - 1) \right\} \right\rangle_{\{\theta_i\} \{D_i\}}. \quad (29) \end{aligned}$$

É possível observar que, na equação acima, o traço sobre as variáveis de spin só atua sobre o fator

$$A \equiv \exp \left\{ \beta \sum_{i, \alpha} \theta_i \sigma_i^\alpha - \beta \sum_{i, \alpha} D_i (\sigma_i^\alpha)^2 - \frac{1}{N} \sum_{\vec{\sigma}} \hat{P}(\vec{\sigma}) \sum_i \delta_{\vec{\sigma}, \vec{\sigma}_i} \right\}.$$

Tomando o traço somente no fator acima, obtém-se

$$B = \sum_{\vec{\sigma}^1, \dots, \vec{\sigma}^n} A = \prod_i \sum_{\vec{\sigma}_i} \exp \left\{ \beta \theta_i \sum_{\alpha} \sigma_i^\alpha - \beta \sum_{\alpha} D_i (\sigma_i^\alpha)^2 - \frac{1}{N} \hat{P}(\vec{\sigma}_i) \right\} \quad (30)$$

Como a média sobre o campo aleatório  $\theta_i$  e a média sobre o campo cristalino aleatório  $D_i$  não atuam nos outros fatores da equação (29), pode-se tomá-la somente nos termos com  $\theta_i$  e  $D_i$ , respectivamente. Para efetuar essa média é possível mover o produto e a soma para fora da média, uma vez que isso não altera o efeito dessas operações na expressão. Desta forma é possível separar a expressão em três exponenciais, a primeira com o termo de campo aleatório, a segunda com o termo de campo cristalino aleatório e outra com os demais termos

$$\begin{aligned} \langle B \rangle_{\{\theta_i\} \{D_i\}} = & \prod_i \sum_{\vec{\sigma}_i} \left\langle \exp \left\{ \beta \theta_i \sum_{\alpha} \sigma_i^\alpha \right\} \right\rangle_{\{\theta_i\}} \left\langle \exp \left\{ -\beta \sum_{\alpha} D_i (\sigma_i^\alpha)^2 \right\} \right\rangle_{\{D_i\}} \\ & \times \exp \left\{ -\frac{1}{N} \hat{P}(\vec{\sigma}_i) \right\}. \quad (31) \end{aligned}$$

Todos os termos das exponenciais possuem dependência em  $i$ , logo é possível efetuar o produto em  $i$  e a expressão acima fica elevada a potência  $N$ . A seguir, aplica-se uma exponencial e um logaritmo para reescrever esta expressão,

$$\langle B \rangle_{\theta, D} = \exp \left\{ N \ln \sum_{\vec{\sigma}} \left\langle \exp \left[ \beta \theta \sum_{\alpha} \sigma^\alpha - \beta D \sum_{\alpha} (\sigma^\alpha)^2 - \frac{1}{N} \hat{P}(\vec{\sigma}) \right] \right\rangle_{\theta, D} \right\}. \quad (32)$$

Após realizadas estas operações, retorna-se à função de partição (29) onde a seguinte mudança de variáveis é efetuada

$$\hat{P}(\vec{\sigma}) \rightarrow N\hat{P}(\vec{\sigma}) \quad (33)$$

de forma que a função de partição agora é

$$\begin{aligned} \langle Z^n \rangle = & \int \left[ \prod_{\vec{\sigma}} dP(\vec{\sigma}) d\hat{P}(\vec{\sigma}) \right] \exp N \left\{ \ln \sum_{\vec{\sigma}} \left\langle \exp \left[ \beta\theta \sum_{\alpha} \sigma^{\alpha} - \beta D \sum_{\alpha} (\sigma^{\alpha})^2 - \hat{P}(\vec{\sigma}) \right] \right\rangle_{\theta, D} \right. \\ & \left. + \sum_{\vec{\sigma}} \hat{P}(\vec{\sigma}) P(\vec{\sigma}) + \frac{c}{2} \sum_{\vec{\sigma}, \vec{\tau}} P(\vec{\sigma}) P(\vec{\tau}) \left( e^{\frac{\beta J}{c} \vec{\sigma} \cdot \vec{\tau}} - 1 \right) \right\}. \end{aligned} \quad (34)$$

Quando  $N \rightarrow \infty$ , a integral acima pode ser calculada pelo método de ponto de sela. A média da função de partição acima pode ser substituída na equação da energia livre (19)

$$\begin{aligned} f = & - \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{\beta n} \text{Extr} \left\{ \ln \sum_{\vec{\sigma}} \left\langle \exp \left[ \beta\theta \sum_{\alpha} \sigma^{\alpha} - \beta D \sum_{\alpha} (\sigma^{\alpha})^2 - \hat{P}(\vec{\sigma}) \right] \right\rangle_{\theta, D} \right. \\ & \left. + \sum_{\vec{\sigma}} \hat{P}(\vec{\sigma}) P(\vec{\sigma}) + \frac{c}{2} \sum_{\vec{\sigma}, \vec{\tau}} P(\vec{\sigma}) P(\vec{\tau}) \left( e^{\frac{\beta J}{c} \vec{\sigma} \cdot \vec{\tau}} - 1 \right) \right\}. \end{aligned} \quad (35)$$

O método de ponto de sela leva ao extremo da energia livre sobre as densidades  $\{P(\vec{\sigma}), \hat{P}(\vec{\sigma})\}$  para a energia livre por sítio. As equações de ponto de sela são:

$$\frac{\partial f}{\partial \hat{P}(\vec{\sigma})} = 0, \quad \frac{\partial f}{\partial P(\vec{\sigma})} = 0. \quad (36)$$

Deriva-se a energia livre em relação a  $\hat{P}(\vec{\sigma})$

$$P(\vec{\sigma}) - \frac{\langle \exp[\beta\theta \sum_{\alpha} \sigma^{\alpha} - \beta D \sum_{\alpha} (\sigma^{\alpha})^2 - \hat{P}(\vec{\sigma})] \rangle_{\theta, D}}{\sum_{\vec{\sigma}} \langle \exp[\beta\theta \sum_{\alpha} \sigma^{\alpha} - \beta D \sum_{\alpha} (\sigma^{\alpha})^2 - \hat{P}(\vec{\sigma})] \rangle_{\theta, D}} = 0, \quad (37)$$

e em relação a  $P(\vec{\sigma})$

$$\hat{P}(\vec{\sigma}) + c \sum_{\vec{\tau}} P(\vec{\tau}) \left( \exp \left( \frac{\beta J}{c} \vec{\sigma} \cdot \vec{\tau} \right) - 1 \right) = 0. \quad (38)$$

As equações de ponto de sela acima são reescritas isolando  $P(\vec{\sigma})$  na primeira equação e

$\hat{P}(\vec{\sigma})$  na segunda equação

$$P(\vec{\sigma}) = \frac{\langle \exp[\beta\theta \sum_{\alpha} \sigma^{\alpha} - \beta D \sum_{\alpha} (\sigma^{\alpha})^2 - \hat{P}(\vec{\sigma})] \rangle_{\theta, D}}{\sum_{\vec{\sigma}} \langle \exp[\beta\theta \sum_{\alpha} \sigma^{\alpha} - \beta D \sum_{\alpha} (\sigma^{\alpha})^2 - \hat{P}(\vec{\sigma})] \rangle_{\theta, D}} \quad (39)$$

$$\hat{P}(\vec{\sigma}) = -c \sum_{\vec{\tau}} P(\vec{\tau}) \left( \exp\left(\frac{\beta J}{c} \vec{\sigma} \cdot \vec{\tau}\right) - 1 \right). \quad (40)$$

Elimina-se  $\hat{P}(\vec{\sigma})$  da energia livre usando a equação acima (40),

$$f = - \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{\beta n} \text{Extr} \left\{ - \frac{c}{2} \sum_{\vec{\sigma}, \vec{\tau}} P(\vec{\sigma}) P(\vec{\tau}) \left( e^{\frac{\beta J}{c} \vec{\sigma} \cdot \vec{\tau}} - 1 \right) + \right. \\ \left. + \ln \sum_{\vec{\sigma}} \left\langle \exp \left[ \beta\theta \sum_{\alpha} \sigma^{\alpha} - \beta D \sum_{\alpha} (\sigma^{\alpha})^2 + c \sum_{\vec{\tau}} P(\vec{\tau}) \left( e^{\frac{\beta J}{c} \vec{\sigma} \cdot \vec{\tau}} - 1 \right) \right] \right\rangle_{\theta, D} \right\} \quad (41)$$

e também emprega-se a equação (40) para eliminar  $\hat{P}(\vec{\sigma})$  da equação (39), o que gera uma equação auto-consistente para  $P(\vec{\sigma})$

$$P(\vec{\sigma}) = \frac{\left\langle \exp \left[ \beta\theta \sum_{\alpha} \sigma^{\alpha} - \beta D \sum_{\alpha} (\sigma^{\alpha})^2 + c \sum_{\vec{\tau}} P(\vec{\tau}) \left( e^{\frac{\beta J}{c} \vec{\sigma} \cdot \vec{\tau}} - 1 \right) \right] \right\rangle_{\theta, D}}{\sum_{\vec{\sigma}} \left\langle \exp \left[ \beta\theta \sum_{\alpha} \sigma^{\alpha} - \beta D \sum_{\alpha} (\sigma^{\alpha})^2 + c \sum_{\vec{\tau}} P(\vec{\tau}) \left( e^{\frac{\beta J}{c} \vec{\sigma} \cdot \vec{\tau}} - 1 \right) \right] \right\rangle_{\theta, D}}. \quad (42)$$

Para prosseguir, assume-se que a densidade de probabilidade  $P(\vec{\sigma})$  adquire uma forma tal que permutações de spins entre diferentes réplicas deixe  $P(\vec{\sigma})$  invariante, ou seja, é usado um Ansatz de simetria de réplicas [17, 18, 21]. Neste caso de spins de três estados, o Ansatz escolhido deve depender somente nas somas em  $\sum_{\alpha} \sigma^{\alpha}$  e  $\sum_{\alpha} (\sigma^{\alpha})^2$ , com os pesos correspondentes. Portanto, assume-se o Ansatz de réplicas como

$$P(\vec{\sigma}) = \int dhdb W(h, b) \frac{e^{\beta h \sum_{\alpha} \sigma^{\alpha} - \beta b \sum_{\alpha} (\sigma^{\alpha})^2}}{[2e^{-\beta b} \cosh(\beta h) + 1]^n}, \quad (43)$$

que é idêntico ao caso de spin com três estados sem campo aleatório, conforme [83, 84]. O novo parâmetro de ordem de simetria de réplicas  $W(h, b)$  é uma distribuição (normalizada) dos campos locais  $h$  e  $b$  e deve ser determinado de modo auto-consistente. Os denominadores de (43) e de (42) podem ser negligenciados por tenderem a 1 quando  $n \rightarrow 0$ . As médias em  $\theta$  e  $D$  na equação (42) podem ser consideradas a atuar somente nos termos com dependência nessas variáveis e a última exponencial nessa equação pode

ser expandida em série de potências

$$P(\vec{\sigma}) = e^{-c} \left\langle e^{\beta\theta \sum_{\alpha} \sigma^{\alpha}} \right\rangle_{\theta} \left\langle e^{-\beta D \sum_{\alpha} (\sigma^{\alpha})^2} \right\rangle_D \sum_{k=0}^{\infty} \frac{c^k}{k!} \sum_{\vec{\tau}_1 \dots \vec{\tau}_k} P(\vec{\tau}_1) \dots P(\vec{\tau}_k) \prod_{l=1}^k e^{\frac{\beta J}{c} \vec{\sigma} \cdot \vec{\tau}^l}, \quad (44)$$

e o ansatz de simetria de réplicas (43) pode ser inserido em cada uma das distribuições  $P(\vec{\tau}_k)$

$$P(\vec{\sigma}) = e^{-c} \left\langle e^{\beta\theta \sum_{\alpha} \sigma^{\alpha}} \right\rangle_{\theta} \left\langle e^{-\beta D \sum_{\alpha} (\sigma^{\alpha})^2} \right\rangle_D \sum_{k=0}^{\infty} \frac{c^k}{k!} \int \left[ \prod_{l=1}^k \frac{dh_l db_l W(h_l, b_l)}{[2e^{-\beta b} \cosh(\beta h) + 1]^n} \right] \\ \times \sum_{\vec{\tau}_1 \dots \vec{\tau}_k} \prod_{l=1}^k e^{\beta h_l \sum_{\alpha} \tau^{\alpha l} - \beta b_l \sum_{\alpha} (\tau^{\alpha l})^2 + \frac{\beta J}{c} \vec{\sigma} \cdot \vec{\tau}^l}. \quad (45)$$

Considera-se o último termo na expressão acima, que é definido como um termo  $I$

$$I \equiv \sum_{\vec{\tau}_1 \dots \vec{\tau}_k} \prod_{l=1}^k e^{\beta h_l \sum_{\alpha} \tau^{\alpha l} - \beta b_l \sum_{\alpha} (\tau^{\alpha l})^2 + \frac{\beta J}{c} \vec{\sigma} \cdot \vec{\tau}^l}. \quad (46)$$

Primeiro, as somas e os produtos são reorganizados na expressão acima de forma a poder escrever uma soma em termos das variáveis de spin  $\tau^{\alpha l}$  fora da exponencial

$$I = \prod_{l=1}^k \left( \exp \sum_{\alpha=1}^n \ln \sum_{\tau^{\alpha l}} e^{\beta h_l \tau^{\alpha l} - \beta b_l (\tau^{\alpha l})^2 + \frac{\beta J}{c} \sigma^{\alpha} \tau^{\alpha l}} \right). \quad (47)$$

Em seguida, o traço é efetuado sobre  $\tau^{\alpha l} = \{-1, 0, 1\}$

$$I = \prod_{l=1}^k \exp \left\{ \sum_{\alpha=1}^n \ln \left[ 2 \cosh \left( \beta h_l + \frac{\beta J}{c} \sigma^{\alpha} \right) e^{-\beta b_l} + 1 \right] \right\}. \quad (48)$$

Para extrair a dependência apropriada nas variáveis de spin  $\sigma^{\alpha}$  e  $(\sigma^{\alpha})^2$ , a seguinte identidade será utilizada [83]

$$\sum_{\sigma} \delta_{\sigma \sigma^{\alpha}} = 1, \quad (49)$$

com a seguinte representação para spins de três estados:

$$\delta_{\sigma \sigma^{\alpha}} = 1 - \sigma^2 - (\sigma^{\alpha})^2 + \frac{1}{2} \sigma \sigma^{\alpha} + \frac{3}{2} \sigma^2 (\sigma^{\alpha})^2. \quad (50)$$

Ao introduzir a identidade acima na equação (48), a dependência em  $\sigma^{\alpha}$  e  $(\sigma^{\alpha})^2$  é obtida

diretamente na exponencial mais de fora, de modo que o traço pode ser efetuado sobre  $\sigma$ . Efetuando essas operações obtém-se:

$$I = \prod_{l=1}^k \exp \left\{ n \ln \left[ 2 \cosh(\beta h_l) e^{-\beta b_l} + 1 \right] + \left( \sum_{\alpha} \sigma^{\alpha} \right) \phi(h_l, b_l) + \left( \sum_{\alpha} (\sigma^{\alpha})^2 \right) \psi(h_l, b_l) \right\}, \quad (51)$$

onde define-se duas funções  $\phi(h_l, b_l)$  e  $\psi(h_l, b_l)$ , as quais são dadas por

$$\phi(h_l, b_l) \equiv \frac{1}{2} \ln \left[ \frac{\cosh(\beta h_l + \frac{\beta J}{c}) + \frac{1}{2} e^{\beta b_l}}{\cosh(\beta h_l - \frac{\beta J}{c}) + \frac{1}{2} e^{\beta b_l}} \right] \quad (52)$$

$$\psi(h_l, b_l) \equiv \frac{1}{2} \ln \left[ \frac{(\cosh(\beta h_l + \frac{\beta J}{c}) + \frac{1}{2} e^{\beta b_l})(\cosh(\beta h_l - \frac{\beta J}{c}) + \frac{1}{2} e^{\beta b_l})}{(\cosh(\beta h_l) + \frac{1}{2} e^{\beta b_l})^2} \right], \quad (53)$$

que são iguais às funções correspondentes do caso sem campo aleatório. [83]

A expressão I (51) é incorporada na densidade de probabilidade em (45) e o limite  $n \rightarrow 0$  é tomada. Além disso, acrescenta-se o *Ansatz* de réplicas (43) no lado esquerdo da equação da densidade de probabilidade (45), de modo que seja possível encontrar uma relação auto-consistente para  $W(h, b)$ ,

$$\begin{aligned} \int dh db W(h, b) e^{\beta h \sum_{\alpha} \sigma^{\alpha} - \beta b \sum_{\alpha} (\sigma^{\alpha})^2} &= \left\langle e^{-\beta D \sum_{\alpha} (\sigma^{\alpha})^2} \right\rangle_D \left\langle e^{\beta \theta \sum_{\alpha} \sigma^{\alpha}} \right\rangle_{\theta} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{e^{-c} c^k}{k!} \\ &\times \int \left[ \prod_{l=1}^k dh_l db_l W(h_l, b_l) \right] \prod_{l=1}^k \exp \left\{ \left( \sum_{\alpha} \sigma^{\alpha} \right) \phi(h_l, b_l) + \left( \sum_{\alpha} (\sigma^{\alpha})^2 \right) \psi(h_l, b_l) \right\}. \end{aligned} \quad (54)$$

Para encontrar uma relação auto-consistente para  $W(h, b)$ , algumas definições são feitas. O termo  $P_k$  é identificado como uma distribuição de Poisson de média  $c$

$$P_k \equiv \frac{e^{-c} c^k}{k!}, \quad (55)$$

a média em  $\theta$  como

$$\langle (\dots) \rangle_{\theta} \equiv \int d\theta (\dots) P_{\theta}(\theta), \quad (56)$$

e a média em  $D$  como

$$\langle (\dots) \rangle_D \equiv \int dD (\dots) P_D(D). \quad (57)$$

Com estas definições, reorganiza-se a equação (54) e introduz-se a seguinte identidade



nessa equação

$$\int dx \delta(x - a) f(x) = f(a). \quad (58)$$

Assim, a equação (54) fica

$$\begin{aligned} \int dh db W(h, b) e^{\beta h \sum_{\alpha} \sigma^{\alpha} - \beta b \sum_{\alpha} (\sigma^{\alpha})^2} &= \sum_{k=0}^{\infty} P_k \int d\theta P_{\theta}(\theta) \int dD P_D(D) \int dx dy \\ &\times \int \left[ \prod_{l=1}^k dh_l db_l W(h_l, b_l) \right] \delta\left(x - \theta - \frac{1}{\beta} \sum_{l=1}^k \phi(h_l, b_l)\right) \\ &\times \delta\left(y - D + \frac{1}{\beta} \sum_{l=1}^k \psi(h_l, b_l)\right) e^{\beta x \sum_{\alpha} \sigma^{\alpha} - \beta y \sum_{\alpha} (\sigma^{\alpha})^2}. \end{aligned} \quad (59)$$

A equação acima permite encontrar uma relação auto-consistente para  $W(h, b)$ ,

$$\begin{aligned} W(h, b) &= \sum_{k=0}^{\infty} P(k) \int d\theta P(\theta) \int dD P(D) \int \left[ \prod_{l=1}^k dh_l db_l W(h_l, b_l) \right] \\ &\times \delta\left(h - \theta - \frac{1}{\beta} \sum_{l=1}^k \phi(h_l, b_l)\right) \delta\left(b - D + \frac{1}{\beta} \sum_{l=1}^k \psi(h_l, b_l)\right), \end{aligned} \quad (60)$$

onde as expressões para  $\phi(h_l, b_l)$  e  $\psi(h_l, b_l)$  são encontradas, respectivamente, em (52) e (53). Esta expressão será usada para calcular a energia livre e as outras propriedades termodinâmicas do sistema. As propriedades termodinâmicas desse modelo podem ser calculadas em função da densidade de probabilidade de campos, que pode ser obtida numericamente resolvendo a equação auto-consistente acima. O método para determinar  $W(h, b)$  será descrito na seção 4.1.

## 3.2 Cálculo da energia livre

Uma vez que uma expressão para a densidade de probabilidade de campos  $W(h, b)$  foi obtida na seção anterior, nesta seção a energia livre será expressa em função dessa densidade. O cálculo da energia livre é continuado a partir da equação (41) (reescrita abaixo)

$$f = - \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{\beta n} \text{Extr} \left\{ - \frac{c}{2} \sum_{\vec{\sigma}, \vec{\tau}} P(\vec{\sigma}) P(\vec{\tau}) \left( e^{\frac{\beta J}{c} \vec{\sigma} \cdot \vec{\tau}} - 1 \right) + \right. \\ \left. + \ln \sum_{\vec{\sigma}} \left\langle \exp \left[ \beta \theta \sum_{\alpha} \sigma^{\alpha} - \beta D \sum_{\alpha} (\sigma^{\alpha})^2 + c \sum_{\vec{\tau}} P(\vec{\tau}) \left( e^{\frac{\beta J}{c} \vec{\sigma} \cdot \vec{\tau}} - 1 \right) \right] \right\rangle_{\theta, D} \right\}$$

que será dividida em dois termos. O primeiro termo é chamado de energético

$$f_1(\beta) = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{c}{2\beta n} \left( \sum_{\vec{\sigma}, \vec{\tau}} P(\vec{\sigma}) P(\vec{\tau}) e^{\frac{\beta J}{c} \vec{\sigma} \cdot \vec{\tau}} - 1 \right), \quad (61)$$

e o segundo, de entrópico

$$f_2(\beta) = - \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{\beta n} \ln \sum_{\vec{\sigma}} \left\langle \exp \left[ \beta \theta \sum_{\alpha} \sigma^{\alpha} - \beta D \sum_{\alpha} (\sigma^{\alpha})^2 + c \sum_{\vec{\tau}} P(\vec{\tau}) \left( e^{\frac{\beta J}{c} \vec{\sigma} \cdot \vec{\tau}} - 1 \right) \right] \right\rangle_{\theta, D}. \quad (62)$$

Substituindo o *Ansatz* de simetria de réplicas (43) em  $f_1(\beta)$  é possível expressar esta equação em função de  $W(h, b)$

$$f_1(\beta) = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{c}{2\beta n} \left\{ \sum_{\vec{\sigma}, \vec{\tau}} \int \mathcal{D}W \mathcal{D}W' \frac{e^{\beta h \sum_{\alpha} \sigma^{\alpha} - \beta b \sum_{\alpha} (\sigma^{\alpha})^2 + \beta h' \sum_{\alpha} \tau^{\alpha} - \beta b' \sum_{\alpha} (\tau^{\alpha})^2 + \frac{\beta J}{c} \sum_{\alpha} \sigma^{\alpha} \tau^{\alpha}}}{[2e^{-\beta b} \cosh(\beta h) + 1]^n [2e^{-\beta b'} \cosh(\beta h') + 1]^n} - 1 \right\}, \quad (63)$$

onde  $\mathcal{D}W$  e  $\mathcal{D}W'$  foram definidos como

$$\mathcal{D}W \equiv \left[ \prod_{l=1}^k dh_l db_l W(h_l, b_l) \right]. \quad (64)$$

Como a soma em  $\vec{\sigma}$  e  $\vec{\tau}$  não altera a integral, é possível mudar a posição da soma para logo antes da exponencial. Dado que todos os termos da exponencial contém uma soma em  $\alpha$ , é possível tirá-la da integral e escrevê-la como um produto em  $\alpha$ . Além disso, a soma e o produto podem ser invertidos, de modo que a soma seja em termos de  $\sigma^{\alpha}$  e  $\tau^{\alpha}$

$$f_1(\beta) = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{c}{2\beta n} \left\{ \int \mathcal{D}W \mathcal{D}W' \frac{\prod_{\alpha=1}^n \sum_{\sigma^{\alpha}, \tau^{\alpha}} e^{\beta h \sigma^{\alpha} - \beta b (\sigma^{\alpha})^2 + \beta h' \tau^{\alpha} - \beta b' (\tau^{\alpha})^2 + \frac{\beta J}{c} \sigma^{\alpha} \tau^{\alpha}}}{[2e^{-\beta b} \cosh(\beta h) + 1]^n [2e^{-\beta b'} \cosh(\beta h') + 1]^n} - 1 \right\}. \quad (65)$$

O produto em  $\alpha$  pode ser efetuado e todos os termos que possuíam dependência em  $\alpha$  serão elevados à potência  $n$

$$f_1(\beta) = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{c}{2\beta n} \left\{ \int \mathcal{D}W \mathcal{D}W' \left[ \frac{\sum_{\sigma, \tau} e^{\beta h \sigma - \beta b \sigma^2 + \beta h' \tau - \beta b' \tau^2 + \frac{\beta J}{c} \sigma \tau}}{[2e^{-\beta b} \cosh(\beta h) + 1][2e^{-\beta b'} \cosh(\beta h') + 1]} \right]^n - 1 \right\}. \quad (66)$$

O traço sobre  $\sigma$  e  $\tau$  é efetuado e, rearranjando os termos, obtém-se

$$f_1(\beta) = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{c}{2\beta n} \left\{ \int \mathcal{D}W \mathcal{D}W' \left[ \frac{1 + 2e^{-\beta b} \cosh(\beta h) + 4e^{-\beta b - \beta b'} \cosh(\beta h) \cosh(\beta h') \cosh(\frac{\beta J}{c})}{[2e^{-\beta b} \cosh(\beta h) + 1][2e^{-\beta b'} \cosh(\beta h') + 1]} \right. \right. \\ \left. \left. + \frac{2e^{-\beta b'} \cosh(\beta h') + 4e^{-\beta b - \beta b'} \sinh(\beta h) \sinh(\beta h') \sinh(\frac{\beta J}{c})}{[2e^{-\beta b} \cosh(\beta h) + 1][2e^{-\beta b'} \cosh(\beta h') + 1]} \right]^n - 1 \right\}. \quad (67)$$

Usando a seguinte relação

$$x^n = 1 + n \log(x), \quad |n \log(x)| \ll 1, \quad (68)$$

os termos elevados à potência  $n$  podem ser expandidos no limite em que  $n$  é muito pequeno. No limite  $n \rightarrow 0$ , a equação (67) fica

$$f_1(\beta) = \frac{c}{2\beta} \int \mathcal{D}W \mathcal{D}W' \log F_\beta(h, h', b, b') \quad (69)$$

onde  $F_\beta(h, h', b, b')$  é

$$F_\beta(h, h', b, b') = \frac{4e^{-\beta b - \beta b'} [\cosh(\beta h) \cosh(\beta h') \cosh(\beta J/c) + \sinh(\beta h) \sinh(\beta h') \sinh(\beta J/c)]}{[2e^{-\beta b} \cosh(\beta h) + 1][2e^{-\beta b'} \cosh(\beta h') + 1]} \\ + \frac{2e^{-\beta b} \cosh(\beta h) + 2e^{-\beta b'} \cosh(\beta h') + 1}{[2e^{-\beta b} \cosh(\beta h) + 1][2e^{-\beta b'} \cosh(\beta h') + 1]}, \quad (70)$$

que é igual ao termo energético para o caso sem campo aleatório [83].

Agora, o termo entrópico da energia livre  $f_2(\beta)$  será calculado. A expressão (62) é reescrita como

$$f_2(\beta) = - \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{\beta n} \ln \left\{ \sum_{\vec{\sigma}} \left\langle e^{\beta \theta \sum_\alpha \sigma^\alpha} \right\rangle_\theta \left\langle e^{-\beta D \sum_\alpha (\sigma^\alpha)^2} \right\rangle_D e^{-c} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{c^k}{k!} \left( \sum_{\vec{\tau}} P(\vec{\tau}) e^{\frac{\beta J}{c} \vec{\sigma} \cdot \vec{\tau}} \right)^k \right\}. \quad (71)$$

O *Ansatz* de simetria de réplicas (43) é introduzido em  $P(\tau)$

$$\begin{aligned}
f_2(\beta) = & - \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{\beta n} \ln \left\{ \sum_{\vec{\sigma}} \left\langle e^{\beta \theta \sum_{\alpha} \sigma^{\alpha}} \right\rangle_{\theta} \left\langle e^{-\beta D \sum_{\alpha} (\sigma^{\alpha})^2} \right\rangle_D \sum_{k=0}^{\infty} P_k \int \prod_{l=1}^k \frac{dh_l db_l W(h_l, b_l)}{[2e^{-\beta b_l} \cosh(\beta h_l) + 1]^n} \right. \\
& \times \left. \sum_{\tau_1 \dots \tau_k} \prod_{l=1}^k e^{\beta h_l \sum_{\alpha} \tau^{\alpha l} - \beta b_l \sum_{\alpha} (\tau^{\alpha l})^2} e^{\frac{\beta J}{c} \sum_{\alpha} \sigma^{\alpha} \tau^{\alpha l}} \right\}. \tag{72}
\end{aligned}$$

A soma em  $\tau$  e o produto em  $l$  podem ser invertidos na expressão acima e as somas em  $\alpha$  podem ser tiradas da exponencial e colocadas na frente da soma em  $\tau$  como um produto em  $\alpha$

$$\begin{aligned}
f_2(\beta) = & - \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{\beta n} \ln \left\{ \sum_{\vec{\sigma}} \left\langle e^{\beta \theta \sum_{\alpha} \sigma^{\alpha}} \right\rangle_{\theta} \left\langle e^{-\beta D \sum_{\alpha} (\sigma^{\alpha})^2} \right\rangle_D \sum_{k=0}^{\infty} P_k \right. \\
& \times \left. \int \prod_{l=1}^k \mathcal{D}W_l \prod_{l=1}^k \left( \prod_{\alpha=1}^n \frac{\sum_{\tau^{\alpha l}} e^{\beta h_l \tau^{\alpha l} - \beta b_l (\tau^{\alpha l})^2 + \frac{\beta J}{c} \sigma^{\alpha} \tau^{\alpha l}}{[2e^{-\beta b_l} \cosh(\beta h_l) + 1]^n} \right) \right\}. \tag{73}
\end{aligned}$$

Assim, o traço em  $\tau^{\alpha l}$  pode ser tomado

$$\begin{aligned}
f_2(\beta) = & - \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{\beta n} \ln \left\{ \sum_{\vec{\sigma}} \left\langle e^{\beta \theta \sum_{\alpha} \sigma^{\alpha}} \right\rangle_{\theta} \left\langle e^{-\beta D \sum_{\alpha} (\sigma^{\alpha})^2} \right\rangle_D \sum_{k=0}^{\infty} P_k \right. \\
& \times \left. \int \prod_{l=1}^k \mathcal{D}W_l \prod_{l=1}^k \left( \prod_{\alpha=1}^n \frac{1 + 2e^{-\beta b_l} \cosh(\beta(h_l + J\sigma^{\alpha}/c))}{[2e^{-\beta b_l} \cosh(\beta h_l) + 1]^n} \right) \right\}. \tag{74}
\end{aligned}$$

Reordenando os termos

$$\begin{aligned}
f_2(\beta) = & - \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{\beta n} \ln \left\{ \sum_{k=0}^{\infty} P_k \int \prod_{l=1}^k \mathcal{D}W_l \prod_{\alpha=1}^n \left( \sum_{\sigma^{\alpha}} \left\langle e^{\beta \theta \sigma^{\alpha} - \beta D (\sigma^{\alpha})^2} \right\rangle_{\theta, D} \right. \right. \\
& \times \left. \left. \prod_{l=1}^k \frac{1 + 2e^{-\beta b_l} \cosh(\beta(h_l + J\sigma^{\alpha}/c))}{[2e^{-\beta b_l} \cosh(\beta h_l) + 1]^n} \right) \right\}, \tag{75}
\end{aligned}$$

é possível efetuar o produto em  $\alpha$ , assumindo que as réplicas são não-interagentes

$$f_2(\beta) = -\lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{\beta n} \ln \left\{ \sum_{k=0}^{\infty} P_k \int \prod_{l=1}^k \mathcal{D}W_l \right. \\ \left. \times \left[ \sum_{\sigma^\alpha} \left\langle e^{\beta\theta\sigma^\alpha - \beta D(\sigma^\alpha)^2} \right\rangle_{\theta, D} \prod_{l=1}^k \frac{1 + 2e^{-\beta b_l} \cosh(\beta(h_l + J\sigma^\alpha/c))}{[2e^{-\beta b_l} \cosh(\beta h_l) + 1]} \right]^n \right\}. \quad (76)$$

Dessa forma, é possível tomar o traço em  $\sigma$

$$f_2(\beta) = -\lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{\beta n} \ln \left\{ \sum_{k=0}^{\infty} P_k \int \prod_{l=1}^k \mathcal{D}W_l \right. \\ \times \left[ \left\langle e^{\beta\theta - \beta D} \right\rangle_{\theta, D} \prod_{l=1}^k \frac{1 + 2e^{-\beta b_l} \cosh(\beta(h_l + J/c))}{[2e^{-\beta b_l} \cosh(\beta h_l) + 1]} \right. \\ \left. + \left\langle e^{-\beta\theta - \beta D} \right\rangle_{\theta, D} \prod_{l=1}^k \frac{1 + 2e^{-\beta b_l} \cosh(\beta(h_l - J/c))}{[2e^{-\beta b_l} \cosh(\beta h_l) + 1]} + 1 \right]^n \right\}. \quad (77)$$

A expressão acima pode ser reescrita de uma forma mais concisa

$$f_2(\beta) = -\lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{\beta n} n \ln \left\{ \sum_{k=0}^{\infty} P_k \int \prod_{l=1}^k \mathcal{D}W_l \left[ 1 + \left\langle e^{\beta\theta - \beta D} \prod_{l=1}^k \frac{a_+}{a_0} + e^{-\beta\theta - \beta D} \prod_{l=1}^k \frac{a_-}{a_0} \right\rangle_{\theta, D} \right] \right\}, \quad (78)$$

onde  $a_\sigma$  é dado por  $a_\sigma = 1 + 2e^{-\beta b_l} \cosh(\beta h_l + \sigma\beta J/c)$ .

Agora, é possível tomar o limite  $n \rightarrow 0$  e as médias em  $\theta$  e  $D$

$$f_2(\beta) = -\frac{1}{\beta} \ln \left\{ \sum_{k=0}^{\infty} P_k \int d\theta P_\theta(\theta) dD P_D(D) \int \prod_{l=1}^k \mathcal{D}W_l \right. \\ \left. \times \left[ 1 + e^{\beta\theta - \beta D} \prod_{l=1}^k \frac{a_+}{a_0} + e^{-\beta\theta - \beta D} \prod_{l=1}^k \frac{a_-}{a_0} \right] \right\}, \quad (79)$$

chegando na expressão final para  $f_2(\beta)$ .

## 4 Resultados

Neste capítulo serão apresentados resultados obtidos para o modelo de Blume-Capel com conectividade finita e com o campo local aleatório e campo cristalino local. Primeiro, vamos apresentar o método utilizado para resolver as equações para a distribuição de campos locais e as outras quantidades termodinâmicas desse sistema. Este método consiste em encontrar a distribuição estacionária da população de campos locais através de uma dinâmica de populações e será explicado em detalhes na seção seguinte. Nas seções seguintes serão apresentados os resultados obtidos numericamente para a distribuição de campos e as outras quantidades termodinâmicas, bem como diagramas de fase de temperatura por campo cristalino, que mostram a competição entre a fase F e a fase P.

### 4.1 Solução da equação de ponto de sela

As propriedades termodinâmicas desse sistema podem ser calculadas em termos da distribuição  $W(h, b)$  dos campos locais  $h$  e  $b$ . Essa distribuição é obtida resolvendo numericamente a equação auto-consistente encontrada para  $W(h, b)$ . Para determinar  $W(h, b)$ , um método de dinâmica de populações para uma grande população de campos  $\{h^1, \dots, h^N\}$  e  $\{b^1, \dots, b^N\}$  foi utilizado. Esse procedimento é feito para cada temperatura  $T$ , campo cristalino  $D$  e conectividade  $c$ . O tamanho da população usada foi, na maioria dos casos, 100.000. Entretanto, essa escolha é arbitrária e poderia ser escolhida diferente. Um valor é atribuído para cada campo como condição inicial. Para ilustrar um tipo de solução F e um tipo de solução P, dois tipos de condições iniciais foram utilizadas. Para favorecer um estado com magnetização positiva, um valor aleatório positivo foi atribuído aos campos. Outra condição inicial foi atribuir um valor zero para todas as componentes  $h$  dos campos e um valor aleatório para todas as componentes  $b$ . A seguir, um número  $k$  é escolhido de uma distribuição de Poisson de média  $c$  e  $k$  campos  $(h_l, b_l)$  são escolhidos aleatoriamente da distribuição de campos. Considerando os campos locais, as somas nas funções delta em  $W(h, b)$  (60) são calculadas

$$h = \theta + \frac{1}{\beta} \sum_{l=1}^k \phi(h_l, b_l), \quad (80)$$

$$b = D - \frac{1}{\beta} \sum_{l=1}^k \psi(h_l, b_l), \quad (81)$$

e o resultado é atribuído aleatoriamente a outro campo local  $(h, b)$ . Este procedimento é repetido até que a população de campos convirja para uma distribuição assintótica de  $W(h, b)$ . Foi escolhido que cada campo local seria atualizado 150 vezes. Após alguns testes foi verificado que esse valor é suficiente para a população convergir para uma distribuição estacionária.

Uma vez que a distribuição de campos  $W(h, b)$  foi obtida, determina-se a magnetização

$$m = \int dh db W(h, b) \langle \tau \rangle, \quad (82)$$

e o parâmetro de atividade,

$$r = \int dh db W(h, b) \langle \tau^2 \rangle, \quad (83)$$

que permite saber como está a atividade da rede, isto é, se os spins estão ativos ou inativos. Se a rede está completamente ativa, tem-se  $r = 1$  e se a rede está completamente inativa, isto é, todos os sítios no estado  $\sigma = 0$ , tem-se  $r = 0$ .

As médias  $\langle \tau \rangle$  e  $\langle \tau^2 \rangle$  dependem dos campos  $h$  e  $b$  e são calculadas conforme as seguintes expressões

$$\langle \tau \rangle = \frac{\sinh(\beta h)}{\cosh(\beta h) + e^{\beta b}/2}, \quad (84)$$

e

$$\langle \tau^2 \rangle = \frac{\cosh(\beta h)}{\cosh(\beta h) + e^{\beta b}/2}, \quad (85)$$

que são calculadas através de (43).

O comportamento magnético do sistema é caracterizado conforme as variáveis acima. Se o sistema possui  $m \neq 0$ , e  $r > 0$  indica que há ordenamento magnético F, enquanto  $m = 0$ , e  $r \geq 0$  descreve uma ordem P. O parâmetro de atividade  $r$  pode indicar se há mais de uma fase F ou P, através da diferença de ocupação dos estados. Por exemplo, há um estado P com o parâmetro de atividade zero, o que significa que todos os spins estão no estado local  $\sigma_i = 0$ . Entretanto, também é possível existir um estado P com um valor de atividade finito diferente de zero, que significa que os estados locais não estão todos concentrados em  $\sigma_i = 0$ .

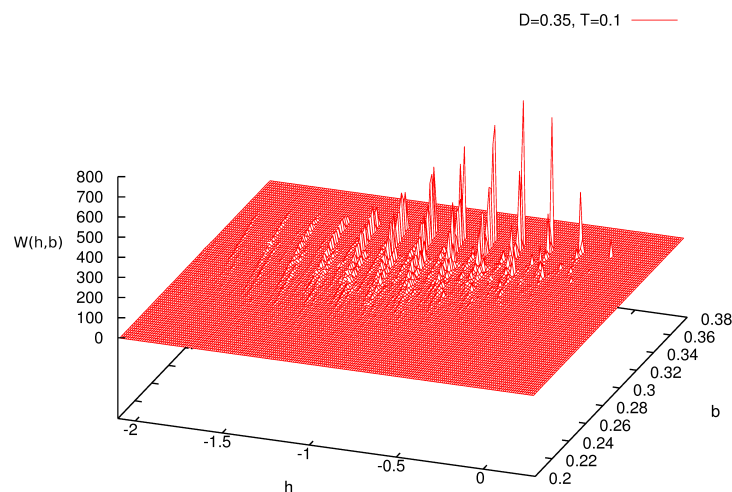
## 4.2 Rede aleatória

A implementação do método para a resolução do ponto de sela requer uma distribuição inicial de  $W(h, b)$ . Essa distribuição inicial foi escolhida da seguinte forma: uma superfície finita no espaço  $(h, b)$  é dividida em  $n \times n$  células, que será ocupada por  $N$  campos. Duas diferentes distribuições de condições iniciais foram usadas nesse trabalho:

- (A) as componentes  $h$  e  $b$  são distribuídas aleatoriamente entre  $-0,5$  e  $0,5$ ,
- (B) os campos  $h$  são definidos como  $h = 0$  e  $b$  é distribuído aleatoriamente entre  $D - 1$  e  $D$ .

Com essa escolha, a condição inicial (A) favorece o estado F e a condição inicial (B) o estado P. Para cada conjunto de parâmetros  $c$ ,  $D$  e  $T$ , a dinâmica de populações é iterada até alcançar uma distribuição estacionária de  $W(h, b)$ . Exemplos das distribuições estacionárias com  $c = 6$ ,  $D = 0,35$  e  $N = 256.000$  podem ser encontrados nas figuras 4.2.1, 4.2.2, 4.2.3, 4.2.4 e 4.2.5. As figuras citadas mostram um gráfico 3D da distribuição de campos  $W(h, b)$  em função dos campos locais  $h$  e  $b$ .

Começando com a condição inicial (A) e  $T = 0,1$ , a dinâmica da população converge para uma distribuição assimétrica ao longo do eixo  $h$ , que pode ser vista na figura 4.2.1. A distribuição apresenta diversos picos, o que é causado pelo baixo ruído



**Figura 4.2.1:** Distribuição de campos locais  $W(h, b)$  estacionária com  $c = 6$ ,  $D = 0,35$ ,  $T = 0,1$  e condição inicial (A).



térmico e pela distribuição discreta da conectividade. Essa distribuição de campos gera uma solução F, com  $m \neq 0$ .

Começando com a condição inicial (B) e  $T = 0,05$ , a população converge para uma distribuição unidimensional, onde somente os campos ao longo do eixo  $h = 0$  permanecem populados, conforme figura 4.2.2. Essa distribuição também é discreta, com uma cauda ao longo do eixo  $h$  e gera uma solução P, com  $m = 0$ ,  $q = 0$  e  $r = 0$ .

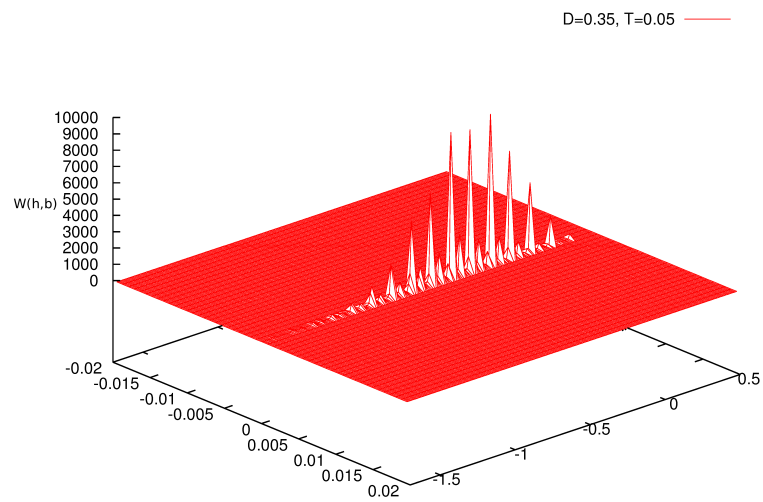
Ao aumentar a temperatura observa-se na figura 4.2.3 que a população com condição inicial (A) permanece F, mas devido ao ruído térmico maior, a distribuição é contínua. Além disso, a distribuição se estreita no eixo  $h$ , mas se estende no eixo  $b$ , resultando em uma diagonal entre os eixos  $h$  e  $b$ . Essa tendência ocorre com o aumento da temperatura, até que ocorra uma transição de fase para o estado P, quando ficará distribuída ao longo do eixo  $h = 0$ . A população com condição inicial (B) e  $T = 0,4$ , que está na figura 4.2.4, continua distribuída ao longo do eixo  $h = 0$ , com uma cauda menor no eixo  $h$ , mas com diversos picos mais próximos. Essa distribuição gera uma solução P, com  $m = 0$ ,  $q = 0$  e  $r = 0$ .

Em alta temperatura, com  $T = 1,5$ , o ruído térmico domina para qualquer condição inicial e o estado de equilíbrio é P para as duas condições iniciais utilizadas. Agora, as duas distribuições apresentam comportamento igual, conforme mostra a figura 4.2.5.

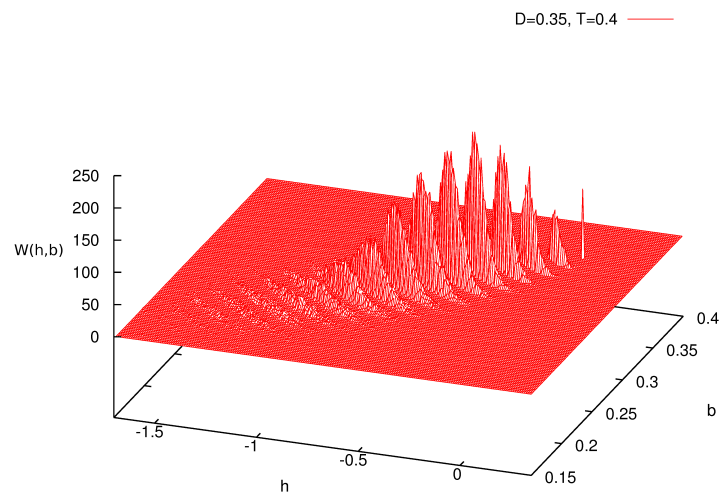
Após obter a distribuição de campos locais  $W(h, b)$  calcula-se os parâmetros de ordem do sistema. Exemplos de magnetização  $m$ , da atividade  $r$  e da energia-livre  $f$  em função do campo cristalino  $D$  são encontrados nas figuras 4.2.6 e 4.2.7.

Na figura 4.2.6 foram usados os valores de conectividade  $c = 4, 5, 8, 10$  e um valor fixo de temperatura  $T = 0,4$ . A transição F-P permanece contínua para essa temperatura e os valores de conectividade escolhidos. Nota-se que conforme o valor de  $c$  diminui, o valor de  $D$  onde as transições F-P ocorrem aumenta. No gráfico da atividade  $r$  observa-se que quando a rede se encontra no estado P, não há atividade, ou seja, todos os spins estão no estado local  $\sigma_i = 0$ . No gráfico da energia livre  $f$  verifica-se, como o esperado, que as curvas são côncavas e contínuas.

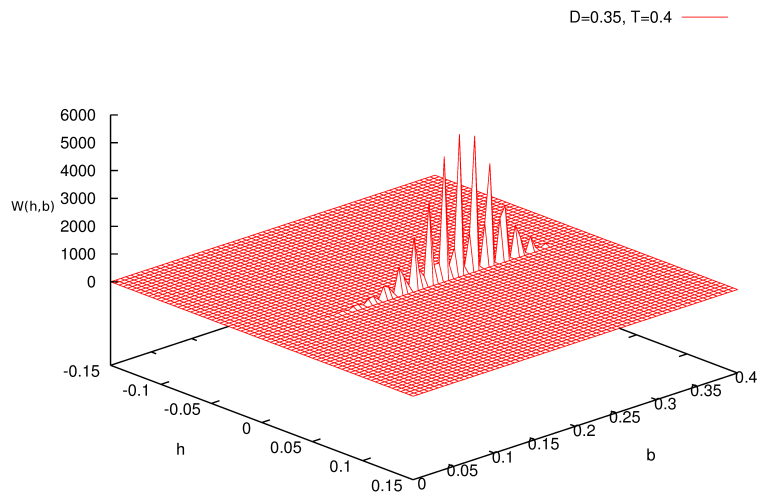
Na figura 4.2.7 foi usado o valor de  $c = 5$  e  $T = 0,1$ . Ao variar o  $D$  com essa escolha de valores de  $c$  e  $T$  ocorre uma transição F-P de primeira ordem. O campo cristalino  $D$  é variado com valores crescentes e decrescentes. A curva de magnetização com  $D$  crescente (linha contínua) possui um dado valor para a transição descontínua e representa uma das espinodais da transição F-P. Entretanto, a curva com  $D$  decrescente permanece com magnetização zero. Seria esperado que houvesse um valor de  $D$  para o qual houve a transição P-F. Esse comportamento pode ser melhor compreendido ao olhar o gráfico da atividade  $r$ . Ao acompanhar a curva com  $D$  crescente, a transição entre



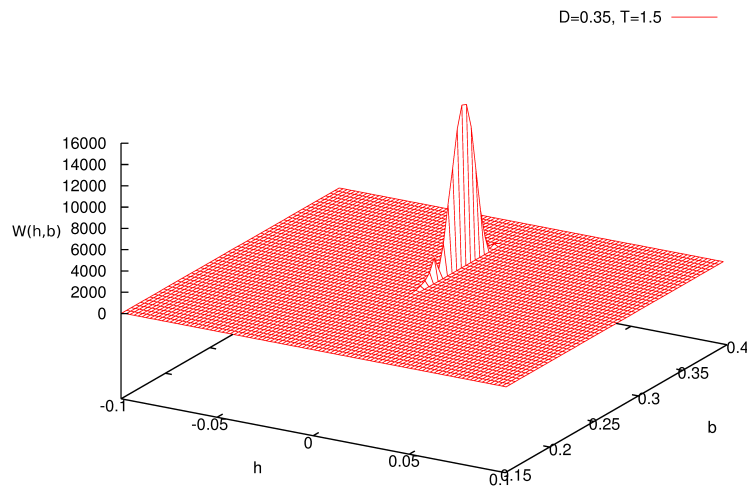
**Figura 4.2.2:** Distribuição de campos locais  $W(h,b)$  com  $c = 6$ ,  $D = 0,35$ ,  $T = 0,05$  e condição inicial (B).



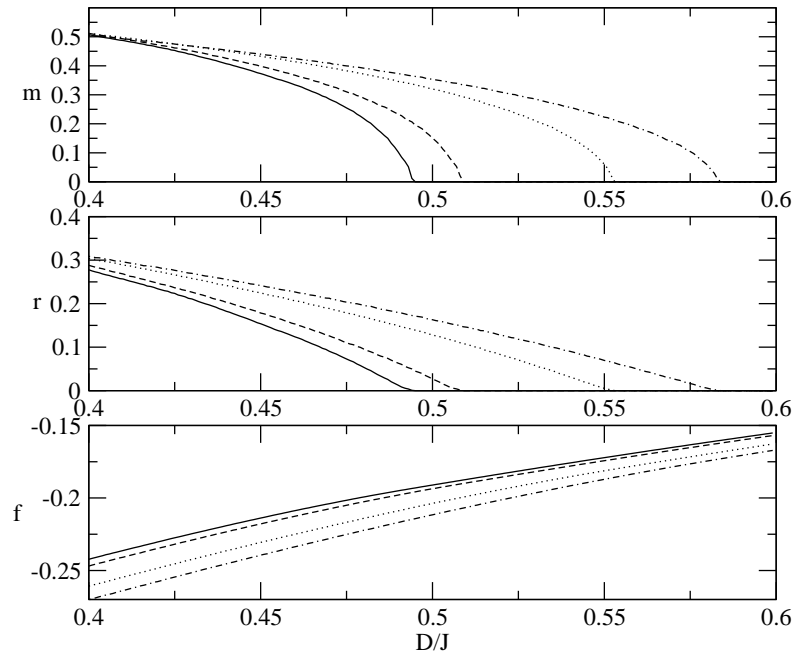
**Figura 4.2.3:** Distribuição de campos locais  $W(h,b)$  estacionária com  $c = 6$ ,  $D = 0,35$ ,  $T = 0,40$  e condição inicial (A).



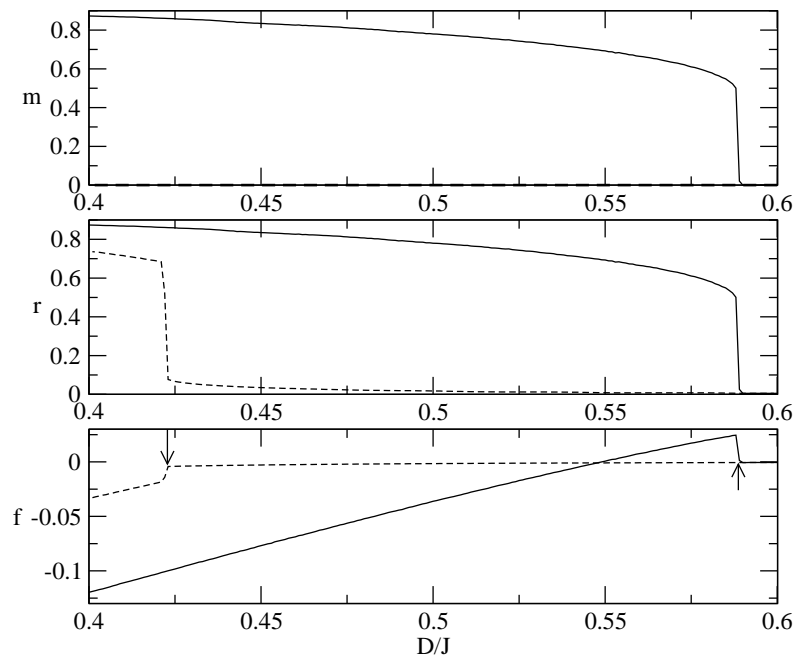
**Figura 4.2.4:** Distribuição de campos locais  $W(h,b)$  estacionária com  $c = 6$ ,  $D = 0,35$ ,  $T = 0,40$  e condição inicial (B).



**Figura 4.2.5:** Distribuição de campos locais  $W(h,b)$  estacionária com  $c = 6$ ,  $D = 0,35$ ,  $T = 1,50$  e condição inicial (B).

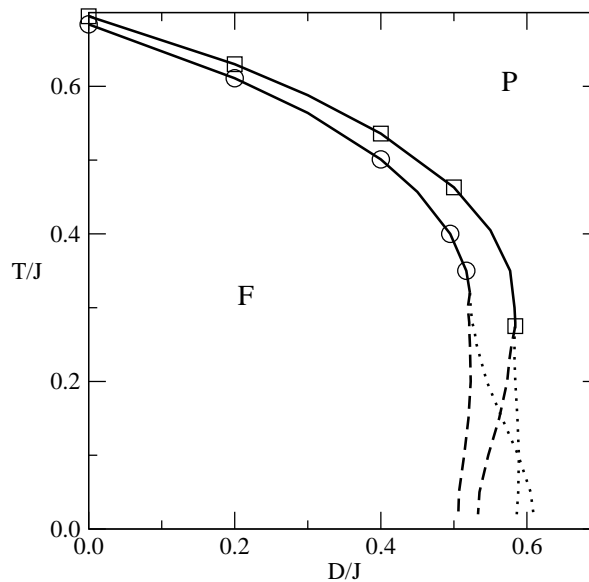


**Figura 4.2.6:** Magnetização  $m$ , parâmetro de ordem de atividade  $r$  e energia livre por sítio  $f$  em função de  $D$  com  $T = 0,4$  e  $c = 10$  (linha contínua),  $c = 8$  (linha tracejada),  $c = 5$  (linha pontilhada) e  $c = 4$  (linha traço-pontilhada).



**Figura 4.2.7:** Magnetização  $m$ , parâmetro de ordem de atividade  $r$  e energia livre por sítio  $f$  em função de  $D$ , para  $c = 5$  e  $T = 0,1$ . As curvas correspondem a  $D$  crescente (linha contínua) e  $D$  decrescente (linha tracejada). As setas indicam onde há transição descontínua.

atividade e inatividade ocorre no mesmo valor de  $D$  onde há a espinodal da transição F-P. Entretanto, ao observar a curva com  $D$  decrescente, observa-se que há uma transição descontínua entre atividade e inatividade onde a magnetização é sempre nula. Dessa forma, acredita-se que há coexistência entre duas fases P, de forma que a curva de magnetização com  $D$  decrescente não pode ser encontrada. Pretende-se investigar em detalhes a existência dessa fase  $P_2$  posteriormente. Ao analisar o gráfico da energia livre  $f$  é possível notar que, onde as diferentes curvas se cruzam, ocorre a transição termodinâmica entre F e P. Nos pontos marcados pelas setas (esquerda/direita), estão os valores de  $D$  para os quais ocorrem as transições F-P (direita) e  $P_1$ - $P_2$  (esquerda). Ao analisar os resultados das figuras 4.2.6 e 4.2.7, observa-se que há uma transição contínua em  $T = 0,4$  e uma transição descontínua em  $T = 0,1$ , de modo que a existência de um ponto tricrítico entre esses valores de  $T$  para  $c = 5$  é confirmada.



**Figura 4.2.8:** Diagrama de fases  $T$  vs.  $D$  com  $c=5$  (curva de cima,  $\square$ ) e  $c=10$  (curva de baixo,  $\circ$ ). Linhas contínuas correspondem à transição F-P contínua, linhas tracejadas à transição F-P descontínua e linhas pontilhadas às espinodais.

O comportamento do modelo BC com conectividade finita pode ser resumido com um diagrama de fase  $T/J$  vs.  $D/J$ , mostrado na figura 4.2.8. É possível observar que há uma fase F em baixas temperaturas e uma fase P em altas temperaturas, separadas por uma transição contínua para um valor crítico de  $D$ , conforme o esperado no modelo BC original [27]. Na região com baixas temperaturas, há pouca agitação térmica na rede, de modo que os sítios tendem a permanecer mais tempo em uma dada orientação, enquanto na região com altas temperaturas, há muita agitação térmica na rede e os sítios mudam rapidamente sua orientação. Assim, é possível concluir que baixas temperaturas

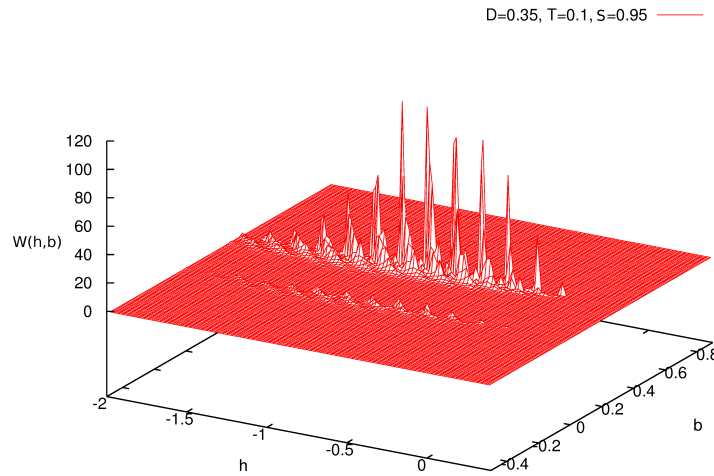
favorecem o ordenamento magnético e altas temperaturas, a desordem. É possível fazer uma análise semelhante para o campo cristalino, sabendo que o campo cristalino positivo favorece o estado inativo da rede. Assim, quanto maior o valor do campo cristalino, mais favorecidos serão os estados inativos da rede, favorecendo, assim, o estado desordenado.

Para os valores de conectividade investigados ( $c \geq 4$ ), o diagrama de fases é composto por uma linha de transição contínua e uma linha de transição de primeira ordem, separadas por um ponto tricrítico. Entretanto, nesse modelo com conectividade finita há uma reentrância no diagrama de fases, ao contrário do modelo com conectividade infinita. Nesse modelo, as transições inversas aparecem naturalmente, sem necessidade de introduzir um parâmetro de vantagem entrópica como em [36, 37]. A conectividade controla o número de conexões entre os spins e também normaliza as interações  $J$ , de modo que aumentar  $c$  significa que há mais conexões por sítio, mas que as interações entre pares de spin são mais fracas. É possível que esse comportamento gere a presença de transições inversas nesse modelo.

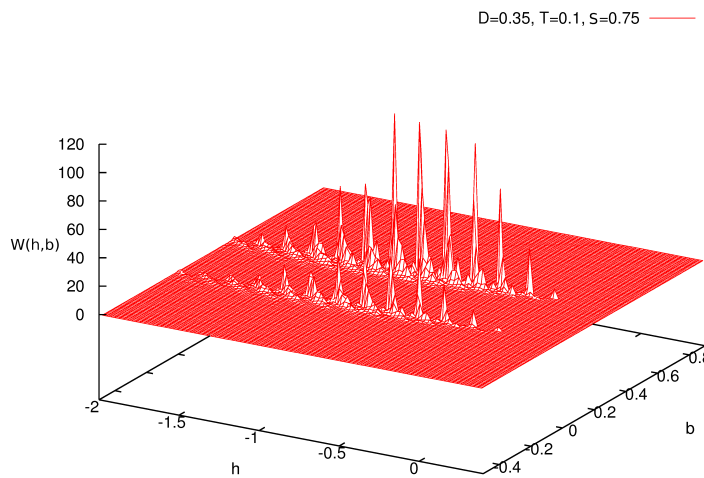
Para  $c = 5$ , há uma leve reentrância na transição contínua e uma transição acentuada na linha da transição termodinâmica da transição de primeira ordem. A espinodal mostrada apresenta um desvio para valores crescentes de  $D$ , lembrando que a outra espinodal foi omitida. Para  $c = 10$ , a conectividade é maior e os efeitos da rede aleatória são brandos. Ainda há uma pequena reentrância na transição termodinâmica e a espinodal apresenta um grande desvio para valores crescentes de  $D$ . O comportamento da rede com  $c = 10$  é semelhante ao modelo BC original, mostrado na figuras 2.1.2, na imagem menor e na figura 2.1.1, levando-se em conta que a linha tracejada nessa figura representa uma espinodal e, não a transição termodinâmica. No limite em que  $c \rightarrow \infty$  espera-se que o modelo BC na rede aleatória seja idêntico ao resolvido em teoria de campo médio.

### 4.3 Campo cristalino aleatório

O modelo BC com campo cristalino aleatório, que é apresentado agora, foi implementado de forma análoga ao descrito na seção anterior. O campo cristalino aleatório assume valores  $D$  ou 0, com probabilidade  $s$  e  $1 - s$ , respectivamente, conforme equação (16). Nesse caso,  $s = 1$  corresponde à rede sem aleatoriedade no campo cristalino, ou seja,  $D$  é fixo. Portanto, valores de  $s$  próximos a 1 possuem pouca aleatoriedade e  $s = 0,5$  corresponde ao caso com maior aleatoriedade. Apenas serão mostrados os resultados com a condição inicial (A), pois independente do valor de  $s$  ( $s \neq 1$ ), a condição inicial (B) permanece sempre na fase P e apresenta distribuição semelhante ao caso sem campo cristalino aleatório. Exemplos das distribuições estacionárias com  $c = 6$ ,



**Figura 4.3.1:** Distribuição de campos locais  $W(h,b)$  estacionária com  $c = 6$ ,  $D = 0,35$ ,  $T = 0,1$ ,  $s = 0,95$  e condição inicial (A).



**Figura 4.3.2:** Distribuição de campos locais  $W(h,b)$  estacionária com  $c = 6$ ,  $D = 0,35$ ,  $T = 0,10$ ,  $s = 0,75$  e condição inicial (A).

$D = 0,35$  e  $N = 256.000$  são encontrados nas figuras 4.3.1, 4.3.2, 4.3.3, 4.3.4. As figuras de distribuição de campos locais ilustram o comportamento da rede, que depois poderá ser melhor analisado nas curvas de magnetização, atividade e energia livre.

Em baixa temperatura  $T = 0,1$  e com pouca aleatoriedade na rede,  $s = 0,95$ , a população tem comportamento semelhante ao caso sem campo aleatório, com a maioria

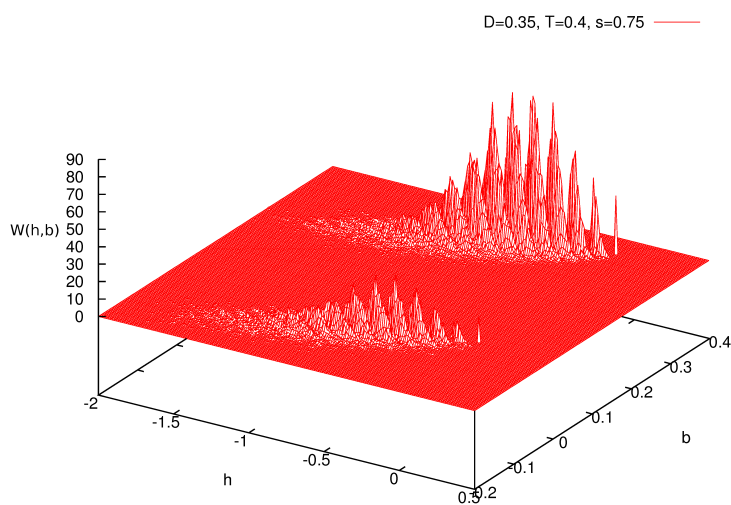
dos estados distribuídos em picos espalhados no eixo  $b = 0,35$ , mas apresenta pequenos picos com o mesmo espaçamento ao longo do eixo  $b = 0$ , conforme pode ser visto na fig. 4.3.1. Esse comportamento reflete a escolha da distribuição bimodal do campo cristalino aleatório: como há pouca aleatoriedade, a maioria dos campos está concentrada em  $D = 0,35$  e alguns campos estão em  $D = 0$ , que corresponde aos valores de campo efetivo  $b = 0,35$  e  $b = 0$ . Com maior aleatoriedade  $s = 0,75$ , o comportamento do campo cristalino aleatório é acentuado. A maioria dos campos ainda está concentrada em  $D = 0,35$ , mas mais campos estão em  $D = 0$ , conforme mostra a figura 4.3.2. Vale lembrar, que os valores positivos de  $D$  favorecem o estado inativo  $\sigma = 0$ . Se uma distribuição bimodal com valores  $(-D, D)$  fosse escolhida, seria esperado um comportamento qualitativo semelhante, mas haveria um favorecimento dos estados ativos  $\sigma = \pm 1$ .

Em uma temperatura mais elevada  $T = 0,4$  e aleatoriedade  $s = 0,75$ , o comportamento em torno de  $D = 0,35$  é semelhante ao caso sem campo cristalino aleatório, figura 4.3.3. O estado da rede é F com duas superfícies espaçadas e distribuídas em uma diagonal entre os eixos  $h$  e  $b$ . A divisão da distribuição de campos locais em duas superfícies é um efeito da escolha da distribuição escolhida para o campo cristalino aleatório. A superfície que está próxima ao eixo  $b = 0$  aparenta ser mais baixa que a outra, ou seja, tem menos estados do que a outra superfície, pela escolha do valor de  $s$ , como ocorrido nos casos anteriores.

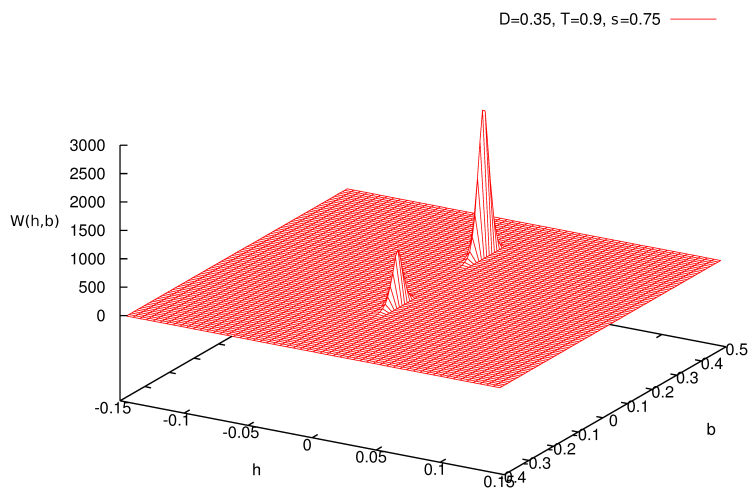
Em  $T = 0,90$  e  $s = 0,75$ , em consequência do elevado ruído térmico não há ordenamento na rede e o estado de equilíbrio é P, independente do valor do campo cristalino aleatório, conforme figura 4.3.4. Neste caso, a distribuição está centrada no eixo  $h = 0$  com duas superfícies contínuas, uma menor, em  $b = 0$  e outra maior, em  $b = 0,35$ . Vale ressaltar que, se essa distribuição tivesse  $s = 0,5$  ambas superfícies teriam a mesma altura, ou seja, o mesmo número de estados, já que o valor de  $D = 0$  seria igualmente provável a  $D = 0,35$ .

O comportamento da rede pode ser melhor compreendido através dos gráficos de magnetização, atividade e energia livre, que serão usados para construir o diagrama de fases da rede. Cada figura da distribuição de campos representa a rede em um único ponto nas curvas de magnetização, atividade e energia livre. A figura 4.3.5 apresenta curvas de magnetização  $m$ , parâmetro de ordem de atividade  $r$  e a energia livre  $f$  para  $c = 4$ ,  $s = 0,9$  e dois valores de temperatura  $T = 0,08$  (círculos) e  $T = 0,12$  (losangos). No gráfico de  $m$ , observa-se que há uma transição descontínua para  $D$  crescente (linhas contínuas) e que não há magnetização para  $D$  decrescente, conforme já havia ocorrido para o caso sem campo cristalino aleatório. No gráfico da atividade  $r$  percebe-se que, mesmo para as curvas com  $D$  crescente, não há um estado totalmente inativo da rede. Ou seja, a fase P tem  $m = 0$ , mas não é ocupada somente por estados



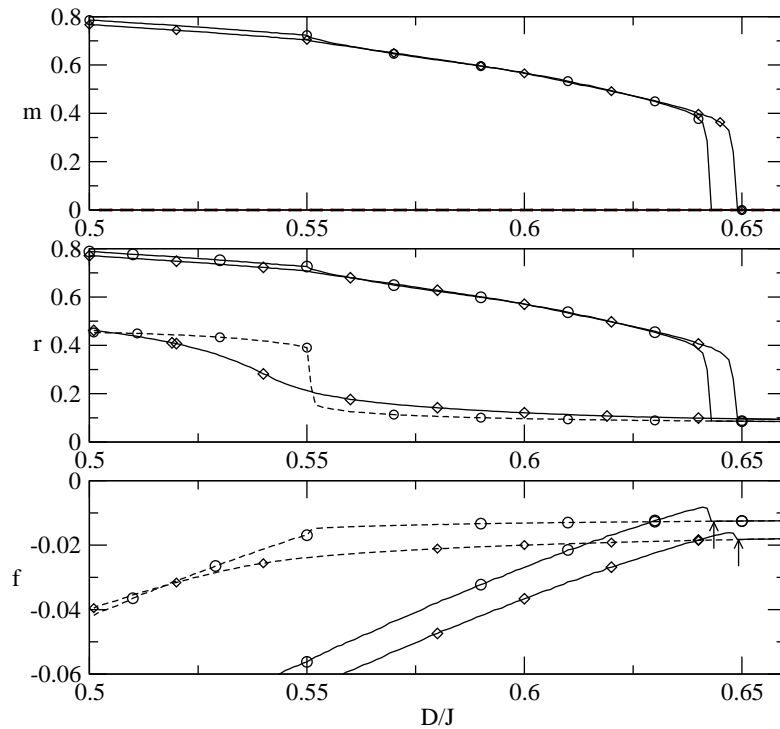


**Figura 4.3.3:** Distribuição de campos locais  $W(h,b)$  estacionária com  $c = 6$ ,  $D = 0,35$ ,  $T = 0,40$ ,  $s = 0,75$  e condição inicial (A).



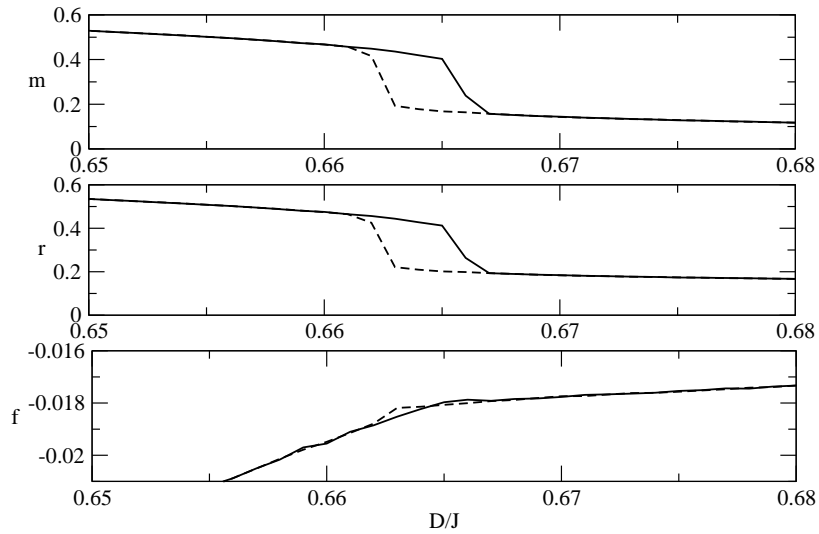
**Figura 4.3.4:** Distribuição de campos locais  $W(h,b)$  estacionária com  $c = 6$ ,  $D = 0,35$ ,  $T = 0,90$ ,  $s = 0,75$  e condição inicial (A).

locais  $\sigma_i = 0$ . Para  $D$  decrescente e  $T = 0,12$  há uma transição contínua entre um estado de mais baixa ocupação para um estado com uma atividade mais alta, enquanto para  $T = 0,08$  a transição entre o estado de baixa e alta atividade é descontínua. Com isso, percebe-se que há duas fases P, uma com baixa atividade e outra com alta atividade e que, dependendo dos valores de  $T$ , a transição entre essas fases pode ser contínua ou descontínua. Assim como no caso sem campos aleatórios, a existência dessas duas fases P e a natureza dessa transição não foram investigadas e não estão indicadas no diagrama de fase. No gráfico da energia livre  $f$  observa-se onde ocorre a transição termodinâmica quando as curvas com  $D$  crescente e decrescente se cruzam. Os pontos marcados pelas setas são os valores do campo cristalino para os quais ocorrem as espinodais.



**Figura 4.3.5:** Magnetização  $m$ , parâmetros de ordem  $r$  e energia livre  $f$  com  $c = 4$ ,  $s = 0,9$  e  $T = 0,08$  (círculos) e  $T = 0,12$  (losangos). Linhas contínuas indicam  $D$  crescente e linhas tracejadas  $D$  decrescente.

A figura 4.3.6 mostra curvas de magnetização  $m$ , atividade  $r$  e energia livre  $f$  para  $c = 4$ ,  $s = 0,85$  e  $T = 0,04$ . Essa figura contém um exemplo de uma transição descontínua entre um estado  $F_1$  e  $F_2$ . Para o valor escolhido de  $s$ , há uma região, em baixas temperaturas, com uma transição descontínua entre duas fases F. Também há uma transição contínua entre  $F_2$ -P, entretanto para melhor visualização da transição entre  $F_1$ - $F_2$ , essa transição não foi mostrada, pois ocorre para valores maiores de  $D$ . Nesse caso, com um valor de  $s$  um pouco menor, observa-se uma histerese entre as curvas



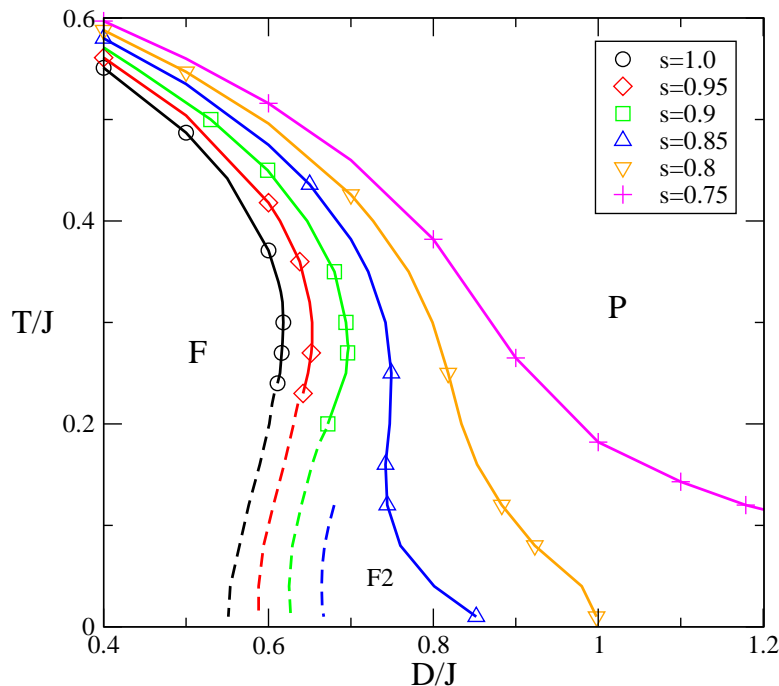
**Figura 4.3.6:** Magnetização  $m$ , parâmetros de ordem  $r$  e energia livre  $f$  com  $c = 4$ ,  $s = 0,85$  e  $T = 0,04$  Linhas contínuas indicam  $D$  crescente e linhas tracejadas  $D$  decrescente.

de magnetização com  $D$  crescente e decrescente. Diminuir o valor de  $s$  significa ter um aumento na aleatoriedade do campo cristalino e um favorecimento dos estados ativos da rede. Esse favorecimento ocorre porque há menos estados com  $D > 0$ , que favorecem o estado inativo da rede, e mais estados com  $D = 0$ . A transição  $F_1$ - $F_2$  também pode ser visualizada na atividade da rede, que também possui uma transição entre dois estados de atividade. A atividade da rede, como no caso anterior, não chega a zero na fase P, convergindo para um valor assintótico de atividade. A transição termodinâmica entre as fases F ocorre no ponto em que as energias livres se cruzam.

A mudança de comportamento da rede com a introdução de um campo cristalino aleatório pode ser melhor analisada em um diagrama de fase  $T/J$  vs.  $D/J$  com vários valores de  $s$ , mostrado na figura 4.3.7. Nesse diagrama é possível observar três tipos de comportamento conforme o parâmetro  $s$  da distribuição bimodal do campo cristalino aleatório é alterado.

O tipo 1 exibe um diagrama de fases com linhas de transição descontínuas e contínuas encontrando-se no ponto tricrítico. Para valores de  $s$  entre  $0,9 < s \leq 1,0$  há um favorecimento da fase F para valores um pouco maiores de  $T$  e  $D$  e a transição inversa é acentuada. Ou seja, mesmo com uma aleatoriedade pequena, o estado F fica mais robusto em relação ao ruído térmico e ao favorecimento do estado inativo pelo campo cristalino. Nesse intervalo de valores de  $s$  ainda há um ponto tricrítico, que decresce em  $T$  com o aumento da desordem do campo aleatório.

O tipo 2 contém uma linha de transição contínua entre F-P e apresenta uma transição descontínua entre duas fases F distintas, que será melhor investigada posteri-



**Figura 4.3.7:** Diagrama de fase  $T/J$  vs.  $D/J$  para  $c = 4$  com diferentes valores de  $s$ .  $\circ$  corresponde a  $s = 1,0$ ,  $\diamond$  a  $s = 0,95$ ,  $\square$  a  $s = 0,9$ ,  $\triangle$  a  $s = 0,85$ ,  $\nabla$  a  $s = 0,8$  e  $+$  a  $s = 0,75$ .

ormente. Para valores de  $s$  entre  $0,85 \leq s < 0,9$  não há transição descontínua entre F e P e não há mais um ponto tricrítico. Não foi investigado para qual valor de  $s$  ocorre o desaparecimento do ponto tricrítico. Em  $s = 0,85$  ocorre uma transição contínua entre F e P, mas uma transição descontínua entre uma fase  $F_1$  e  $F_2$  foi observada. Essa transição foi exposta na figura 4.3.6. O estudo dessa fase  $F_2$  e de suas propriedades, se essa fase permanece para outros valores de  $s$  e onde ocorre a bifurcação entre as diferentes transições, precisa ser investigado.

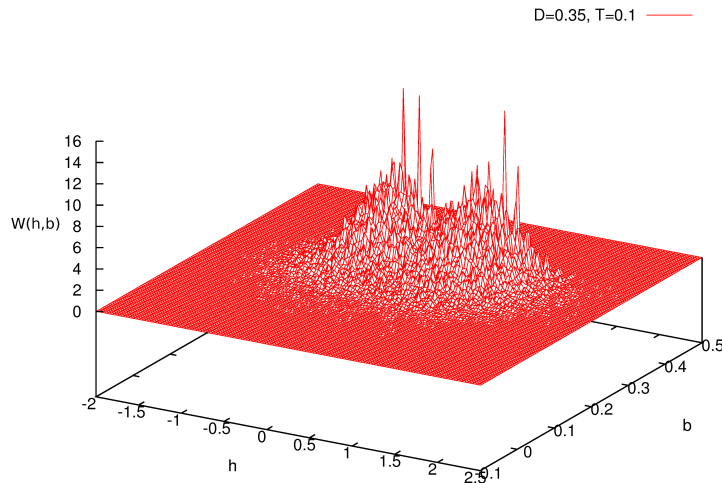
O tipo 3 mostra apenas uma única linha de transição contínua. Para valores de  $s < 0,8$  não há um comportamento reentrante e, aparentemente, existe apenas uma transição contínua entre F e P. Em  $s = 0,8$  não foi encontrado a presença de outra fase F. Em  $s = 0,75$  a fase F é muito robusta em relação ao campo cristalino, existindo mesmo para valores muito altos de  $D$ . Valores de aleatoriedade mais altos ( $0,5 < s < 0,75$ ) não foram analisados, mas conforme o obtido nos artigos [39,47] em teoria de campo médio, é esperado que a transição F-P convirja para um valor assintótico quando  $s = 0,5$ .

Os resultados obtidos estão de acordo com os encontrados na literatura, como por exemplo em Benyoussef *et al* [39] e em Carneiro *et al* [85]. Uma análise mais detalhada para os valores  $0,8 < s < 0,9$  pode trazer mais resultados da transição entre as duas fases F, com esses pode-se verificar para qual intervalo de valores de  $s$  há duas fases F

e se alguns comportamentos encontrados na literatura são oriundos do cálculo resolvido em teoria de campo médio.

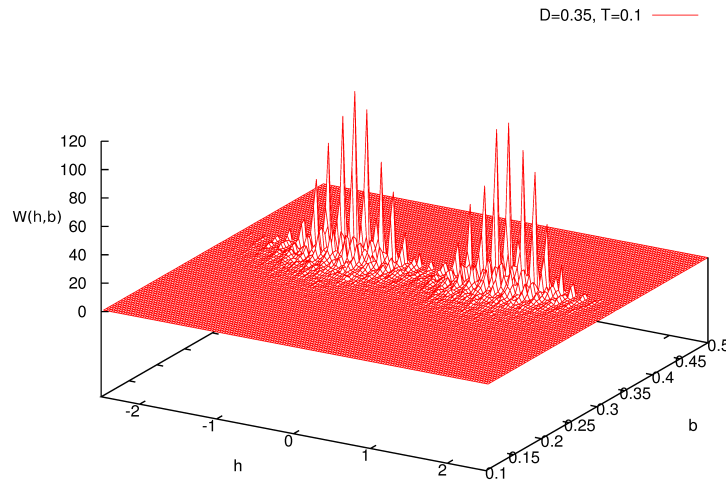
## 4.4 Campo local aleatório

Nesta seção são apresentados os resultados do modelo BC na rede aleatória com um termo de campo aleatório local. O modelo BC com campo local aleatório foi implementado de forma análoga ao descrito na seção 4.2. O campo aleatório local assume uma distribuição bimodal, com os valores do campo  $-\theta$  ou  $\theta$  com probabilidade fixa  $p = 0,5$ , conforme equação (15). Exemplos das distribuições de campos locais com  $c = 6$ ,  $D = 0,35$  e  $N = 64.000$  são encontrados nas figuras 4.4.1 e 4.4.2.



**Figura 4.4.1:** Distribuição de campos locais  $W(h,b)$  estacionária com  $c = 6$ ,  $D = 0,35$ ,  $T = 0,10$ ,  $\theta = 0,5$  e condição inicial (A).

Em baixa temperatura,  $T = 0,1$  com campo aleatório  $\theta = 0,5$  (figura 4.4.1), a distribuição de campos está organizada em duas regiões, que possuem maior concentração de campos. Essa mudança na distribuição de campos é efeito da escolha da forma do campo aleatório, que é bimodal com média zero e pode ser considerado um ruído, levando à quebra de simetria de  $W(h,b)$ . Para  $\theta = 1,0$  (figura 4.4.2), observa-se duas regiões simétricas em relação ao eixo  $h$  na distribuição de campos, em que cada região possui comportamento semelhante ao caso sem campos aleatórios. Essa simetria apresentada pela distribuição de campos, gera um estado P, com  $m = 0$  e  $r \neq 0$ , apesar de apresentar diversos picos, que, no caso sem campos, sugeriria um estado F.

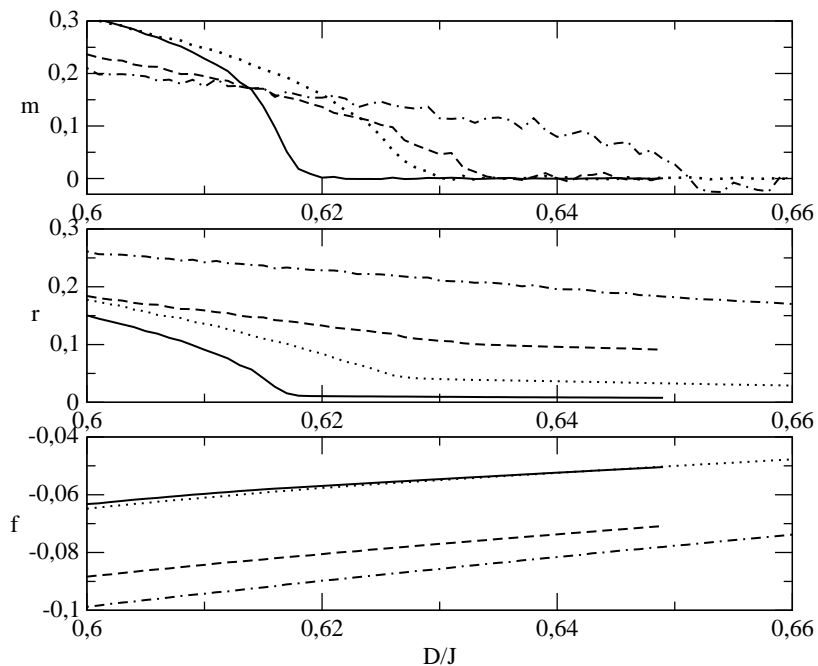


**Figura 4.4.2:** Distribuição de campos locais  $W(h, b)$  estacionária com  $c = 6$ ,  $D = 0,35$ ,  $T = 0,10$ ,  $\theta = 1,0$  e condição inicial (A).

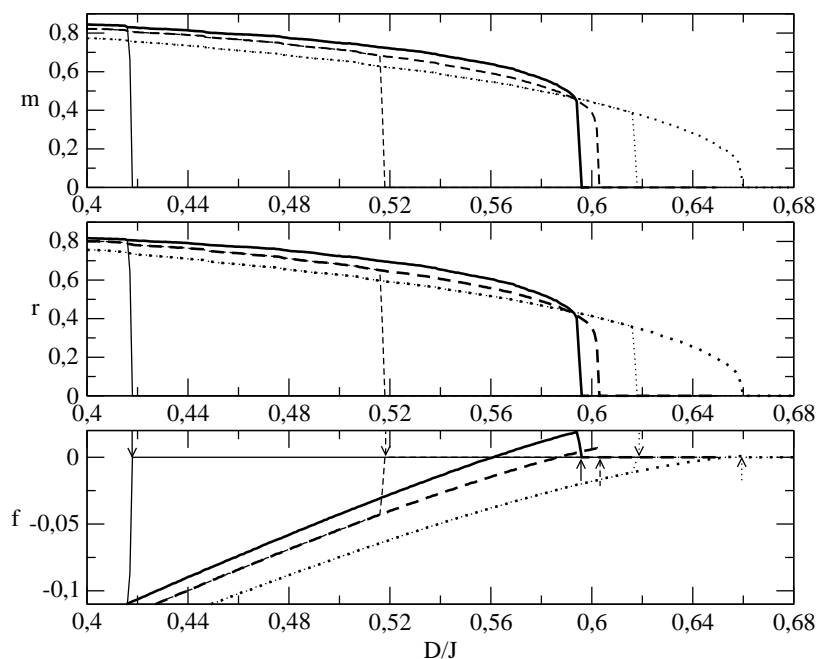
Nas figuras 4.4.3 e 4.4.4 há exemplos de gráficos de magnetização  $m$ , atividade  $r$  e energia livre  $f$  como função do campo cristalino  $D/J$  em altas e baixas temperaturas, respectivamente. Através delas pode-se analisar a dependência das transições F-P com o valor do campo aleatório e da temperatura.

Na figura 4.4.3 são exibidas transições contínuas para  $c = 4$  e diferentes valores de  $\theta$  com alguns valores de temperatura  $T$ . Nota-se que conforme o valor do campo aleatório aumenta, o valor de  $D$  onde as transições F-P ocorrem aumenta. Por favorecer os estados  $\sigma = \pm 1$ , o campo aleatório torna a fase F mais robusta em relação ao campo cristalino. Conforme mencionado anteriormente, o campo aleatório gera uma forma de ruído, que é observado nas curvas de magnetização e acentuado em valores maiores de campo cristalino, como na curva de magnetização com  $\theta = 0,4$  na figura 4.4.3. O campo aleatório influencia a atividade  $r$  da rede, que é maior com o aumento do valor de  $\theta$ , de modo que a atividade não chega a zero na fase P, mesmo para um valor menor de campo, como em  $\theta = 0,1$ .

Na figura 4.4.4 são exibidas transições de primeira ordem para  $c = 4$  e  $T = 0,04$  e diferentes valores de  $\theta$ . Observa-se que, com o aumento do campo aleatório, há um aumento no valor de  $D$  onde as transições F-P ocorrem. A transição descontínua possui uma região de coexistência entre as duas fases, em que a transição termodinâmica ocorre no ponto de intersecção das curvas de energia livre. Essa região diminui com o aumento do campo aleatório, como observado nos gráficos de  $m$  e  $r$ .



**Figura 4.4.3:** Magnetização  $m$ , atividade  $r$  e energia livre  $f$  com  $c = 4$ ,  $\theta = 0,1$ ,  $T = 0,26$  (linha contínua),  $\theta = 0,2$ ,  $T = 0,24$  (linha pontilhada),  $\theta = 0,3$ ,  $T = 0,24$  (linha tracejada) e  $\theta = 0,4$ ,  $T = 0,20$  (linha ponto-tracejada)



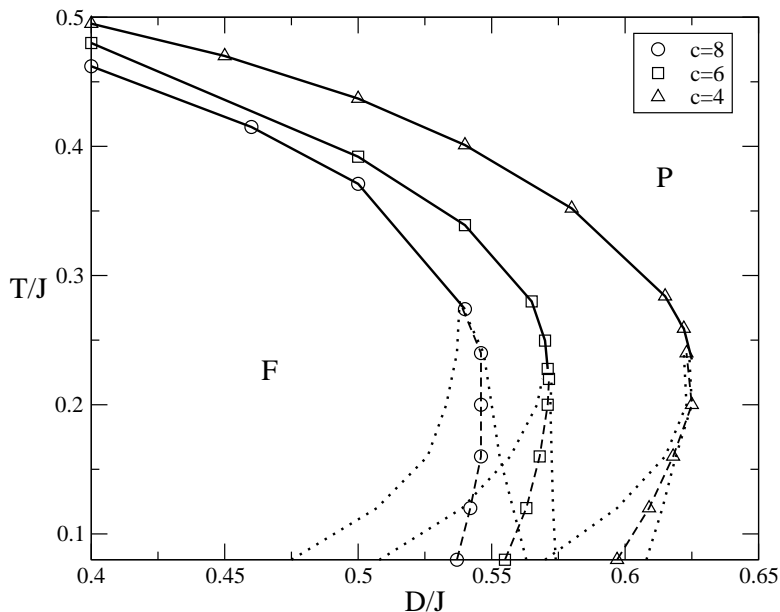
**Figura 4.4.4:** Magnetização  $m$ , atividade  $r$  e energia livre  $f$  com  $c = 4$ ,  $T = 0,04$ ,  $\theta = 0,1$  (linha contínua),  $\theta = 0,2$ , (linha tracejada) e  $\theta = 0,3$ , (linha pontilhada). Linhas grossas correspondem à  $D$  crescente e linhas finas à  $D$  decrescente.

O comportamento das transições exemplificado nas figuras de magnetização anteriores pode ser melhor analisado através dos diagramas de fase, nas figuras 4.4.5 e 4.4.6. Esses diagramas exibem o comportamento do sistema para diferentes valores de conectividade  $c$  e campo aleatório  $\theta$ , sendo que através deles é possível observar como a dependência em  $c$  é alterada pela ação de um campo aleatório.

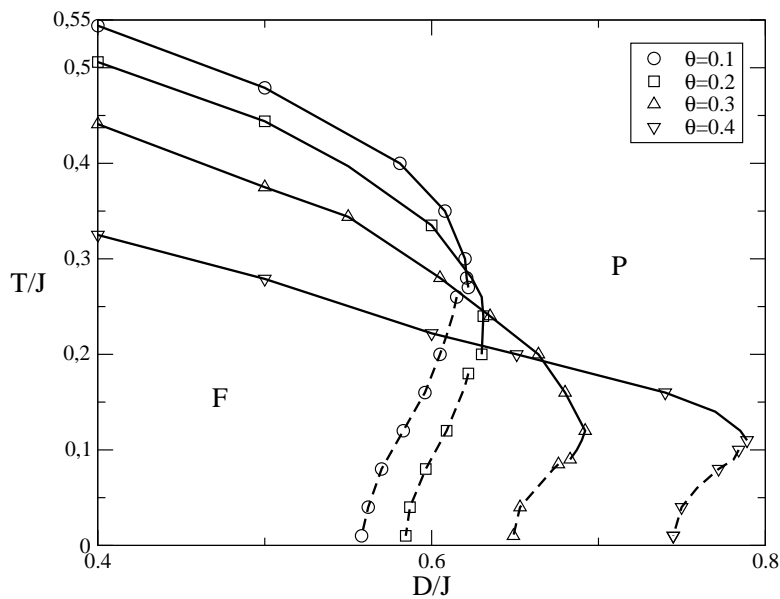
Na figura 4.4.5 há um diagrama de fase  $T/J$  vs.  $D/J$  com diferentes valores de conectividade  $c$  e um valor fixo de campo aleatório  $\theta = 0.2$ . A conectividade  $c$ , mesmo na presença de um campo aleatório, ainda influencia fortemente a posição do ponto tricrítico. O aumento da conectividade reduz o valor de  $D_{\text{crit}}$ , de modo que há um deslocamento dos valores da transição F-P para a esquerda, o que torna a rede menos robusta ao campo cristalino  $D$  e a temperatura  $T$ . A região de coexistência entre as fases F e P cresce com o aumento da conectividade, ao contrário do que acontece com o aumento do campo aleatório, enquanto a reentrância nas transições é diminuída com o aumento da conectividade.

Na figura 4.4.6 há um diagrama de fase  $T/J$  vs.  $D/J$  comparando o comportamento do sistema para diferentes valores de campo aleatório  $\theta$  com um valor fixo de conectividade  $c = 4$ . A introdução do campo aleatório favorece os estados ativos e, em baixas temperaturas, favorece a fase F. Entretanto, esse campo introduz uma forma de ruído na rede, o que prejudica a fase F com o aumento da temperatura. Portanto, a fase F torna-se mais robusta ao campo cristalino, que favorece o estado inativo e a fase P, e menos robusta em relação a temperatura. O aumento do campo aleatório reforça esse efeito na rede e altera o valor do ponto tricrítico, que diminui o valor de  $T_{\text{crit}}$  e aumenta  $D_{\text{crit}}$ . O comportamento das transições é semelhante para  $\theta = 0,1$  e  $\theta = 0,2$ , com transições inversas de primeira ordem. A reentrância nas transições é acentuada para valores de  $\theta > 0.3$ , que além de transições inversas de primeira ordem, exibem transições inversas de segunda ordem. A figura 4.4.6 não exibe as curvas espínodais para melhor observação das transições contínuas e descontínuas, mas conforme já observado na figura 4.4.4, há uma diminuição na região de coexistência entre as fases F-P com o aumento do campo aleatório. As figuras 4.4.5 e 4.4.6 poderiam ter sido exibidas a partir de  $D = 0$ , mas para melhor visualização dos resultados, foram mostradas com o intervalo de campo cristalino  $D$  próximo à região crítica.





**Figura 4.4.5:** Diagrama de fases  $T/J$  vs.  $D/J$  com diferentes valores de conectividade  $c$  para a distribuição de campo aleatório bimodal com  $\theta = 0,2$ .  $\triangle$  correspondem a  $c = 4$ ,  $\square$  a  $c = 6$  e  $\circ$  a  $c = 8$ . Linhas contínuas, transição F-P contínua; linhas tracejadas, transição F-P descontínua; linhas pontilhadas, espinodais da transição descontínua.



**Figura 4.4.6:** Diagrama de fases  $T/J$  vs.  $D/J$  com diferentes valores de  $\theta$  com distribuição bimodal para  $c = 4$ .  $\circ$  correspondem a  $\theta = 0,1$ ,  $\square$  a  $\theta = 0,2$ ,  $\triangle = 0,3$  e  $\nabla = 0,4$ . Linhas contínuas, transição F-P contínua; linhas tracejadas, transição F-P descontínua. As espinodais foram omitidas para maior clareza dos dados.

## 5 Conclusões

Este trabalho estudou o modelo de Blume-Capel na rede aleatória. Os objetivos principais foram investigar a existência de pontos tricríticos, transições inversas e a influência da conectividade e dos campos aleatórios nesses parâmetros. O modelo foi calculado analiticamente até a equação de ponto de sela, que é resolvida numericamente junto com os outros parâmetros de ordem. Os resultados obtidos foram divididos em três casos e analisados através de curvas de magnetização  $m$ , energia livre  $f$  e de diagramas de fase  $T/J$  vs.  $D/J$ . A distribuição de campos locais  $W(h, b)$  foi exibida para alguns valores de temperatura e de campos aleatórios para ilustrar o comportamento desses parâmetros no sistema.

O primeiro caso é o do modelo BC original, que foi exemplificado com dois valores de conectividade no diagrama de fases. Para um valor de conectividade  $c = 5$  observa-se uma reentrância na transição descontínua, o que caracteriza um derretimento inverso de primeira ordem. A reentrância é prejudicada com o aumento da conectividade e o comportamento do sistema se aproxima do modelo BC totalmente conectado. Espera-se que no limite em que  $c \rightarrow \infty$  os resultados sejam idênticos aos resolvidos em teoria de campo médio. Através desses resultados, pode-se observar que a natureza da transição F-P e a posição do ponto tricrítico dependem do valor da conectividade.

A introdução dos campos aleatórios produziu novos comportamentos nos diagramas de fases. Ressalta-se que no caso de campo cristalino aleatório, somente o valor do parâmetro de desordem  $s$  é alterado, enquanto no caso de campo local aleatório somente a amplitude  $\theta$  do campo é variada. O segundo caso caracteriza-se pela introdução de um campo cristalino aleatório. Ao analisar as curvas de magnetização e de atividade, percebe-se que não há atividade nula na fase P. O diagrama de fases exibe diversas curvas para diferentes valores de  $s$ , que podem ser classificados em três comportamentos. O tipo 1 possui linhas de transição contínuas e descontínuas, que são ligadas por um ponto tricrítico. Esse caso ocorre para valores de  $s$  entre  $0,9 < s \leq 1,0$ , demonstra um favorecimento de transição inversa e uma redução de  $T_{\text{crit}}$  com o aumento da desordem  $s$ . O tipo 2 apresenta uma transição contínua entre F e P e uma transição descontínua entre duas fases F, que será melhor investigada posteriormente. A transição descontínua entre F e P e o ponto tricrítico desaparecem para valores de  $s$  entre  $0,85 \leq s < 0,9$ . Em  $s = 0,85$  observou-se uma transição descontínua entre uma fase  $F_1$  e  $F_2$  em baixas temperaturas. As propriedades da fase  $F_2$  serão melhor estudadas posteriormente, como por exemplo onde ocorre a bifurcação entre as diferentes transições e qual a influência de  $s$  nessa transição. O tipo 3 mostra apenas uma única linha de transição contínua

para valores de  $s < 0,8$ . Não há indícios de um comportamento reentrante e, aparentemente, não há a presença de outra fase F em baixas temperaturas. Com o aumento da desordem há um favorecimento da fase F em baixas temperaturas e a transição F-P passa a ocorrer em valores muito altos de  $D$ . Conforme obtido em Benyoussef *et al* [39] e em Santos *et al* [47], espera-se que a transição F-P convirja para um valor assintótico quando  $s = 0,5$ .

O terceiro caso contém a introdução do campo aleatório, que possui uma distribuição bimodal de média zero com igual probabilidade para os estados  $\pm\theta$ . Os diagramas de fase exibem o comportamento do sistema para diferentes valores de conectividade  $c$  e do campo aleatório  $\theta$  e verifica-se a dependência do sistema com os valores de  $c$  e de  $\theta$ . Para os valores de conectividade e campo aleatório analisados, não houve o desaparecimento do ponto tricrítico ou do comportamento reentrante. O campo aleatório favorece os estados ativos em baixas temperaturas e atua como um ruído no sistema, o que favorece a fase F para valores maiores de campo cristalino e a enfraquece em relação a temperatura. A reentrância nas transições é acentuada para valores de  $\theta > 0,3$ , que exibem transições inversas de primeira e segunda ordem. A região de coexistência entre as fases F e P cresce com o aumento da conectividade, mas diminui com o aumento do campo aleatório.

Como perspectivas futuras, pretende-se incluir desordem nas interações nesse modelo para estudar o surgimento de uma fase VS. O modelo BC com interações aleatórias é chamado de Ghatak-Sherrington (GS) [86]. Esse modelo com conectividade infinita possui quebra de simetria de réplicas. Um modelo semelhante com conectividade finita foi estudado por Monasson [21] com os *Ansatz* de simetria de réplicas e de quebra de simetria de réplicas. Ao propor o estudo desse modelo, pretende-se verificar a quebra de simetria e analisar uma proposta de solução de quebra de simetria de réplicas para o modelo GS. Como forma de confirmar os resultados já obtidos pretende-se simular esse sistema com um método de *parallel tempering* de Monte Carlo [87].

## Referências

- [1] MYDOSH, J. A. Spin glasses: redux: an updated experimental/materials survey. *Reports on Progress in Physics*, v. 78, n. 5, p. 052501, 2015.
- [2] MEZARD, M.; PARISI, G.; VIRASORO, M. *Spin glass theory and beyond*. Lecture Notes in Physics Series. World Scientific, 1987.
- [3] BINDER, K.; YOUNG, A. P. Spin glasses: Experimental facts, theoretical concepts, and open questions. *Rev. Mod. Phys.*, v. 58, p. 801–976, Oct 1986.
- [4] EDWARDS, S. F.; ANDERSON, P. W. Theory of spin glasses. *Journal of Physics F: Metal Physics*, v. 5, n. 5, p. 965, 1975.
- [5] FISCHER, K.; HERTZ, J. *Spin glasses*. Cambridge Studies in Magnetism. Cambridge University Press, 1993.
- [6] SHERRINGTON, D.; KIRKPATRICK, S. Solvable model of a spin-glass. *Phys. Rev. Lett.*, v. 35, p. 1792–1796, Dec 1975.
- [7] LISEWSKI, A. M.; LICHTARGE, O. Untangling complex networks: Risk minimization in financial markets through accessible spin glass ground states. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, v. 389, n. 16, p. 3250 – 3253, 2010.
- [8] BURY, T. Statistical pairwise interaction model of stock market. *The European Physical Journal B*, Les Ulis, v. 86, n. 3, 2013.
- [9] JAHAN, M.; AKBARZADEH-T, M.-R.; SHAHTAHAMASSBI, N. A study of phase transitions for convergence analysis of spin glasses: application to portfolio selection problems. *Soft Computing*, v. 17, n. 10, p. 1883–1892, 2013.
- [10] ANGELANI, L.; CONTI, C.; RUOCCO, G.; ZAMPONI, F. Glassy behavior of light. *Phys. Rev. Lett.*, v. 96, p. 065702, Feb 2006.
- [11] GHOFRANIHA, N.; VIOLA, I.; DI MARIA, F.; BARBARELLA, G.; GIGLI, G.; LEUZZI, L.; CONTI, C. Experimental evidence of replica symmetry breaking in random lasers. *NATURE COMMUNICATIONS*, MACMILLAN BUILDING, 4 CRINAN ST, LONDON N1 9XW, ENGLAND, v. 6, JAN 2015.
- [12] CABANA, T.; TOUBOUL, J. Large deviations, dynamics and phase transitions in large stochastic and disordered neural networks. *Journal of Statistical Physics*, New York, v. 153, n. 2, p. 211–269, 2013.

- [13] ADVANI, M.; LAHIRI, S.; GANGULI, S. Statistical mechanics of complex neural systems and high dimensional data. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, v. 2013, n. 03, p. P03014, 2013.
- [14] LASKOWSKI, L.; LASKOWSKA, M.; JELONKIEWICZ, J.; BOULLANGER, A. Spin-glass implementation of a hopfield neural structure. In: RUTKOWSKI, L.; KORYTKOWSKI, M.; SCHERER, R.; TADEUSIEWICZ, R.; ZADEH, L.; ZURADA, J. (Eds.) *Artificial Intelligence and Soft Computing*. Springer International Publishing, 2014. v. 8467 of *Lecture Notes in Computer Science*, p. 89–96.
- [15] ROSSETTI, G.; DIBENEDETTO, D.; CALANDRINI, V.; GIORGETTI, A.; CARLONI, P. Structural predictions of neurobiologically relevant g-protein coupled receptors and intrinsically disordered proteins. *Archives of Biochemistry and Biophysics*, v. 582, p. 91 – 100, 2015. Special issue in computational modeling on biological systems.
- [16] MÉZARD, M.; MONTANARI, A. *Information, physics, and computation*. Oxford Graduate Texts. OUP Oxford, 2009.
- [17] VIANA, L.; BRAY, A. J. Phase diagrams for dilute spin glasses. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, v. 18, n. 15, p. 3037, 1985.
- [18] KANTER, I.; SOMPOLINSKY, H. Mean-field theory of spin-glasses with finite coordination number. *Phys. Rev. Lett.*, v. 58, p. 164–167, Jan 1987.
- [19] MÉZARD, M.; PARISI, G. Mean-field theory of randomly frustrated systems with finite connectivity. *EPL (Europhysics Letters)*, v. 3, n. 10, p. 1067, 1987.
- [20] WONG, K. Y. M.; SHERRINGTON, D. Intensively connected spin glasses: towards a replica-symmetry-breaking solution of the ground state. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, v. 21, n. 8, p. L459, 1988.
- [21] MONASSON, R. Optimization problems and replica symmetry breaking in finite connectivity spin glasses. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, v. 31, n. 2, p. 513, 1998.
- [22] MÉZARD, M.; PARISI, G. The bethe lattice spin glass revisited. *The European Physical Journal B - Condensed Matter and Complex Systems*, v. 20, n. 2, p. 217–233, 2001.
- [23] PARISI, G.; TRIA, F. Spin glasses on Bethe lattices for large coordination number. *European Physical Journal B*, v. 30, n. 4, p. 533–541, DEC 2002.

- [24] BLUME, M. Theory of the first-order magnetic phase change in  $\text{UO}_2$ . *Phys. Rev.*, v. 141, p. 517–524, Jan 1966.
- [25] CAPEL, H. On the possibility of first-order phase transitions in ising systems of triplet ions with zero-field splitting. *Physica*, v. 32, n. 5, p. 966 – 988, 1966.
- [26] BONFIM, O. Mean Field Renormalization-Group Analysis of the Blume-Capel Model. *Physica A*, v. 130, n. 1-2, p. 367–373, 1985.
- [27] BLUME, M.; EMERY, V. J.; GRIFFITHS, R. B. Ising model for the  $\lambda$  transition and phase separation in  $\text{He}^3$ - $\text{He}^4$  mixtures. *Phys. Rev. A*, v. 4, p. 1071–1077, Sep 1971.
- [28] ALCANTARA BONFIM, O. F.; OBCEMEA, C. H. Reentrant behaviour in ising models with biquadratic exchange interaction. *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter*, v. 64, n. 4, p. 469–471.
- [29] PLASCAK, J.; MOREIRA, J.; SÁBARRETO, F. Mean field solution of the general spin blume-capel model. *Physics Letters A*, Amsterdam, v. 173, n. 4–5, p. 360 – 364, 1993.
- [30] NG, W. M.; BARRY, J. H. Cluster-variation method applied in the pair approximation to the  $s = 1$  ising ferromagnet having additional single-ion-type uniaxial anisotropy. *Phys. Rev. B*, v. 17, p. 3675–3683, May 1978.
- [31] SIQUEIRA, A.; FITTIPALDI, I. New effective-field theory for the blume-capel model. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, v. 138, n. 3, p. 592 – 611, 1986.
- [32] COSTABILE, E.; AMAZONAS, M. A.; VIANA, J. R.; DE SOUSA, J. R. Study of the first-order transition in the spin-1 blume-capel model by using effective-field theory. *Physics Letters A*, Amsterdam, v. 376, n. 45, p. 2922 – 2925, 2012.
- [33] JAIN, A. K.; LANDAU, D. P. Monte carlo study of the fcc blume-capel model. *Phys. Rev. B*, v. 22, p. 445–452, Jul 1980.
- [34] BEALE, P. D. Finite-size scaling study of the two-dimensional blume-capel model. *Phys. Rev. B*, v. 33, p. 1717–1720, Feb 1986.
- [35] SAUL, D. M.; WORTIS, M.; STAUFFER, D. Tricritical behavior of the blume-capel model. *Phys. Rev. B*, v. 9, p. 4964–4980, Jun 1974.

- [36] SCHUPPER, N.; SHNERB, N. M. Spin model for inverse melting and inverse glass transition. *Phys. Rev. Lett.*, v. 93, p. 037202, Jul 2004.
- [37] SCHUPPER, N.; SHNERB, N. M. Inverse melting and inverse freezing: A spin model. *Phys. Rev. E*, v. 72, p. 046107, Oct 2005.
- [38] KANEYOSHI, T. The tricritical point in ising models with random bonds and crystal-field interactions. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, v. 19, n. 25, p. L557, 1986.
- [39] BENYOUSSEF, A.; BIAZ, T.; SABER, M.; TOUZANI, M. The spin-1 ising model with a random crystal field: the mean-field solution. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, v. 20, n. 32, p. 5349, 1987.
- [40] CARNEIRO, C. E. I.; HENRIQUES, V. B.; SALINAS, S. R. Comment on the mean-field phase diagram of the spin-1 ising model in a random crystal field. *Journal of Physics: Condensed Matter*, Bristol, v. 1, n. 23, p. 3687, 1989.
- [41] BOCCARA, N.; ELKENZ, A.; SABER, M. Mean-field theory of the spin-1 ising model with a random crystal field. *Journal of Physics: Condensed Matter*, Bristol, v. 1, n. 33, p. 5721, 1989.
- [42] KAUFMAN, M.; KANNER, M. Random-field blume-capel model: Mean-field theory. *Phys. Rev. B*, v. 42, p. 2378–2382, Aug 1990.
- [43] BRANCO, N. S.; BOECHAT, B. M. Real-space renormalization-group study of the two-dimensional blume-capel model with a random crystal field. *Phys. Rev. B*, v. 56, p. 11673–11677, Nov 1997.
- [44] LARA, D.; PLASCAK, J. General spin ising model with diluted and random crystal field in the pair approximation. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, v. 260, n. 3–4, p. 443 – 454, 1998.
- [45] YAN, S.; DENG, L. Thermodynamic properties of bond dilution blume–capel model with random crystal field. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, v. 308, n. 1–4, p. 301 – 312, 2002.
- [46] YÜKSEL, Y.; ÜMIT AKİNCİ; POLAT, H. Critical behavior and phase diagrams of a spin-1 blume–capel model with random crystal field interactions: An effective field theory analysis. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, v. 391, n. 9, p. 2819 – 2832, 2012.

- [47] SANTOS, P.; DA COSTA, F.; DE ARAÚJO, J. Mean-field solution of the blume–capel model under a random crystal field. *Physics Letters A*, Amsterdam, v. 379, n. 22–23, p. 1397 – 1401, 2015.
- [48] CHOWDHURY, D. *Spin glasses and other frustrated systems*. World Scientific, 1986.
- [49] PATHRIA, R.; BEALE, P. *Statistical mechanics*. Elsevier Science, 1996.
- [50] ISING, E. Beitrag zur theorie des ferromagnetismus. *Zeitschrift für Physik*, v. 31, n. 1, p. 253–258, 1925.
- [51] PREIS, T.; VIRNAU, P.; PAUL, W.; SCHNEIDER, J. J. {GPU} accelerated monte carlo simulation of the 2d and 3d ising model. *Journal of Computational Physics*, v. 228, n. 12, p. 4468 – 4477, 2009.
- [52] SETHNA, J. *Statistical mechanics: Entropy, order parameters and complexity*. Oxford Master Series in Physics. OUP Oxford, 2006.
- [53] SCHWABL, F.; BREWER, W. *Statistical mechanics*. Advanced Texts in Physics. Springer Berlin Heidelberg, 2006.
- [54] ONSAGER, L. Crystal statistics. i. a two-dimensional model with an order-disorder transition. *Phys. Rev.*, v. 65, p. 117–149, Feb 1944.
- [55] TALAPOV, A. L.; BLÖTE, H. W. J. The magnetization of the 3d ising model. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, v. 29, n. 17, p. 5727, 1996.
- [56] HERRERO, C. P. Ising model in small-world networks. *Phys. Rev. E*, v. 65, p. 066110, Jun 2002.
- [57] BURKHARDT, T. W. Application of kadanoff’s lower-bound renormalization transformation to the blume–capel model. *Phys. Rev. B*, v. 14, p. 1196–1201, Aug 1976.
- [58] BURKHARDT, T. W.; KNOPS, H. J. F. Renormalization-group results for the blume–capel model in two and three dimensions. *Phys. Rev. B*, v. 15, p. 1602–1605, Feb 1977.
- [59] KAUFMAN, M.; GRIFFITHS, R. B.; YEOMANS, J. M.; FISHER, M. E. Three-component model and tricritical points: A renormalization-group study. two dimensions. *Phys. Rev. B*, v. 23, p. 3448–3459, Apr 1981.



- [60] YEOMANS, J. M.; FISHER, M. E. Three-component model and tricritical points: A renormalization-group study. ii. general dimensions and the three-phase monohe-dron. *Phys. Rev. B*, v. 24, p. 2825–2840, Sep 1981.
- [61] VAN RUTH, N. J. L.; ; RASTOGI, S. Nonlinear changes in specific volume. a route to resolve an entropy crisis. *Macromolecules*, Washington, v. 37, n. 22, p. 8191–8194, 2004.
- [62] MYDOSH, J. Spin glasses — recent experiments and systems. *Journal of Magne-tism and Magnetic Materials*, Amsterdam, v. 7, n. 1, p. 237 – 248, 1978.
- [63] MYDOSH, J. Disordered magnetism and spin glasses. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, Amsterdam, v. 157–158, p. 606 – 610, 1996. European Mag-netic Materials and Applications Conference.
- [64] J.P. Bouchaud; M. Mézard. Self induced quenched disorder: a model for the glass transition. *J. Phys. I France*, v. 4, n. 8, p. 1109–1114, 1994.
- [65] MARINARI, E.; PARISI, G.; RITORT, F. Replica field theory for determinis-tic models: I. binary sequences with low autocorrelation. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, v. 27, n. 23, p. 7615, 1994.
- [66] MARINARI, E.; PARISI, G.; RITORT, F. Replica field theory for deterministic models. ii. a non-random spin glass with glassy behaviour. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, v. 27, n. 23, p. 7647, 1994.
- [67] FRANZ, S.; HERTZ, J. Glassy transition and aging in a model without disorder. *Phys. Rev. Lett.*, v. 74, p. 2114–2117, Mar 1995.
- [68] FRANZ, S.; MéZARD, M.; RICCI-TERSENGHI, F.; WEIGT, M.; ZECCHINA, R. A ferromagnet with a glass transition. *EPL (Europhysics Letters)*, v. 55, n. 4, p. 465, 2001.
- [69] VAN HEMMEN, J. L. Classical spin-glass model. *Phys. Rev. Lett.*, v. 49, p. 409–412, Aug 1982.
- [70] CANNELLA, V.; MYDOSH, J. A. Magnetic ordering in gold-iron alloys. *Phys. Rev. B*, v. 6, p. 4220–4237, Dec 1972.
- [71] DE DOMINICIS, C.; GIARDINA, I. *Random fields and spin glasses: A field theory approach*. Cambridge University Press, 2006.

- [72] DOTSENKO, V. *An introduction to the theory of spin glasses and neural networks*. Notes in Physics Series. World Scientific, 1994.
- [73] DELLAGO, C.; BOLHUIS, P.; GEISSLER, P. L. Transition path sampling. *Advances in chemical physics*, v. 123, n. 1, 2002.
- [74] VAN HEMMEN, J. L.; PALMER, R. G. The thermodynamic limit and the replica method for short-range random systems. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, v. 15, n. 12, p. 3881, 1982.
- [75] DE ALMEIDA, J. R. L.; THOULESS, D. J. Stability of the sherrington-kirkpatrick solution of a spin glass model. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, v. 11, n. 5, p. 983, 1978.
- [76] PARISI, G. A sequence of approximated solutions to the S-K model for spin-glasses. *Journal of Physics A - Mathematical and general*, Dirac House, Temple Back, Bristol, England BS1 6BE, v. 13, n. 4, p. L115–L121, 1980.
- [77] PARISI, G. Toward a mean field theory for spin glasses. *Physics Letters A*, Amsterdam, v. 73, n. 3, p. 203 – 205, 1979.
- [78] PARISI, G. Infinite number of order parameters for spin-glasses. *Phys. Rev. Lett.*, v. 43, p. 1754–1756, Dec 1979.
- [79] MONASSON, R.; ZECCHINA, R. Statistical mechanics of the random  $k$ -satisfiability model. *Phys. Rev. E*, v. 56, p. 1357–1370, Aug 1997.
- [80] ZDEBOROVÁ, L.; KRZKAKALA, F. Phase transitions in the coloring of random graphs. *Phys. Rev. E*, v. 76, p. 031131, Sep 2007.
- [81] LAGE, E. J. S. A new approach to the quenched bond-diluted ising model. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, v. 10, n. 5, p. 701, 1977.
- [82] SARBACH, S. Phase diagrams of random spin systems. i. mean-field theory. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, v. 13, n. 26, p. 5033, 1980.
- [83] ERICHSEN, R.; THEUMANN, W. K. Phase transitions in the three-state ising spin-glass model with finite connectivity. *Phys. Rev. E*, v. 83, p. 061126, Jun 2011.
- [84] ERICHSEN, R.; THEUMANN, W. K.; MAGALHAES, S. G. Inverse melting and inverse freezing in a three-state spin-glass model with finite connectivity. *Phys. Rev. E*, v. 87, p. 012139, Jan 2013.

- 
- [85] CARNEIRO, C. E. I.; HENRIQUES, V. B.; SALINAS, S. R. Mean-field phase diagram of the spin-1 ising ferromagnet in a gaussian random crystal field. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, v. 23, n. 14, p. 3383, 1990.
- [86] GHATAK, S. K.; SHERRINGTON, D. Crystal field effects in a general s ising spin glass. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, v. 10, n. 16, p. 3149, 1977.
- [87] NEWMAN, E.; BARKEMA, G. *Monte carlo methods in statistical physics*. Clarendon Press, 1999.