Matheus Di Giorgio Amorim

Implicações da conectividade finita no modelo de Blume -Capel

Trabalho de conclusão de curso realizado sob orientação do Prof. Dr. Sérgio Garcia Magalhães e apresentado ao Instituto de Física da UFRGS.

Universidade Federal do Rio Grande do Sul

Instituto de Física

Porto Alegre 2018

Sumário

	Resumo	,
	Abstract	,
	Introdução)
1	Conceitos fundamentais	
1.1	Sistemas magnéticos	Ĺ
1.2	Modelo de Ising 11	L
1.3	Modelo de Blume - Capel	2
1.3.1	Teoria de campo médio 12)
2	Modelo de Blume - Capel com campo aleatório)
2.1	Modelo com conectividade finita $\ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots 15$)
3	Resultados	j
3.1	Distribuição $W(h,b)$	<i>;</i>
3.2	Parâmetros de ordem 25	;)
3.3	Transições de fase em baixa conectividade	7
3.3.1	Curvas de magnetização	3
3.3.2	Diagramas de fases θ vs c	;
4	Conclusões)
	Referências	-

Resumo

Neste trabalho é investigado o modelo de Blume - Capel na rede aleatória com um termo de campo externo aleatório e um de campo cristalino aleatório. A conectividade foi introduzida no modelo de forma que é possível limitar o número de conexões que cada spin possui. O objetivo do trabalho foi estudar como as transições de fase se comportam com a presença da conectividade finita. Nesse sentido, observou-se que a transição ferromagnética - ferromagnética / não magnética desaparece para valores de conectividade baixos e que a transição ferromagnética / não magnética - paramagnética altera sua ordem para conectividade baixa. Foram determinados os valores de conectividade a partir dos quais essa mudança de comportamente ocorre e, com eles, diagramas de fase foram produzidos.

Abstract

The present work studies the Blume - Capel model in a random network with a random field term and a random crystal-field term. The connectivity was introduced in the model which permits limitins the number of conections between spins. The main goal of the present work was investigating how phase transitions behave with finite connectivity. In this sense, it was observed that the ferromagnetic - ferromagnetic / nonmagnetic transition disappears for low values of connectivity and the ferromagnetic / nonmagnetic - paramagnetic transition change from being a first-order phase transision to a second-order phase transition. The values of connectivity that these changes occour were determined and with them phase diagrams were produced.

Introdução

Neste trabalho será estudado o modelo de Blume-Capel na rede aleatória, isto é, um modelo de spins localizados em uma rede sem topologia definida. Desse fato, decorre que os spins não serão conectados com seus vizinhos, como no caso de uma rede quadrada, mas sim de forma aleatória pela rede com um número médio de conexões por spin c, denominada conectividade. O hamiltoniano do sistema é dado pelo termo devido à interações de spin de Ising somado ao termo devido ao acoplamento com um campo externo aleatório e a um campo cristalino aleatório. Os spins podem assumir valores $\sigma = 0, \pm 1$. Com campo cristalino é possível controlar a ocupação dos estados inativos ($\sigma = 0$).

Este modelo foi extensivamente estudado e possui na literatura diversos resultados a partir de abordagens como aproximação de campo médio (KAUFMAN; KANNER, 1990). Os resultados obtidos através da teoria de campo médio são calculados considerando interações de longo alcance e conectividade infinita entre os spins. Por isso, surge a motivação do trabalho em investigar como o modelo se comporta para valores de conectividade finitos.

O objetivo deste trabalho torna-se desenvolver o modelo introduzindo a conectividade finita no problema e analisar as transições de fase para valores baixos de conectividade. Espera-se recuperar os resultados já obtidos por teoria de campo médio para valores finitos de conectividade altos e observar, em baixa conectividade, o comportamento das transições de fase para que possa se determinar o que é artefato da teoria de campo médio comparando os resultados.

1 Conceitos fundamentais

Nesse capítulo será introduzida a ideia geral de sistemas magnéticos, apresentar o modelo de Ising e o modelo de Blume - Capel. Para cada modelo, resultados importantes serão citados a fim de criar uma ponto de referência para os desenvolvidos nos próximos capítulos.

1.1 Sistemas magnéticos

Alguns materiais conhecidos como ferromagnéticos, constituídos, por exemplo, de ferro, cobalto e níquel, possuem magnetização espontânea à temperatura ambiente. Contudo, se forem aquecidos até uma temperatura crítica T_c perdem a imantação natural e passam a ser paramagnéticos, ou seja, deixam de apresentar magnetização. Esse fenômeno pode ser visto como a competição entre duas escalas de energia, a proveniente de interações de troca entre os spins e a devido às excitações térmicas. Acima da temperatura crítica, as flutuações térmicas quebram a orientação em uma direção preferencial dos spins fazendo com que os spins oscilem e o sistema tenha uma magnetização resultante nula.

Os modelos a serem apresentados aqui são para o caso de magnetismo isolante, que consideram um sistema de spins em uma rede cristalina em posições bem localizadas.

1.2 Modelo de Ising

O modelo de Ising possui hamiltoniano dado por

$$H = -\sum_{\langle i,j \rangle} J_{i,j} \sigma_i \sigma_j - h \sum_{i=0}^N \sigma_i \quad , \qquad (1.1)$$

com $\sigma = \{\pm 1\}$ e o parâmetro $J_{i,j}$ representa a interação de troca entre o par $i \in j$. Se $J_{i,j} > 0$ a contribuição para a energia desse par i, j é dada por $-J_{i,j}\sigma_i\sigma_j$, logo o alinhamento de dois spins na mesma direção é favorecido e caracteriza uma interação ferromagnética. O caso antiferromagnético, $J_{i,j} < 0$, cada par contribui com $J_{i,j}\sigma_i\sigma_j$ para a energia, favorecendo o alinhamento anti-paralelo entre os spins. Como esse parâmetro de troca pode variar para os diferentes pares do sistema, pode ocorrer de que um sítio não consiga satisfazer simultaneamente a direção favorecida de todos os seus vizinhos causando frustração.

O primeiro termo é proveniente da interação entre spins no sistema regida pelo termo de troca $J_{i,j}$, a soma $\langle i, j \rangle$ representa a soma da interação de todos os spins com os primeiros vizinhos, isto é, em uma rede 1D considera-se como primeiros vizinhos de um sítio s_n os sítios s_{n-1} e s_{n+1} . O segundo termo provém da contribuição na energia do acoplamento entre um campo externo h e os spins.

O modelo de Ising em uma cadeia unidimensional com condições de contorno periódicas possui solução analítica, porém não apresenta transição de fase. O caso bidimensional foi resolvido por Onsager e apresenta transição de fase na temperatura $T_c = 2.269185$ (ONSAGER, 1944).

1.3 Modelo de Blume - Capel

O modelo de Blume - Capel pode ser considerado como uma extensão do modelo de Ising para spin-1 pois considera a mesma interação entre spins ao mesmo tempo que introduz um termo de campo cristalino D que age somente nos campos ativos ($\sigma \neq 0$). Seja o hamiltoniano do modelo de Blume - Capel dado por

$$H = -\sum_{\langle i,j \rangle} J_{i,j} \sigma_i \sigma_j + D \sum_{i=0}^N \sigma_i^2 \quad , \qquad (1.2)$$

 $\operatorname{com} \sigma = \{0, \pm 1\}.$

Se for observado o caso particular do campo cristalino $D \to \infty$ os sítios inativos são favorecidos fazendo com que uma fase não magnética apareça. Para $D \to -\infty$ os sítios inativos são desfavorecidos, recuperando o caso de dois estados. Com isso, ao controlar o campo cristalino D é possível controlar a ocupação dos sítios inativos no sistema.

1.3.1 Teoria de campo médio

O modelo de Blume-Capel com campo aleatório já foi resolvido através da técnica de campo médio (KAUFMAN; KANNER, 1990). O hamiltoniano resolvido difere do apresentado anteriormente pela adição do termo de campo aleatório

$$H = -\frac{1}{2N} \sum_{i,j} \sigma_i \sigma_j + D \sum_{i=0}^N \sigma_i^2 - \sum_i H_i \sigma_i \quad , \qquad (1.3)$$

com $\sigma = \{0, \pm 1\}$ e o campo H_i segue a distribuição bimodal

$$p(H_i) = \frac{1}{2} [\delta(H_i - H) + \delta(H_i + H)] \quad . \tag{1.4}$$

A solução do problema via teoria de campo médio resulta no diagrama de fases apresentado na figura 1. As fases presentes são ferromagnética (F), paramagnética (P) usuais junto com a presença de uma fase não-magnética (NM) constituída puramente de sítios inativos e caracterizada pela ocupação Q = 0, o que era esperado para valores altos de D, e surge uma fase mista (F/NM) caracterizada por magnetização $m = \pm \frac{1}{2}$ e ocupação $Q = \frac{1}{2}$. Os parâmetros de ordem m e Q serão apresentados e melhor trabalhados no capítulo 4.



Figura 1: Diagrama de fases obtido da solução através de teoria de campo médio. Extraído de Miron Kaufman e Michael Kanner (KAUFMAN; KANNER, 1990).

A aproximação de campo médio consiste em uma simplificação no termo de interação entre spins do hamiltoniano do modelo, de tal forma que substitui-se a interação de cada spin com os seus vizinhos por um campo efetivo a fim de transformar um problema de muitos corpos em um problema de um único corpo.

2 Modelo de Blume - Capel com campo aleatório

O diagrama de fases apresentado no capítulo anterior dado pela figura 1, obtido a partir da teoria de campo médio é produto das aproximações feitas na resolução do problema. Problemas realistas diferem do campo médio pois esse apresenta conectividade infinita, ou seja, cada sítio está conectado com todos os outros e não considera a estrutura geométrica do problema. Neste capítulo, o modelo será resolvido com conectividade finita. De forma a admitir que a interação de cada spin seja dada apenas com um número finito de vizinhos juntamente à presença de um campo magnético externo aleatório e um campo cristalino aleatório. Como se quer observar os efeitos da conectividade no problema, os spins serão conectados de forma independente da topologia de uma rede, ou seja, a conexão é feita aleatoriamente entre os todos os spins.

2.1 Modelo com conectividade finita

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

$$H(\vec{\sigma}) = -\frac{1}{c} \sum_{\langle i,j \rangle} c_{i,j} J_{i,j} \sigma_i \sigma_j - \sum_{i=0}^N \theta_i \sigma_i + \sum_{i=0}^N D_i \sigma_i^2 \quad , \qquad (2.1)$$

com σ_i podendo assumir os valores $0, \pm 1$ e a soma no primeiro termo é realizada sobre todos os pares distintos de spin. Os coeficientes c_{ij} assumem o valor 1 nos casos dos sítios $i \in j$ estarem conectados, contribuindo na soma, ou assume o valor 0 caso os sítios $i \in$ j não estejam conectados. Os coeficientes c_{ij} são dados de acordo com a distribuição de probabilidade

$$p(c_{ij}) = \frac{c}{N} \delta_{c_{ij},1} + \left(1 - \frac{c}{N}\right) \delta_{c_{ij},0} \quad , \tag{2.2}$$

a conectividade $c = \frac{1}{N} \sum_{i,j} c_{ij}$ é o número médio de conexões por sítio.

No presente trabalho estamos interessados nas implicações da conectividade finita no modelo. Por tanto, para eliminar efeitos de desordem a interação de troca J_{ij} será uma constante para todos os pares de sítios i, j, assim, $J_{ij} = J$. Os campos aleatórios θ_i, D_i seguem as distribuições bimodais

$$p(\theta_i) = (1-p)\delta(\theta_i - \theta_0) + p\delta(\theta_i + \theta_0) \quad , \tag{2.3}$$

$$p(D_i) = (1-s)\delta(D_i) + s\delta(D_i + D)$$
 . (2.4)

A termodinâmica do sistema é dada pela energia livre

$$f = \lim_{N \to \infty} \frac{1}{\beta N} \langle \ln Z \rangle \quad , \tag{2.5}$$

com

$$Z = \sum_{\vec{\sigma}} e^{-\beta H(\vec{\sigma})} \tag{2.6}$$

sendo a função partição. Cada vetor $\vec{\sigma}$ possui N componentes correspondendo ao valor de spin em cada um dos sítios e a soma é feita sobre todas os possíveis microestados de $\vec{\sigma}$.

Para realizar o cálculo da média do logaritmo na equação 2.5, faz-se valer da identidade de réplicas que permite remover o logaritmo da média e computar a média sobre a função de partição replicada (ERICHSEN; LOPES; MAGALHAES, 2017). Com isso, a energia livre é dada por

$$f = \lim_{n \to 0} \lim_{N \to \infty} \frac{1}{\beta n N} \ln \langle Z^n \rangle \quad .$$
 (2.7)

Nesse método, cria-se n réplicas não interagentes do sistema sendo cada uma dessas réplicas idênticas à original. Então, a função partição elevada na potência n é dada por

$$Z^n = \prod_{\alpha=1}^n Z_\alpha \quad , \tag{2.8}$$

com

$$Z_{\alpha} = \sum_{\vec{\sigma}} \left\{ \exp\left(\frac{\beta}{c} \sum_{i < j} c_{ij} J \sigma_i^{\alpha} \sigma_j^{\alpha}\right) \exp\left(\beta \sum_{i=0}^N \theta_i \sigma_i^{\alpha}\right) \exp\left(-\beta \sum_{i=0}^N D_i (\sigma_i^{\alpha})^2\right) \right\}$$
(2.9)

sendo a função partição da réplica α , σ_i^{α} indica o estado do spin do sítio *i* na réplica α .

Substituindo a equação 2.9 em 2.8, obtêm-se a expressão explicita para

$$Z^{n} = \prod_{\alpha=1}^{n} \left[\sum_{\vec{\sigma}} \left\{ \exp\left(\frac{\beta}{c} \sum_{i < j} c_{ij} J \sigma_{i}^{\alpha} \sigma_{j}^{\alpha}\right) \exp\left(\beta \sum_{i=0}^{N} \theta_{i} \sigma_{i}^{\alpha}\right) \exp\left(-\beta \sum_{i=0}^{N} D_{i} (\sigma_{i}^{\alpha})^{2}\right) \right\} \right] ,$$
(2.10)

na qual foi introduzindo o índice α para denotar as configurações de spin na réplica α . Aqui, tem-se o produto entre as somas das possíveis configurações de spin de cada réplica. Logo, ao realizar esse produto temos a soma do produto de n parcelas, cada uma proveniente de uma réplica, com cada parcela apresentando um microestado. Com isso, é possível reescrever a equação 2.10 da forma

$$Z^{n} = \sum_{\vec{\sigma}^{1},\dots,\vec{\sigma}^{n}} \left[\prod_{\alpha=1}^{n} \left\{ \exp\left(\frac{\beta}{c} \sum_{i < j} c_{ij} J \sigma_{i}^{\alpha} \sigma_{j}^{\alpha}\right) \exp\left(\beta \sum_{i=0}^{N} \theta_{i} \sigma_{i}^{\alpha}\right) \exp\left(-\beta \sum_{i=0}^{N} D_{i} (\sigma_{i}^{\alpha})^{2}\right) \right\} \right].$$
(2.11)

Passando o produto para dentro das exponenciais resulta em

$$Z^{n} = \sum_{\vec{\sigma}^{1},\dots,\vec{\sigma}^{n}} \left[\prod_{i < j} \left\{ \exp\left(\frac{\beta}{c} c_{ij} J \sum_{\alpha=1}^{n} \sigma_{i}^{\alpha} \sigma_{j}^{\alpha}\right) \right\} \exp\left(\beta \sum_{i,\alpha} \theta_{i} \sigma_{i}^{\alpha}\right) \exp\left(-\beta \sum_{i,\alpha} D_{i} (\sigma_{i}^{\alpha})^{2}\right) \right].$$
(2.12)

Assim, a média da expressão de \mathbb{Z}^n resulta em

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

$$(2.13)$$

Utilizando a distribuição de probabilidade dada pela equação 2.2, toma-se a média em c_{ij} resultando em

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

$$(2.14)$$

Utilizando o limite termodinâmico com $N \to \infty$, tem-se que $\frac{c}{N} \to 0$ uma vez que c assume valores finitos. Com isso, pode-se utilizar a aproximação $1 + x \approx e^x$ para reescrever a expressão de $\langle Z^n \rangle$ como

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

$$(2.15)$$

Observa-se que é possível escrever

$$\langle Z^{n} \rangle = \sum_{\vec{\sigma}^{1},...,\vec{\sigma}^{n}} \left\langle \exp\left[\sum_{i < j} \left\{ \frac{c}{N} \left(e^{\frac{\beta}{c}J\sum_{\alpha=1}^{n} \sigma_{i}^{\alpha}\sigma_{j}^{\alpha}} - 1 \right) \right\} + \beta \sum_{i,\alpha} \theta_{i}\sigma_{i}^{\alpha} - \beta \sum_{i,\alpha} D_{i}(\sigma_{i}^{\alpha})^{2} \right] \right\rangle_{\{D_{i}\},\{\theta_{i}\}},$$

$$(2.16)$$

pois os termos em uma média não dependem dos termos da outra média.

Como c é finito, a expansão da exponencial interna, $e^{\frac{\beta}{c}J\sum_{\alpha=1}^{n}\sigma_{i}^{\alpha}\sigma_{j}^{\alpha}}$, em séries de potência não pode ser feita como no caso de conectividade infinita. Seja a identidade (ERICHSEN; THEUMANN, 2011)

$$1 = \sum_{\vec{\sigma}} \left[\prod_{\alpha=1}^{n} \delta_{\sigma_{\alpha}, \sigma_{i}^{\alpha}} \right] \equiv \sum_{\vec{\sigma}} \delta_{\vec{\sigma}, \vec{\sigma_{i}}} \quad , \qquad (2.17)$$

com $\vec{\sigma}$ um vetor de *n* componentes do espaço de réplicas e $\vec{\sigma_i}$ um vetor representando o estado de *n* réplicas no estado *i*. Utilizando a identidade 2.17 em 2.16, tem-se

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

$$(2.18)$$

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

$$(2.19)$$

com $\vec{\tau}$ um vetor auxiliar de *n* componentes do espaço de réplicas. Agora, uma função de ordem $P(\vec{\sigma}) = (1/N) \sum_i \delta_{\vec{\sigma},\vec{\sigma_i}}$ será introduzida através da identidade (ERICHSEN; THEUMANN, 2011)

$$\int \prod_{\vec{\sigma}} [dP(\vec{\sigma})d\hat{P}(\vec{\sigma})] \exp\left\{\sum_{\vec{\sigma}} \hat{P}(\vec{\sigma})[P(\vec{\sigma}) - \frac{1}{N}\sum_{i} \delta_{\vec{\sigma},\vec{\sigma_i}}]\right\} = 1 \quad , \tag{2.20}$$

 $P(\vec{\sigma})$ representa a fração de sítios com configuração da réplica $\vec{\sigma}$. Voltando para a função de partição e introduzindo a identidade 2.20 em 2.19

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

$$(2.21)$$

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

$$(2.22)$$

Para eliminar o somatório em i,j,observa-se que

$$\sum_{i} \delta_{\vec{\sigma},\vec{\sigma_i}} = NP(\vec{\sigma}) \quad , \tag{2.23}$$

logo

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

$$(2.24)$$

com $\vec{\sigma} \cdot \vec{\tau} = \sum_{\alpha}^{n} \sigma_{\alpha} \tau_{\alpha}$ sendo o produto interno usual.

Importante observar que o traço sobre as variáveis de spin só atua sobre o fator

$$\exp\left[-\frac{1}{N}\sum_{\vec{\sigma}}\hat{P}(\vec{\sigma})\sum_{i}\delta_{\vec{\sigma},\vec{\sigma}_{i}}+\beta\sum_{i,\alpha}\theta_{i}\sigma_{i}^{\alpha}-\beta\sum_{i,\alpha}D_{i}(\sigma_{i}^{\alpha})^{2}\right],$$

com isso o traço é dado por

$$\sum_{\vec{\sigma}^{1},...,\vec{\sigma}^{n}} \exp\left[-\frac{1}{N}\sum_{\vec{\sigma}}\hat{P}(\vec{\sigma})\sum_{i}\delta_{\vec{\sigma},\vec{\sigma}_{i}} + \beta\sum_{i,\alpha}\theta_{i}\sigma_{i}^{\alpha} - \beta\sum_{i,\alpha}D_{i}(\sigma_{i}^{\alpha})^{2}\right] = \sum_{\vec{\sigma}^{1},...,\vec{\sigma}^{n}}\prod_{i}\exp\left[-\frac{1}{N}\sum_{\vec{\sigma}}\hat{P}(\vec{\sigma})\delta_{\vec{\sigma},\vec{\sigma}_{i}} + \beta\sum_{\alpha}\theta_{i}\sigma_{i}^{\alpha} - \beta\sum_{\alpha}D_{i}(\sigma_{i}^{\alpha})^{2}\right] = (2.25)$$
$$\prod_{i}\sum_{\vec{\sigma}_{i}}\exp\left[-\frac{1}{N}\hat{P}(\vec{\sigma}_{i}) + \beta\sum_{\alpha}\theta_{i}\sigma_{i}^{\alpha} - \beta\sum_{\alpha}D_{i}(\sigma_{i}^{\alpha})^{2}\right] .$$

Como a média dos campos θ_i, D_i só atuam em 2.24 nos fatores da expressão 2.25, tomando a média em 2.25

$$\left\langle \prod_{i} \sum_{\vec{\sigma_{i}}} \exp\left[-\frac{1}{N} \hat{P}(\vec{\sigma_{i}}) + \beta \sum_{\alpha} \theta_{i} \sigma_{i}^{\alpha} - \beta \sum_{\alpha} D_{i} (\sigma_{i}^{\alpha})^{2}\right] \right\rangle_{\{\theta_{i}\},\{D_{i}\}} = \prod_{i} \sum_{\vec{\sigma_{i}}} \exp\left\{-\frac{1}{N} \hat{P}(\vec{\sigma_{i}})\right\} \left\langle \exp\left\{\beta \sum_{\alpha} \theta_{i} \sigma_{i}^{\alpha}\right\} \right\rangle_{\{\theta_{i}\}} \left\langle \exp\left\{-\beta \sum_{\alpha} D_{i} (\sigma_{i}^{\alpha})^{2}\right\} \right\rangle_{\{D_{i}\}} = (2.26)$$
$$\exp\left[N \ln \sum_{\vec{\sigma}} \exp\left\{-\frac{1}{N} \hat{P}(\vec{\sigma}) + \beta \theta \sum_{\alpha} \sigma^{\alpha} - \beta D \sum_{\alpha} (\sigma^{\alpha})^{2}\right\} \right\rangle_{\theta,D}\right] ,$$

a última igualdade é obtida observando que o produtório em i resulta em elevar a expressão na potência N, uma vez que todos os termos das exponenciais possuem dependência em i. Após é aplicado uma função logaritmo e exponencial, respectivamente, para obter o resultado.

Voltando para a função partição em 2.24

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

$$(2.27)$$

Realizando a troca de variáveis

$$\hat{P}(\vec{\sigma}) \to N\hat{P}(\vec{\sigma})$$
 , (2.28)

resulta em

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

$$(2.29)$$

Essa integral pode ser calculada pelo método de ponto de sela no limite termodinâmico, quando $N \rightarrow \infty$. Por tanto, voltando para a equação da energia livre em 2.7

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

$$(2.30)$$

As equações de ponto de sela são:

$$\frac{\partial f}{\partial P(\vec{\sigma})} = 0, \quad \frac{\partial f}{\partial \hat{P}(\vec{\sigma})} = 0 \quad .$$
 (2.31)

Derivando a energia livre em relação à $P(\vec{\sigma})$ obtém-se

$$P(\vec{\sigma}) - \frac{\langle \exp[\beta\theta \sum_{\alpha} \sigma^{\alpha} - \beta D \sum_{\alpha} (\sigma^{\alpha})^{2} - \hat{P}(\vec{\sigma})] \rangle_{\theta,D}}{\sum_{\vec{\sigma}} \langle \exp[\beta\theta \sum_{\alpha} \sigma^{\alpha} - \beta D \sum_{\alpha} (\sigma^{\alpha})^{2} - \hat{P}(\vec{\sigma})] \rangle_{\theta,D}} = 0 \quad ,$$
(2.32)

e derivando em relação à $\hat{P}(\vec{\sigma})$

$$\hat{P}(\vec{\sigma}) + c \sum_{\vec{\tau}} P(\vec{\tau}) \left(\exp(\frac{\beta J}{c} \vec{\sigma} \cdot \vec{\tau}) - 1) \right) = 0 \quad .$$
(2.33)

Pode-se reescrever as expressões de forma a isolar $P(\vec{\sigma}) \in \hat{P}(\vec{\sigma})$

$$P(\vec{\sigma}) = \frac{\langle \exp[\beta\theta\sum_{\alpha}\sigma^{\alpha} - \beta D\sum_{\alpha}(\sigma^{\alpha})^{2} - \hat{P}(\vec{\sigma})] \rangle_{\theta,D}}{\sum_{\vec{\sigma}} \langle \exp[\beta\theta\sum_{\alpha}\sigma^{\alpha} - \beta D\sum_{\alpha}(\sigma^{\alpha})^{2} - \hat{P}(\vec{\sigma})] \rangle_{\theta,D}} \quad ,$$
(2.34)

$$\hat{P}(\vec{\sigma}) = -c \sum_{\vec{\tau}} P(\vec{\tau}) \left(\exp(\frac{\beta J}{c} \vec{\sigma} \cdot \vec{\tau}) - 1) \right) \quad .$$
(2.35)

Utilizando a equação 2.35 na expressão da energia livre 2.30 para eliminar $\hat{P}(\vec{\sigma})$,

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

$$(2.36)$$

Substituindo 2.35 em 2.34

$$P(\vec{\sigma}) = \frac{\left\langle \exp\left[\beta\theta\sum_{\alpha}\sigma^{\alpha} - \beta D\sum_{\alpha}(\sigma^{\alpha})^{2} + c\sum_{\vec{\tau}}P(\vec{\tau})\left(\exp(\frac{\beta J}{c}\vec{\sigma}\cdot\vec{\tau}) - 1\right)\right)\right]\right\rangle_{\theta,D}}{\sum_{\vec{\sigma}}\left\langle \exp\left[\beta\theta\sum_{\alpha}\sigma^{\alpha} - \beta D\sum_{\alpha}(\sigma^{\alpha})^{2} + c\sum_{\vec{\tau}}P(\vec{\tau})\left(\exp(\frac{\beta J}{c}\vec{\sigma}\cdot\vec{\tau}) - 1\right)\right)\right]\right\rangle_{\theta,D}},$$
(2.37)

chega-se em uma equação auto-consistente para $P(\vec{\sigma})$.

Assume-se então a forma de $P(\vec{\sigma})$ de tal maneira a deixar $P(\vec{\sigma})$ invariante à permutações de spins entre diferentes réplicas. Dessa forma, é usado o Ansatz de simetria de réplicas (ERICHSEN; LOPES; MAGALHAES, 2017) (ERICHSEN; THEUMANN, 2011)

$$P(\vec{\sigma}) = \int dhdb W(h,b) \frac{e^{\beta h \sum_{\alpha} \sigma^{\alpha} - \beta b \sum_{\alpha} (\sigma^{\alpha})^2}}{[2e^{\beta b} \cosh(\beta h) + 1]^n} \quad , \tag{2.38}$$

com W(h, b) sendo uma distribuição dos campos locais h, b a ser determinada de modo auto-consistente. Observa-se que com $n \to 0$ o denominador da expressão auto-consistente de $P(\vec{\sigma})$ tende a 1, assim

$$P(\vec{\sigma}) = \left\langle \exp\left[\beta\theta \sum_{\alpha} \sigma^{\alpha} - \beta D \sum_{\alpha} (\sigma^{\alpha})^{2} + c \sum_{\vec{\tau}} P(\vec{\tau}) \left(\exp(\frac{\beta J}{c} \vec{\sigma} \cdot \vec{\tau}) - 1)\right)\right] \right\rangle_{\theta, D} \quad , \quad (2.39)$$

e que as médias em θ e D atuam somente nos termos com dependência dessas variáveis

$$P(\vec{\sigma}) = \exp^{-c} \left\langle e^{\beta\theta} \sum_{\alpha} \sigma^{\alpha} \right\rangle_{\theta} \left\langle e^{-\beta D} \sum_{\alpha} (\sigma^{\alpha})^{2} \right\rangle_{D} \exp\left\{ c \sum_{\vec{\tau}} P(\vec{\tau}) \left(\exp(\frac{\beta J}{c} \vec{\sigma} \cdot \vec{\tau}) \right) \right\} \quad , \ (2.40)$$

expandindo a última exponencial em séries de potências

$$P(\vec{\sigma}) = e^{-c} \left\langle e^{\beta\theta \sum_{\alpha} \sigma^{\alpha}} \right\rangle_{\theta} \left\langle e^{-\beta D \sum_{\alpha} (\sigma^{\alpha})^{2}} \right\rangle_{D} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{c^{k}}{k!} \sum_{\vec{\tau_{1},...,\vec{\tau_{k}}}} P(\vec{\tau_{1}}) ... P(\vec{\tau_{k}}) \prod_{l=1}^{k} e^{\frac{\beta J}{c} \vec{\sigma} \cdot \vec{\tau}} \quad . \tag{2.41}$$

Inserindo o Ansatz 2.38 em cada uma das distribuições $P(\vec{\tau})$

$$P(\vec{\sigma}) = e^{-c} \left\langle e^{\beta\theta \sum_{\alpha} \sigma^{\alpha}} \right\rangle_{\theta} \left\langle e^{-\beta D \sum_{\alpha} (\sigma^{\alpha})^{2}} \right\rangle_{D} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{c^{k}}{k!} \int \left[\prod_{l=1}^{k} \frac{dh_{l} db_{l} W(h_{l}, b_{l})}{[2e^{\beta b} \cosh(\beta h) + 1]^{n}} \right] \times \\ \times \sum_{\vec{\tau_{1}}, \dots, \vec{\tau_{k}}} \prod_{l=1}^{k} \exp\left\{ \beta h_{l} \sum_{\alpha} \tau^{\alpha l} - \beta b_{l} \sum_{\alpha} (\tau^{\alpha l})^{2} + \frac{\beta J}{c} \vec{\sigma} \cdot \vec{\tau}^{l} \right\}$$
(2.42)

Definindo

$$\% \equiv \sum_{\vec{\tau_1},\dots,\vec{\tau_k}} \prod_{l=1}^k \exp\left\{\beta h_l \sum_{\alpha} \tau^{\alpha l} - \beta b_l \sum_{\alpha} (\tau^{\alpha l})^2 + \frac{\beta J}{c} \vec{\sigma} \cdot \vec{\tau}^l\right\} \quad , \tag{2.43}$$

segue que

$$\% = \prod_{l=1}^{k} \sum_{\vec{\tau}_l} \exp\left\{\beta h_l \sum_{\alpha} \tau^{\alpha l} - \beta b_l \sum_{\alpha} (\tau^{\alpha l})^2 + \frac{\beta J}{c} \vec{\sigma} \cdot \vec{\tau}^l\right\}$$
(2.44)

$$\% = \prod_{l=1}^{k} \prod_{\alpha=1}^{n} \sum_{\tau^{\alpha l}} \exp\left\{\beta h_l \tau^{\alpha l} - \beta b_l (\tau^{\alpha l})^2 + \frac{\beta J}{c} \sigma^{\alpha} \tau^{\alpha l}\right\}$$
(2.45)

$$\% = \prod_{l=1}^{k} \exp \sum_{\alpha=1}^{n} \ln \sum_{\tau^{\alpha l}} \exp \left\{ \beta h_l \tau^{\alpha l} - \beta b_l (\tau^{\alpha l})^2 + \frac{\beta J}{c} \sigma^{\alpha} \tau^{\alpha l} \right\} \quad .$$
(2.46)

Calculando o traço sobre $\tau^{\alpha l} = \{0, \pm 1\}$

$$\% = \prod_{l=1}^{k} \exp \sum_{\alpha=1}^{n} \ln \left\{ 2 \cosh \left(\beta h_l + \frac{\beta J}{c} \sigma^{\alpha} \right) e^{-\beta b_l} + 1 \right\} \quad . \tag{2.47}$$

Introduzindo a identidade (ERICHSEN; THEUMANN, 2011)

$$\sum_{\sigma} \delta_{\sigma\sigma^{\alpha}} = 1 \quad , \tag{2.48}$$

 com

$$\delta_{\sigma\sigma^{\alpha}} = 1 - \sigma^2 - (\sigma^{\alpha})^2 + \frac{1}{2}\sigma\sigma^{alpha} + \frac{3}{2}\sigma^2(\sigma^{\alpha})^2 \quad , \tag{2.49}$$

na expressão de % e efetuando o traço sobre σ

$$\% = \prod_{l=1}^{k} \exp\left\{n\ln[2\cosh(\beta h)e^{-\beta b_l} + 1] + \left(\sum_{\alpha} \sigma^{\alpha}\right)\phi(h_l, b_l) + \left(\sum_{\alpha} (\sigma^{\alpha})^2\right)\psi(h_l, b_l)\right\} \quad , \quad (2.50)$$

com as funções $\phi(h_l, b_l) \in \psi(h_l, b_l)$ definidas por

$$\phi(h_l, b_l) \equiv \frac{1}{2} \ln \left[\frac{\cosh(\beta h_l + \frac{\beta J}{c}) + \frac{1}{2} e^{\beta b_l}}{\cosh(\beta h_l - \frac{\beta J}{c}) + \frac{1}{2} e^{\beta b_l}} \right] \quad , \tag{2.51}$$

$$\psi(h_l, b_l) \equiv \frac{1}{2} \ln \left[\frac{(\cosh(\beta h_l + \frac{\beta J}{c}) + \frac{1}{2}e^{\beta b_l})(\cosh(\beta h_l - \frac{\beta J}{c}) + \frac{1}{2}e^{\beta b_l})}{(\cosh(\beta h_l) + \frac{1}{2}e^{\beta b_l})^2} \right] \quad . \tag{2.52}$$

Voltando para 2.42 e introduzindo a expressão 2.50 ao tomar o limite $n \to 0$

$$P(\vec{\sigma}) = e^{-c} \left\langle e^{\beta\theta \sum_{\alpha} \sigma^{\alpha}} \right\rangle_{\theta} \left\langle e^{-\beta D \sum_{\alpha} (\sigma^{\alpha})^{2}} \right\rangle_{D} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{c^{k}}{k!} \int \left[\prod_{l=1}^{k} dh_{l} db_{l} W(h_{l}, b_{l}) \right] \times \prod_{l=1}^{k} \exp\left\{ \left(\sum_{\alpha} \sigma^{\alpha} \right) \phi(h_{l}, b_{l}) + \left(\sum_{\alpha} (\sigma^{\alpha})^{2} \right) \psi(h_{l}, b_{l}) \right\}$$

$$(2.53)$$

Para que seja possível encontrar uma relação auto-consistente de $W(h_l, b_l)$ utiliza-se o Ansatz 2.38 no lado esquerdo da igualdade

$$\int dhdb W(h,b) e^{\beta h \sum_{\alpha} \sigma^{\alpha} - \beta b \sum_{\alpha} (\sigma^{\alpha})^{2}} = \left\langle e^{\beta \theta \sum_{\alpha} \sigma^{\alpha}} \right\rangle_{\theta} \left\langle e^{-\beta D \sum_{\alpha} (\sigma^{\alpha})^{2}} \right\rangle_{D} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{e^{-c} c^{k}}{k!} \times \int \left[\prod_{l=1}^{k} dh_{l} db_{l} W(h_{l},b_{l}) \right] \prod_{l=1}^{k} \exp \left\{ \left(\sum_{\alpha} \sigma^{\alpha} \right) \phi(h_{l},b_{l}) + \left(\sum_{\alpha} (\sigma^{\alpha})^{2} \right) \psi(h_{l},b_{l}) \right\}$$
(2.54)

Escrevendo as médias da forma

$$\left\langle e^{\beta\theta\sum_{\alpha}\sigma^{\alpha}}\right\rangle_{\theta} = \int d\theta \left(e^{\beta\theta\sum_{\alpha}\sigma^{\alpha}}\right)P_{\theta}(\theta) \quad ,$$
 (2.55)

$$\left\langle e^{-\beta D \sum_{\alpha} \sigma^{\alpha}} \right\rangle_{D} = \int dD \left(e^{-\beta D \sum_{\alpha} \sigma^{\alpha}} \right) P_{D}(D) \quad , \tag{2.56}$$

e passando o produtório para dentro da exponencial

$$\int dhdb W(h,b) e^{\beta h \sum_{\alpha} \sigma^{\alpha} - \beta b \sum_{\alpha} (\sigma^{\alpha})^{2}} = \int d\theta P_{\theta}(\theta) \int dD P_{D}(D) \times \\ \times e^{\beta \theta \sum_{\alpha} \sigma^{\alpha} - \beta D \sum_{\alpha} (\sigma^{\alpha})^{2}} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{e^{-c} c^{k}}{k!} \int \left[\prod_{l=1}^{k} dh_{l} db_{l} W(h_{l},b_{l}) \right] \times \\ \times \exp\left\{ \left(\sum_{\alpha} \sigma^{\alpha} \right) \sum_{l=1}^{k} \phi(h_{l},b_{l}) + \left(\sum_{\alpha} (\sigma^{\alpha})^{2} \right) \sum_{l=1}^{k} \psi(h_{l},b_{l}) \right\} , \qquad (2.57)$$

$$\int dhdb W(h,b) e^{\beta h \sum_{\alpha} \sigma^{\alpha} - \beta b \sum_{\alpha} (\sigma^{\alpha})^{2}} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{e^{-c}c^{k}}{k!} \times \\ \times \int d\theta P_{\theta}(\theta) \int dD P_{D}(D) \int \left[\prod_{l=1}^{k} dh_{l} db_{l} W(h_{l},b_{l}) \right] \times \quad (2.58)$$
$$\times \exp\left\{ \left(\sum_{\alpha} \sigma^{\alpha} \right) \left(\sum_{l=1}^{k} \phi(h_{l},b_{l}) + \beta \theta \right) + \left(\sum_{\alpha} (\sigma^{\alpha})^{2} \right) \left(\sum_{l=1}^{k} \psi(h_{l},b_{l}) - \beta D \right) \right\} \quad .$$

Seja a igualdade

$$\int \delta(x-a)f(x)dx = f(a) \quad , \tag{2.59}$$

podemos reescrever

$$\int dhdb W(h,b) e^{\beta h \sum_{\alpha} \sigma^{\alpha} - \beta b \sum_{\alpha} (\sigma^{\alpha})^{2}} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{e^{-c}c^{k}}{k!} \int d\theta P_{\theta}(\theta) \int dD P_{D}(D) \int dx dy \times \\ \times \int \left[\prod_{l=1}^{k} dh_{l} db_{l} W(h_{l},b_{l}) \right] \delta \left(h - \theta - \frac{1}{\beta} \sum_{l=1}^{k} \phi(h_{l},b_{l}) \right) \delta \left(b - D + \frac{1}{\beta} \sum_{l=1}^{k} \psi(h_{l},b_{l}) \right) \times \overset{(2.60)}{\times} e^{\beta x \sum_{\alpha} \sigma^{\alpha} - \beta y \sum_{\alpha} (\sigma^{\alpha})^{2}} .$$

Com isso, podemos reconhecer a equação auto consistente de W(b, h)

$$W(h,b) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{e^{-c}c^k}{k!} \int d\theta P_{\theta}(\theta) \int dD P_D(D) \int \left[\prod_{l=1}^k dh_l db_l W(h_l,b_l)\right] \times \\ \times \delta \left(h - \theta - \frac{1}{\beta} \sum_{l=1}^k \phi(h_l,b_l)\right) \delta \left(b - D + \frac{1}{\beta} \sum_{l=1}^k \psi(h_l,b_l)\right) \quad .$$

$$(2.61)$$

A equação 2.61 será resolvida a fim de obter os parâmetros de ordem característicos do sistema. Para encontrar a distribuição W(h, b) será utilizado um método numérico recursivo de dinâmica de populações a ser descrito no próximo capítulo.

3 Resultados

Neste capítulo será apresentado o algoritmo para encontrar a distribuição W(h, b), a obtenção de propriedades termodinâmicas como magnetização, ocupação e energia livre a partir da distribuição W(h, b) e determinação de diagramas de fases com dependência da conectividade ilustrando o comportamento das transições de fase em baixa conectividade.

3.1 Distribuição W(h, b)

Para computar a distribuição dada pela equação 2.61 considera-se a dinâmica de atualização de campos descrita a seguir. Primeiro, considera-se uma grande população de campos locais $\{h^1, ..., h^N\}$ e $\{b^1, ..., b^N\}$, depois sorteia-se um número k de uma distribuição de Poisson com média c. Seleciona-se então aleatoriamente k campos das populações $\{h^1, ..., h^N\}$ e $\{b^1, ..., b^N\}$ gerando uma coleção de dois grupos de tamanho k. Após calcula-se as expressões $\theta + \frac{1}{\beta} \sum_{l=1}^k \phi(h_l, b_l)$ e $D - \frac{1}{\beta} \sum_{l=1}^k \psi(h_l, b_l)$ com os k + k campos selecionados. Assim, atualiza-se outros campos h e b sorteados aleatoriamente da população original com

$$h = \theta + \frac{1}{\beta} \sum_{l=1}^{k} \phi(h_l, b_l) \quad ,$$
 (3.1)

$$\theta = D - \frac{1}{\beta} \sum_{l=1}^{k} \psi(h_l, b_l) \quad .$$
(3.2)

O procedimento acima converge para uma distribuição estável consideravelmente rápido. Para os resultados a serem apresentados cada campo fora atualizado 200 vezes. É importante salientar que para cada valor de temperatura T, campos $\theta \in D$ e conectividade c obtém-se uma distribuição W(h, b), sendo necessário reproduzir o algoritmo sempre que esses parâmetros forem alterados.

3.2 Parâmetros de ordem

Buscando observar as transições de ordem do modelo com conectividade finita, procura-se determinar os valores de parâmetros de ordem que caracterizam essas transições. O parâmetro de ordem que surge naturalmente em um sistema magnético é a magnetização $m \equiv \langle \sigma \rangle$ e, como o modelo permite a presença de sítios inativos, a ocupação $Q \equiv \langle \sigma^2 \rangle$ permite observar a ocupação dos sítios por spins ativos (±1). Em posse da distribuição de campos W(h, b) pode-se determinar a partir dela o valor para a magnetização (ERICHSEN;

LOPES; MAGALHAES, 2017) (ERICHSEN; THEUMANN, 2011)

$$m = \int dhdb W(h,b) \langle \sigma \rangle \quad , \tag{3.3}$$

e a ocupação

$$Q = \int dhdb W(h,b) \langle \sigma^2 \rangle \quad , \tag{3.4}$$

valendo 0 se todos os sítios estiverem ocupados por spin 0 e 1 se nenhum dos sítios estiverem ocupados por spin 0. As médias são calculadas a partir dos campos b e h pelas expressões (ERICHSEN; LOPES; MAGALHAES, 2017) (ERICHSEN; THEUMANN, 2011)

$$\langle \sigma \rangle = \frac{\sinh(\beta h)}{\cosh(\beta h) + e^{\beta b}/2} \tag{3.5}$$

е

$$\langle \sigma^2 \rangle = \frac{\cosh(\beta h)}{\cosh(\beta h) + e^{\beta b}/2}$$
 (3.6)

Como o usual, $m \neq 0$ indica uma fase ferromagnética F, m = 0 e $Q \neq 0$ indica uma fase paramagnética P e m = 0 e Q = 0 indica uma fase não magnética NM. Dessa forma, esses serão os parâmetros de ordem para identificar uma transição de fase no futuro.

Como foi mencionado na obtenção de W(h, b), o procedimento descrito é válido para um conjunto de parâmetros fixos como temperatura, campos $\theta \in D$ e conectividade, o mesmo vale para os parâmetros de ordem já que estes dependem de W(h, b). Porém como deseja-se observar as transições de fase, e montar um diagrama de fases, fixa-se todos os parâmetros em um determinado valor com exceção de um e calcula o valor do parâmetro de ordem variando o parâmetro não fixo na região de interesse.

Uma possível forma de diagrama de fases é um diagrama entre campos $\theta \in D$, logo, para seguir o comentário anterior a temperatura é fixada em T = 0, o campo cristalino é fixado em D = 0.4 e traçam-se as linhas de magnetização variando o campo θ no intervalo de [0.2:0.8] para conectividade c fixa em c = 5 e c = 25 na figura 2. As linhas tracejadas indicam que o cálculo foi feito no sentido decrescente de θ .

No caso de c = 25, percebe-se a presença de duas transições de fase de primeira ordem que é o que é visto no diagrama de fase proveniente do método de campo médio, apresentado na figura 1. Como era esperado, o resultado para conectividade finita porém suficientemente alta deve recuperar o encontrado na teoria de campo médio. Para c = 5, observa-se que a primeira transição não é mais notada, enquanto a outra passa a ser uma transição de segunda ordem. Aqui é claro o efeito da conectividade nas transições de fase, ou seja, em algum valor de conectividade as transições podem mudar de ordem ou deixar de existir.

Na próxima sessão, serão investigadas as transições de fase a fim de determinar os valores de conectividade a partir dos quais as transições não são observadas, ou têm a ordem alterada, em relação às transições presentes em conectividade alta.



Figura 2: Magnetização para valores de θ variando entre [0.2:0.8] com D = 0.4 e T = 0 fixos para conectividade c = 5 (linhas pretas) e c = 25 (linhas verdes).

3.3 Transições de fase em baixa conectividade

Fora observado até então que a presença da conectividade no modelo muda o comportamento das transições de fase. Essa mudança pode ser observada com a alteração do ponto em que ocorre a transição (apesar de este não ser o foco do estudo) bem como a mudança de ordem, ou seja, a transição passa a ser contínua ou ainda nota-se que certas transições podem ser quebradas, isto é, podem deixar de existir para um certo valor de conectividade.

O interesse em investigar as transições na presença de conectividade faz o estudo seja direcionado às transições que apresentem modificações devido à conectividade finita. Como foi discutido e pode ser visto novamente, agora de forma mais clara, na figura 3 somente as transições entre as fases F - F/NM, F - P e F/NM - P mudam seu comportamento. Portanto, fica justificado que não há a necessidade de traçar um diagrama de fases inteiro para estudar as transições de fase citadas, umas vez que a região de interesse limita-se à uma parte pequena do diagrama.



Figura 3: Diagrama de fases de D/J por θ para conectividade c = 5 (linhas em preto escuro), c = 10 (linhas em marrom escuro) e c = 25 (linhas em preto claro) à temperatura T = 0. As linhas sólidas representam transições contínuas e as tracejadas representam transições descontínuas. As fases apresentadas no diagrama são a ferromagnética (F), paramagnética (P), não-magnética (NM) e a fase mista (ferro / não-magnética) (F/NM). Extraído de Erichsen, R. and Lopes, Amanda Azevedo and Magalhaes, S. G. em (ERICHSEN; LOPES; MAGALHAES, 2017).

3.3.1 Curvas de magnetização

Concentrando-se, em um primeiro momento, na transição entre as fases F - F/NM nota-se, pela figura 3, que esta ocorre, para c = 25, na região entre [0.25:0.5] para os dois campos $\theta \in D$, definindo assim a região de interesse nesse caso. Como dito anteriormente, o procedimento para determinar as transições de fase está ligado com a obtenção das linhas de magnetização ao variar algum campo enquanto os outros parâmetros estão fixos. Escolhendo o campo cristalino D = 0.45 e variando o campo θ à temperatura T = 0, obtém-se a magnetização para alguns valores de $c = \{18.0, 18.1, 18.2, 18.3\}$ disposta na figura 4.

Observando na figura 4 as curvas correspondentes ao caso de c = 18.3 e c = 18.2 nota-se a presença de uma histerese denotando uma transição de primeira ordem na região uma vez que as transições ocorrem de forma descontínua. Contundo, para menores valores de conectividade percebe-se que a descontinuidade desaparece marcando a quebra da transição de fase à fixo D = 0.45.



Figura 4: Curva de magnetização com campo θ na região da transição F - F/NM para valores de conectividade $c = \{18.0, 18.1, 18.2, 18.3\}$ fixando-se D = 0.45 e T = 0. A linha roxa é obtida ao variar θ no sentido crescente e a linha verde no sentido decrescente de θ .

Com isso, a transição F - F/NM à D = 0.45 e T = 0 não é mais observada para $c \leq 18.1$. Assim, é possível mapear a partir de qual valor de conectividade essa transição F - F/NM é quebrada dado uma série de parâmetros fixos. É importante lembrar que se está buscando os valores de conectividade a partir dos quais a transição não é mais observada, não sendo de interesse buscar os valores de θ os quais ocorre a transição.

A transição F - F/NM não necessariamente é quebrada nos mesmos valores de conectividade ao longo de todo D. Por tanto, varia-se o valor de D para investigar como toda a região de transição se comporta com a diminuição da conectividade. Para D = 0.4 a T = 0 obtém-se as curvas de magnetização para alguns valores de $c = \{18.1, 18.2, 18.3, 18.4\}$ mostradas na figura 5.



Figura 5: Curva de magnetização com campo θ na região da transição F - F/NM para valores de conectividade $c = \{18.1, 18.2, 18.3, 18.4\}$ com D = 0.4 e T = 0 fixos. A linha roxa é obtida ao variar θ no sentido crescente e a linha verde no sentido decrescente de θ .

Agora, para o caso de D = 0.4, também é observado que a transição desaparece para valores de conectividade $c \leq 18.2$. Logo, fica claro que a transição não é quebrada no mesmo valor de conectividade para toda região de D, uma vez que em c = 18.2 a transição ainda é observada para o caso de D = 0.45 na figura 4, enquanto com D = 0.4 a transição não aparece para o mesmo valor de c.

Urge, pois, o interesse de mapear ao longo de toda a região onde ocorre a transição, para o caso de c suficientemente grande, os diferentes valores de conectividade que quebram essa transição. Seguindo para D = 0.35 e T = 0 fixos, a figura 6 apresenta as curvas de magnetização para $c = \{18.1, 18.2, 18.3, 18.4\}.$

Nota-se na figura 6 para valores de conectividade $c \leq 18.2$ a transição não é mais



Figura 6: Curva de magnetização com campo θ na região da transição F - F/NM para valores de conectividade $c = \{18.1, 18.2, 18.3, 18.4\}$ com D = 0.35 e T = 0 fixos. A linha roxa é obtida ao variar θ no sentido crescente e a linha verde no sentido decrescente de θ .

observada. Comparando com o caso de D = 0.4, apesar de certamente nas duas situações a transição não ser observada para $c \leq 18.2$ não pode-se afirmar que a transição é quebrada exatamente no mesmo ponto, uma vez que não estamos observando o intervalo de c [18.2 : 18.3]. Na verdade, pelo fato que para c = 18.3 a abertura da histerese é muito mais aparente no caso de D = 0.35 tem-se um indicativo que a transição é quebrada em um valor mais próximo de 18.2 em D = 0.35 do que em D = 0.4.

O caso de D = 0.3 e T = 0 fixos está disposto na figura 7. Para c = 18.1 fica difícil afirmar a existência da transição nesse ponto, contudo para $c \le 18.0$ fica claro que não há transição para esses valores. Pode-se, induzido pelas curvas, intuir que o valor de conectividade o qual quebra a transição é muito próximo de c = 18.1.



Figura 7: Curva de magnetização com campo θ na região da transição F - F/NM para valores de conectividade $c = \{17.9, 18.0, 18.118.2\}$ com D = 0.3 e T = 0 fixos. A linha roxa é obtida ao variar θ no sentido crescente e a linha verde no sentido decrescente de θ .

Com isso, conseguiu-se mapear a transição F - F/NM para alguns valores fixos de D. Considerando um diagrama de fases para conectividade alta, dado pelas figuras 1 e 3, extrapola-se, apesar do número pequeno de pontos observados, que conforme se vá diminuindo a conectividade a transição quebre inicialmente na parte central, por volta de $c \approx 18.2$, até ser extinta por completo nas pontas, para $c \approx 18.0$, quando esta é extinta por completo.

Analisando a transição F/NM - P espera-se observar um comportamento diferente das curvas de magnetização uma vez que esta passa a ser de segunda ordem ao invés de ser quebrada como no caso estudado anteriormente na transição F - F/NM. Contudo, a metodologia adotada é a mesma, observar as curvas de magnetização a fim de investigar os valores de conectividade que fazem a transição deixar de ser descontínua passando a ser



Figura 8: Curva de magnetização com campo θ na região da transição F/NM - P para valores de conectividade $c = \{13.6, 13.7, 13.8, 13.9\}$ com D = 0.3 e T = 0 fixos. A linha roxa é obtida ao variar θ no sentido crescente e a linha verde no sentido decrescente de θ .

contínua, como mostrado na figura 2.

Começa-se fixando D = 0.3 à T = 0, variando θ na região da transição F/NM - P. As curvas de magnetização para conectividade $c = \{13.6, 13.7, 13.8, 13.9\}$ estão apresentadas na figura 8. Aqui, nota-se que a transição persiste de primeira ordem para valores baixos de conectividade, se comparados com a transição F - F/NM, apesar de as histereses apresentarem menor largura em comparação com a transição anterior. Então, percebe-se que a transição passa a ser de segunda ordem para valores de $c \leq 13.7$.

Importante ressaltar que por uma necessidade de economizar tempo de cálculo computacional, a magnetização fora calculada para intervalos de θ curtos o suficiente para que possa ser observada a presença da histerese. Por esse motivo, as curvas podem não



Figura 9: Curva de magnetização com campo θ na região da transição F/NM - P para valores de conectividade $c = \{16.0, 16.1, 16.2, 16.3\}$ com D = 0.35 e T = 0 fixos. A linha roxa é obtida ao variar θ no sentido crescente e a linha verde no sentido decrescente de θ .

parecer apresentar uma transição contínua, contudo, como pode ser visto na figura 2 para c = 5 a transição se apresenta claramente como sendo de segunda ordem. Em termos práticos, procura-se o valor de conectividade o qual a histerese se fecha e não pode-se mais identificar uma transição descontínua.

Na figura 9 observa-se que a transição de fase para D = 0.35 e T = 0 deixa de ser de primeira ordem e passa a ser contínua para $c \leq 16.1$. Para a mesma diferença de D, nota-se que na transição F - NM o espaçamento entre os valores de conectividade que quebram a transição são muito menores daqueles que mudam a ordem da transição F/NM - P.

Para o caso de D = 0.4, observa-se na figura 10 que a transição deixa de ser de



Figura 10: Curva de magnetização com campo θ na região da transição F/NM - P para valores de conectividade $c = \{16.5, 16.6, 16.7, 16.8\}$ com D = 0.4 e T = 0 fixos. A linha roxa é obtida ao variar θ no sentido crescente e a linha verde no sentido decrescente de θ .

primeira ordem para $c \leq 16.5$. Na figura 11, para $c \leq 16.6$ a transição passa a ser contínua.

Com isso, a transição F/NM - P também pôde ser mapeada em alguns pontos de D fixo ao encontrar o valor de conectividade c a partir do qual a transição passa a ser de segunda ordem. Da mesma forma como foi feito com a transição F - F/NM, pode-se intuir que conforme diminui-se a conectividade a transição inicialmente troca de ordem para valores de D grande, maior que 0.75, chegando à D = 0.45 em $c \approx 16.6$ até próximo ao ponto tri-crítico para D = 0.3 em $c \approx 13.7$.

Apesar de a transição F - P não ter sido investigada, na figura 3 pode-se notar que esta transição apresenta mudança de ordem para algum valor de 5 < c < 10. O



Figura 11: Curva de magnetização com campo θ na região da transição F/NM - P para valores de conectividade $c = \{16.5, 16.6, 16.7, 16.8\}$ com D = 0.45 e T = 0 fixos. A linha roxa é obtida ao variar θ no sentido crescente e a linha verde no sentido decrescente de θ .

procedimento seria o análogo ao apresentado na transição F/NM - P.

3.3.2 Diagramas de fases θ vs c

Uma forma de melhorar a visualização dos resultados obtidos é desenvolver diagramas de fase com a conectividade um dos eixos do diagrama. Uma vez que já se possui os valores de conectividade que fazem uma transição mudar de ordem, ou até mesmo ser quebrada, basta fixar um valor de D e traçar o diagrama de θ vs c com os pontos obtidos anteriormente.

Para todos os valores de D analisados, fora desenvolvido um diagrama dispostos nas figuras 12, 13, 14 e 15. Os diagramas são essencialmente os mesmos e possui indicando



Figura 12: Diagrama de fases θ v
s c para D = 0.3 à T = 0. As linhas tracejadas indicam uma transição de primeira ordem e a linha che
ia indica uma transição de segunda ordem.

os valores de conectividade determinados anteriormente.



Figura 13: Diagrama de fases θ v
scpara D = 0.35 à T = 0. As linhas tracejadas indicam
 uma transição de primeira ordem e a linha cheia indica uma transição de segunda ordem.



Figura 14: Diagrama de fases θ v
scpara D = 0.4 à T = 0. As linhas tracejadas indicam
 uma transição de primeira ordem e a linha cheia indica uma transição de segunda ordem.



Figura 15: Diagrama de fases θ v
s c para D = 0.45 à T = 0. As linhas tracejadas indicam uma transição de primeira ordem e a linha che
ia indica uma transição de segunda ordem.

4 Conclusões

Este trabalho estudou o modelo de Blume - Capel (BC) sob o regime de conectividade finita. Teve como objetivo principal observar as implicações nas transições de fases que a conectividade trás ao modelo em relação ao caso de conectividade infinita. Inicialmente o modelo de Ising fora comentado para servir de base para introduzir o modelo de BC para apresentar a solução via teoria de campo médio, entendida como um caso de conectividade infinita, para servir de comparação aos resultados a serem obtidos com conectividade finita.

Desenvolveu-se a teoria do modelo BC para o caso de conectividade finita obtendo uma relação auto-consistente para a distribuição W(h, b) que permite ser obtida por cálculo numérico para que, através dela, conseguiu-se obter parâmetros de ordem, como magnetização e ocupação, para investigar as transições de fase em cada conectividade c. Observou-se que a partir de um certo valor de c, os resultados recuperavam o obtido através de teoria de campo médio, contudo, a transição F-F/NM não era observada para valores baixos de c e a transição F/NM - P passava a ser contínua.

Olhando de forma separada as transições, obtiveram-se valores de conectividade c_1^* a partir dos quais para qualquer valor menor de conectividade a transição F - F/NM não é mais observada à temperatura T = 0 com D fixo. Para D = 0.45, $c_1^* = 18.1$; D = 0.4, $c_1^* = 18.2$; D = 0.35, $c_1^* = 18.2$; D = 0.3, $c_1^* = 18.0$. O mesmo fora feito para a transição F/NM - P de forma a determinar os valores de conectividade c_2^* a partir dos quais para qualquer valor menor de conectividade a transição passe a ser contínua à temperatura T = 0 com D fixo. Para D = 0.45, $c_2^* = 16.6$; D = 0.4, $c_2^* = 16.5$; D = 0.35, $c_2^* = 16.1$; D = 0.3, $c_2^* = 13.7$.

Como tentativa de expor os resultados de uma outra maneira a fim de refinar a apresentação dos pontos obtidos foram criados diagramas de fase de θ por c para cada valor de D analisado à T = 0.

A perspectiva de continuação do trabalho no futuro está a inclusão da temperatura no problema, uma vez que todos os resultados apresentados nesse trabalho foram obtidos para o caso de temperatura nula. Com isso, poderiam ser criados diagramas de fase de T vs c, por exemplo, apesar de o estudo da temperatura no problema criar um grau de dificuldade a mais. Após, pode-se criar simulações por Monte Carlo permitindo observar as configurações do sistema nas diferentes fases em temperatura finita. Bem como, tentar modelar misturas ³He – ⁴He pelo modelo de BC já que pelo campo cristalino D é possível controlar a ocupação dos campos inativos no problema, de forma similar ao que foi feito por Blume, M. and Emery, V. J. and Griffiths, Robert B. em (BLUME; EMERY; GRIFFITHS, 1971) porém utilizando o modelo de Ising de 3 estados mas sem a presença do campo cristalino.

Referências

BLUME, M.; EMERY, V. J.; GRIFFITHS, R. B. Ising model for the λ transition and phase separation in he³-he⁴ mixtures. *Phys. Rev. A*, American Physical Society, v. 4, p. 1071–1077, Sep 1971. Disponível em: https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.4.1071-. Citado na página 40.

ERICHSEN, R.; LOPES, A. A.; MAGALHAES, S. G. Multicritical points and topology-induced inverse transition in the random-field blume-capel model in a random network. *Phys. Rev. E*, American Physical Society, v. 95, p. 062113, Jun 2017. Disponível em: https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.95.062113. Citado 4 vezes nas páginas 16, 21, 26 e 28.

ERICHSEN, R.; THEUMANN, W. K. Phase transitions in the three-state ising spin-glass model with finite connectivity. *Phys. Rev. E*, American Physical Society, v. 83, p. 061126, Jun 2011. Disponível em: https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.83.061126. Citado 5 vezes nas páginas 17, 18, 21, 22 e 26.

KAUFMAN, M.; KANNER, M. Random-field blume-capel model: Mean-field theory. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 42, p. 2378–2382, Aug 1990. Disponível em: <<u>https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.42.2378></u>. Citado 3 vezes nas páginas 9, 12 e 13.

ONSAGER, L. Crystal statistics. i. a two-dimensional model with an order-disorder transition. *Phys. Rev.*, American Physical Society, v. 65, p. 117–149, Feb 1944. Disponível em: https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.65.117. Citado na página 12.