Alma Mater Studiorum · Università di Bologna

Scuola di Scienze Dipartimento di Fisica e Astronomia Corso di Laurea in Fisica

STUDIO TEORICO SUI VETRI DI SPIN

Relatore: Prof. Cesare Franchini Presentata da: Enrico Trombetti

Anno Accademico 2020/2021

Sommario

Recentemente, lo studio dei vetri di spin è salito in auge, per varie ragioni: la principale è che la struttura matematica appositamente sviluppata per questi sistemi ha diffusissime applicazioni; il conferimento del premio Nobel per la Fisica a Giorgio Parisi nel 2021, proprio per i contributi apportati in questo ambito, è una chiara testimonianza dell'importanza che tale teoria assume. Questo lavoro vuole essere un'introduzione ai temi principali circa i vetri di spin ed è così articolata: nel capitolo di introduzione si riflette sui concetti di fase e transizioni di fase; nel secondo si tratta di materiali magnetici, in particolare ferromagneti, e si sviluppa una teoria di campo medio a range infinito per essi; il terzo capitolo riguarda finalmente i vetri di spin: sono descritti prima qualitativamente, poi si estende la teoria di campo medio per il modello di Sherrington-Kirkpatrik, introducendo il metodo delle repliche; il capitolo successivo tratta la soluzione simmetrica delle repliche e ne descrive il fallimento; la rottura di simmetria delle repliche è argomento dell'ultimo capitolo, nel quale si spiega la procedura che Parisi ha congegnato per risolvere il problema; infine, in appendice è possibile trovare una presentazione estremamente sintetica di alcuni strumenti matematici utilizzati nel corso della trattazione. I risultati che si ottengono trovano vasto impiego in numerosissimi (e assai differenti) campi della scienza, quali la biologia, le reti neurali e soprattutto nello studio dei sistemi complessi; anche nei problemi di ottimizzazione si fa ampiamente uso della teoria dei vetri di spin.

Indice

1	Introduzione 3					
	1.1	Fonti				
	1.2	Fasi della materia				
		1.2.1 Ordine e simmetria				
		1.2.2 Transizioni di fase e parametri d'ordine				
		1.2.3 Transizione vetrosa				
	1.3	Quantità termodinamiche e statistiche				
2	Mat	teriali magnetici 7				
	2.1	Modello di Ising				
	2.2	Ruolo della magnetizzazione e fasi magnetiche 10				
	2.3	Teoria di campo medio				
		2.3.1 Teoria di Landau				
	2.4	Modello a range infinito				
3	Vetri di spin 18					
	3.1	Perchè studiare i vetri di spin				
	3.2	Natura dei vetri di spin				
		3.2.1 Interazioni tra momenti magnetici				
		3.2.2 Frustrazione				
		3.2.3 Nuovo stato della materia?				
	3.3	Teoria di campo medio dei vetri di spin				
		3.3.1 Modello di Sherrington-Kirkpatrik				
	3.4	Valutazione dell'energia libera				
		3.4.1 Proprietà di self-avereging				
		3.4.2 Metodo delle repliche				
		3.4.3 Parametri d'ordine 31				
4	RS:	soluzione simmetrica delle repliche 33				
	4.1	Equazioni di stato				
	4.2	Diagramma delle fasi				

	4.3	Problemi della soluzione simmetrica				
		4.3.1	Instabilità soluzione simmetrica	37		
		4.3.2	Entropia negativa	39		
5	Rot	tura de	ella simmetria delle repliche	41		
	5.1	Soluzio	one di Parisi	41		
	5.2	1RSB:	prima rottura di simmetria delle repliche	44		
		5.2.1	Equazioni di stato	45		
		5.2.2	Stabilità ed entropia	46		
	5.3	FRSB:	rottura completa di simmetria delle repliche	47		
		5.3.1	Parametri d'ordine vicino al punto critico	48		
		5.3.2	Stabilità della FRSB	50		
	5.4	azioni fisiche della RSB	50			
		5.4.1	Struttura a molte valli e stati puri	50		
		5.4.2	Parametri d'ordine della RSB	52		
		5.4.3	Distribuzione delle sovrapposizioni	53		
		5.4.4	Rappresentazione dei parametri d'ordine in termini delle repliche .	53		
		5.4.5	Ultrametricità	56		
Α	Appendici matematiche 5					
	A.1	Integra	ale Gaussiano e misura gaussiana	57		
	A.2	Identit	à delle repliche	58		
	A.3	Funzio	ne di Heaviside e delta di Dirac	58		
	A.4	Disugu	aglianza di Schwarz	59		
	A.5	Spazio	ultrametrico	59		

Capitolo 1 Introduzione

In questo capitolo, dopo aver elencato le fonti sulle quali ho basato il mio lavoro, introduco in termini generali i concetti di fase della materia e transizione tra fasi. Infine riporto, in maniera molto sintetica, alcune espressioni di importanti quantità che saranno utilizzate in tutto il resto dell'elaborato.

1.1 Fonti

La fonte da cui ho attinto maggiormente è il libro Statistical Physics of Spin Glasses and Information Processing. An Introduction [3] di Nishimori, in particolare ho analizzato i capitoli 1,2 e 3; oltre ai contenuti, anche la struttura della trattazione segue le orme di questa fonte. Dai capitoli dall'1 al 5 del libro Spin glasses and complexity [5] di Stein e Newman ho tratto l'idea generale dell'argomento, che mi ha aiutato a comporre le parti più discorsive della tesi. Dal libro Essential Statistical Physics [2] di Kennet, capitolo 10, ho estratto molte informazioni che ho poi rielaborato nel capitolo a proposito dei ferromagneti. L'articolo Physics of the spin-glass state [1] di Dotsenko è stato utilizzato, nel dettaglio il paragrafo 2.2 e la seconda parte, in parallelo al libro di Nishimori, dato che segue per lo più lo stesso percorso nella spiegazione: è servito per integrare alcuni passaggi ed avere una prospettiva ulteriore. Infine, ho estrapolato alcune nozioni matematiche dall'ottima dispensa Appunti di Metodi Matematici [4] di Ortolani.

1.2 Fasi della materia

L'Hamiltoniana di un sistema consente di valutarne l'energia in una qualsiasi delle sue configurazioni e di evincere le principali caratteristiche fisiche del sistema stesso, che ne regolano il comportamento. Tuttavia è evidente che alcune informazioni non siano contenute all'interno di tale grandezza: ad esempio, l'Hamiltoniana di un cubetto di ghiaccio è la medesima della pozza d'acqua che esso diviene una volta fuso. La meccanica statistica intende trovare un metodo per conoscere il comportamento di una sostanza considerando, oltre all'Hamiltoniana, l'ambiente in cui si essa si trova, ovvero le condizioni esterne alle quali è sottoposta: pressione, temperatura, campi elettromagnetici per citarne alcune. Per semplicità, si assumono fissate tutte queste condizioni al di fuori della temperatura T; questa grandezza assume il ruolo di indicare la probabilità della realizzazione delle configurazioni possibili del sistema. In particolare, in un sistema all'equilibrio termodinamico (e solo in questo caso), la probabilità di realizzazione della configurazione s può essere espressa mediante la distribuzione delle probabilità di Gibbs-Boltzmann

$$p(s) = \frac{e^{-\beta\varepsilon_s}}{Z} \tag{1.1}$$

dove ε_s è l'energia della configurazione s, Z la funzione di partizione canonica

$$Z = \sum_{s} e^{-\beta\varepsilon_s} \tag{1.2}$$

e
 β l'inverso della temperatura

$$\beta = \frac{1}{T} \tag{1.3}$$

avendo posto la costante di Boltzmann $k_B = 1$; tale convenzione sarà assunta per tutto l'elaborato.

Si osserva immediatamente che ad una temperatura fissata, la probabilità delle configurazioni con energia estremamente superiore a T è soppressa esponenzialmente, quindi è molto improbabile che una di tali configurazioni si realizzi. Perciò ad alte temperature esistono molte configurazioni che possono presentarsi con buona probabilità, mentre quanto T si abbassa, solamente le configurazioni meno energetiche hanno possibilità rilevanti di manifestarsi.

Questo meccanismo determina la distinzione tra le varie fasi della materia:

- per via della forma del potenziale interatomico tipico, la disposizione che consente di minimizzare l'energia è quella in cui gli atomi sono equispaziati, ad una distanza reciproca tale che forze di attrazione e repulsione siano per lo più in equilibrio. A basse temperature, quindi, gli atomi si dispongono a formare un reticolo ordinato e periodico: è questa la struttura di un cristallo;
- se la temperatura aumenta, invece, anche configurazioni più disordinate risultano probabili: l'agitazione termica consente agli atomi di assumere molte differenti disposizioni e si assiste alla comparsa delle fasi liquida e gassosa.

1.2.1 Ordine e simmetria

Ordine e simmetria sono due concetti ben distanti nell'ambito della fisica della materia, sebbene nell'immaginario comune si possa pensare che essi debbano necessariamente procedere di pari passo; a testimonianza di tale differenza, le fasi liquida e gassosa sono più disordinate della fase cristallina ma più simmetriche.

Per provare ciò, basta pensare a trasformazioni come la traslazione e la rotazione: in un cristallo, una traslazione è una trasformazione simmetrica solamente se eseguita tramite un vettore che è un multiplo della distanza interatomica, così come una rotazione è una simmetria solamente se l'angolo della trasformazione è un multiplo di un certo angolo dipendente dalla forma del reticolo (ad esempio, considerando reticoli piani, per una forma quadrata si ha che l'angolo dev'essere un multiplo di $\pi/2$, mentre in un reticolo esagonale è necessario che sia un multiplo di $\pi/6$); per un liquido o un gas, qualsiasi traslazione e qualsiasi rotazione costituiscono una simmetria¹.

L'Hamiltoniana di un sistema deve riflettere queste simmetrie; per contro, ho prima sottolineato che tale funzione è la medesima indipendentemente dalla fase del materiale in esame: essa deve quindi possedere tutte le simmetrie tipiche delle fasi fluide. Va da sè, perciò, che una sostanza nella fase cristallina ha meno simmetrie della propria Hamiltoniana; nella transizione da uno stato fluido a quello solido si parla di *rottura della simmetria*, in quanto nel momento del passaggio di fase il sistema assume solo una delle configurazioni compatibili con tale H e perde alcune simmetrie.

1.2.2 Transizioni di fase e parametri d'ordine

La definizione di transizione di fase è molto complessa per via delle molteplici sfaccettature che tale fenomeno può presentare; tuttavia in ogni caso si tratta di un fenomeno fisico, non chimico, che avviene improvvisamente e precisamente a specifiche condizioni. Può succedere che esso coincida con la rottura di qualche simmetria, come nel passaggio da liquido a cristallo descritto in precedenza; ad una certa temperatura, che indico con T_f , se il liquido viene raffreddato quasi staticamente, gli atomi si andranno a disporre in modo da formare un reticolo e si raggiungerà la fase cristallina. In questo tipo di transizioni si hanno variazioni:

- di uno o più parametri d'ordine: quantità in grado di mostrare se il microstato corrispondente ad un certo macrostato osservabile sia in uno stato ordinato o meno; generalmente, in una transizione di fase, uno o più parametri d'ordine passano da 0 ad un valore non nullo o viceversa;
- di alcune grandezza termodinamiche come la capacità termica e, per i materiali magnetici, la suscettività magnetica.

¹Sono state tacitamente assunte due ipotesi fondamentali: l'indistinguibilità degli atomi e l'estensione infinita del materiale.

1.2.3 Transizione vetrosa

Nel caso in cui un liquido venga raffreddato in maniera non quasi statica, esso raggiungerà lo stato di liquido super raffreddato al di sotto della temperatura T_f ; mano a mano che la temperatura è decrementata, il tempo di rilassamento del sistema aumenta: ciò significa che il sistema impiega sempre più tempo per tornare all'equilibrio. Continuando a raffreddare il liquido, avverrà la transizione vetrosa alla temperatura T_g : tale passaggio porta il sistema in uno stato in cui il movimento a lungo range delle molecole è arrestato, in una condizione di non equilibrio, poichè il rapido raffreddamento non ha consentito loro di raggiungere una configurazione stabile; le molecole sono disposte quindi casualmente nello spazio.

Bisogna però chiarire che questo passaggio non rappresenta una transizione di fase: infatti la temperatura T_g dipende fortemente dal metodo e dalla velocità di raffreddamento del materiale, inoltre non vi sono discontinuità in quel punto per nessuna delle grandezze termodinamiche. Il vetro perciò, da un punto di vista della fase, non è differente da un liquido con un tempo di rilassamento estremamente prolungato.

1.3 Quantità termodinamiche e statistiche

Concludo questa sezione riportando le espressioni di alcune grandezze fondamentali sia in termodinamica sia in meccanica statistica, con le quali lavorerò in seguito.

Indico con Ω la funzione di molteplicità, ovvero il numero di configurazioni possibili del sistema e, sulla base di ciò, definisco l'entropia come

$$S = \ln \Omega \tag{1.4}$$

si nota immediatamente che, per quanto spiegato nella sezione 1.2, i sistemi a temperature più elevate avranno una entropia maggiore.

Introduco infine altre due quantità fondamentali: la prima è l'energia libera, definita

$$F = U - TS = -T\ln Z \tag{1.5}$$

il cui valore minimo individua lo stato fondamentale del sistema; la seconda è l'energia interna, ricavabile direttamente dalla (1.5)

$$U = -T^2 \frac{\partial}{\partial t} \frac{F}{T} = \frac{\partial F}{\partial \beta}$$
(1.6)

Si può infine osservare che vi è un legame diretto tra $F \in S$, esplicitamente

$$S = -\frac{\partial F}{\partial T} \tag{1.7}$$

Capitolo 2

Materiali magnetici

Tratto ora di un'importante classe di materiali: i sistemi magnetici, caratterizzati dal fatto che il loro comportamento può essere alterato mediante l'applicazione di un campo magnetico esterno; tale interazione è per lo più dovuta all'accoppiamento di quest'ultimo con lo spin degli elettroni degli atomi magnetici. Saranno perciò i momenti angolari intrinseci degli elettroni a costituire i gradi di liberà di un sistema magnetico.

2.1 Modello di Ising

Il modello di Ising riguarda i materiali magnetici allo stato solido (cristallino) ed uno dei più semplici e più studiati. Consiste nel considerare il materiale magnetico come un reticolo con siti indicizzati da i, i = 1...N, in ognuno dei quali è allocato S_i , ovvero la variabile di spin associata all'*i*-esimo sito; in questo modello essa può valere solamente ± 1 : ciò corrisponde a considerare solo le situazioni in cui lo spin è orientato verso l'alto (up \uparrow) o verso il basso (down \downarrow)

Con \mathcal{B} si indica l'insieme dei legami tra i siti, cioè quali spin interagiscono tra loro:

$$\mathcal{B} = \{(ij) \mid S_i \in S_j \text{ interagenti}\} \qquad i, j = 1...N$$
(2.1)

A questo punto è importante individuare l'energia di interazione tra i siti $i \in j$: essa è data da

$$E[(ij)] = -J_{ij}S_iS_j \tag{2.2}$$

dove J_{ij} è l'energia di scambio relativa al legame (ij); si nota che, giustamente, J_{ij} e di conseguenza E[(ij)] sono simmetriche rispetto allo scambio degli spin $i \in j$. Inoltre

- se $J_{ij} > 0$, l'energia è minimizzata per spin concordi: questo tipo di interazione è detta ferromagnetica;
- se $J_{ij} < 0$, l'energia è minimizzata per spin discordi: in questo caso si tratta di interazione antiferromagnetica.

Saranno chiamati *ferromagneti* i materiali in cui tutte le relazioni sono caratterizzate da un'energia di scambio positiva: essi tenderanno quindi ad avere spin disposti parallelamente tra di loro. Viceversa, un *antiferromagnete* è un materiale in cui gli spin assumono preferibilmente un orientazione antiparallela tra di loro, essendo J_{ij} negativa per ogni coppia di siti.

Nel caso in cui fosse presente un campo magnetico esterno, che come detto è in grado di interagire con gli spin elettronici, questo sarà indicato con \mathbf{h} ; con h_i ci si riferirà al campo magnetico agente sul spin *i*-esimo. Con $\underline{S} = \{S_i\}$ invece si denota la configurazione degli spin del sistema.

Introdotta questi concetti e la relativa nomenclatura, posso finalmente scrivere l'Hamiltoniana di un reticolo di spin di Ising

$$H(\underline{S}) = -\sum_{(ij)\in\mathcal{B}} J_{ij}S_iS_j - \sum_{i=1}^N h_iS_i$$
(2.3)

La scelta di \mathcal{B} dipende criticamente dalla tipologia di problema che si vuole affrontare e, ovviamente, gioca un ruolo fondamentale nella soluzione di esso.

Ricordando quanto definito nella sezione 1.2, la distribuzione delle probabilità di Gibbs-Boltzmann risulta una funzione della configurazione del sistema, in cui l'energia della singola configurazione è rappresentata dalla rispettiva Hamiltoniana

$$p(\underline{S}) = \frac{e^{-\beta H}}{Z} \tag{2.4}$$

dove Z rappresenta sempre la funzione di partizione del sistema canonico

$$Z = \sum_{\underline{S}} e^{-\beta H} \tag{2.5}$$

Per comodità di notazione, con $\langle ... \rangle_{GB}$ si intenderà il valore di aspettazione di una certa grandezza secondo la distribuzione di Gibbs-Boltzmann

$$\langle x \rangle_{\rm GB} = \sum_{\underline{S}} p(\underline{S}) x$$
 (2.6)

Fondamentale per lo studio dei materiali magnetici sarà la magnetizzazione per spin: essa assume un valore per ogni sito i del reticolo, precisamente

$$m_i = \langle S_i \rangle_{\rm GB} \tag{2.7}$$

La magnetizzazione totale, invece, è definita come il valor medio (sempre secondo la distribuzione (2.4)) della somma di tutti gli spin del cristallo

$$M = \left\langle \sum_{i=1}^{N} S_i \right\rangle_{\rm GB} \tag{2.8}$$

Posso poi scrivere la magnetizzazione media per spin come

$$m = \frac{M}{N} \tag{2.9}$$

Ora, con quanto è stato definito, è bene esplicitare la relazione che lega la magnetizzazione per spin all'energia libera

$$\frac{\partial F}{\partial h_k} = -\frac{\partial}{\partial h_k} (T \ln Z) = -T \frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial h_k} = -\frac{T}{Z} \sum_{\underline{S}} \frac{\partial}{\partial h_k} e^{\beta \left[J \sum_{(ij) \in \mathcal{B}} S_i S_j + \sum_{i=1} h_i S_i\right]} = \\ = -\sum_{\underline{S}} \frac{e^{-\beta H}}{Z} S_k = -\sum_{\underline{S}} p(\underline{S}) S_k = -\langle S_k \rangle_{\rm GB} = -m_k$$
(2.10)

La suscettività magnetica è un'altra delle grandezze fondamentali per la descrizione esaustiva di un materiale magnetico; essa può essere espressa come la matrice

$$\chi_{ij} = \frac{\partial m_i}{\partial h_j} = -\frac{\partial^2 F}{\partial h_i \partial h_j} \tag{2.11}$$

Si osserva infine che le espressioni precedenti possono essere lievemente semplificate nel caso in cui le energie di scambio siano le medesime per ogni coppia di spin e ogni spin avverta lo stesso campo magnetico: concretamente $\forall i, j = 1...N J_{ij} = J \in h_i = h$. L'Hamiltoniana risulta

$$H = -J \sum_{(ij)\in\mathcal{B}} S_i S_j - h \sum_{i=1} S_i$$
(2.12)

e svolgendo conti analoghi a quelli per ottenere la (2.10) si ha

$$\frac{\partial F}{\partial h} = -M \tag{2.13}$$

di conseguenza

$$m = -\frac{1}{N} \frac{\partial F}{\partial h} \tag{2.14}$$

La suscettività in questo caso è uno scalare ed è definita dalla relazione

$$\chi = \frac{1}{N} \sum_{i,j} \chi_{ij} = \frac{\partial^2 F}{\partial h^2}$$
(2.15)

Concludo esplicitando il significato della dizione *limite termodinamico*: con essa si fa riferimento alla condizione in cui le grandezze osservate sono quelle macroscopiche, risultanti dall'analisi di un gran numero di elementi microscopici (particelle, molecole,...); in sostanza, il limite termodinamico consisterà perciò nel mandare il numero di elementi del sistema ad infinito

$$N \to \infty$$
 (2.16)

2.2 Ruolo della magnetizzazione e fasi magnetiche

Supponiamo di trattare un materiale ferromagnetico con interazioni tutte di pari intensità $(J_{ij} = J > 0 \ \forall i, j)$ in assenza di campi magnetici esterni; facendo riferimento all'equazione (2.12) per l'Hamiltoniana, dalla (2.4) le probabilità sono esprimibili come

$$p[\underline{S}] = \frac{e^{-\beta H}}{Z} = \frac{e^{\beta J \sum_{(ij)} S_i S_j}}{Z}$$

dalla quale possiamo immediatamente osservare che:

- per T basse, la probabilità di uno stato a bassa energia sono molto maggiori di quelle di stati altamente energetici: si avranno quindi spin quasi tutti allineati; la magnetizzazione media per spin sarà prossima al valore massimo $|m| \approx 1$ ed avrà segno corrispondente all'orientazione up S = +1 o down S = -1 dei momenti magnetici intrinseci
- per T alte, invece, le probabilità di stati più o meno energetici possiedono valori prossimi: gli spin sono perciò liberi di invertirsi praticamente di continuo, risultando mediamente equamente spartiti tra up S = +1 e down S = -1. Ciò si concretizza nell'annullamento della magnetizzazione media per spin $m \approx 0$

Considerando la magnetizzazione come una funzione della temperatura, sperimentalmente si rileva una discontinuità ad un certo valore di T, detto temperatura critica ed indicato con T_c

$$m = 0 \text{ per } T > T_c$$
 $m \neq 0 \text{ per } T < T_c$

Interpretando m come un parametro d'ordine, tale discontinuità sta ad indicare che a $T = T_c$ si ha una transizione di fase; il passaggio avviene tra differenti fasi magnetiche, in particolare tra quella *paramagnetica* (P) a $T > T_c$ e quella *ferromagnetica* (F) a $T < T_c$.

Si noti che se l'energia di interazione fosse stata negativa (J < 0), la fase ferromagnetica sarebbe stata sostituita da quella *antiferromagnetica* (A), in cui gli spin tendono ad antiallinearsi a basse temperature (inferiori a T_c).

In figura 2.1 sono rappresentate le tre fasi magnetiche descritte

2.3 Teoria di campo medio

Poichè siamo all'interno di una teoria ferromagnetica, suppongo che il valore medio dei singoli spin non dipenda dalla loro collocazione e che le interazioni tra spin siano tutte uguali tra loro¹

 $\forall i, j$ $\langle S_i \rangle_{\rm GB} = m_i = m$ $J_{ij} = J$

¹per i vetri di spin tale assunzione non sarà più valida



(c) Fase paramagnetica

Figura 2.1: Rappresentazioni grafiche delle fasi magnetiche della materia; mentre gli spin nelle fasi F ed A rimangono fissi nel tempo, nella la fase P essi fluttuano molto rapidamente. Immagini prelevate dalle pagine 56,58,60 della fonte [5].

Siccome è spesso troppo complicato svolgere la somma sui 2^N termini presenti nella funzione di partizione (2.5), si è costretti ad effettuare un'approssimazione: qui trova spazio la teoria di campo medio. L'essenza di tale procedura consiste nel trascurare le fluttuazioni delle variabili microscopiche attorno ai loro valori di aspettazione. Posso scrivere ogni spin come

$$S_i = m + \delta S_i$$

dove δS_i rappresenta appunto la fluttuazione di S_i rispetto a $m = \langle S_i \rangle_{\rm GB}$; suppongo quindi che essa sia sufficientemente piccola da poter essere ignorata al secondo ordine. Allora dalla (2.12) l'Hamiltoniana del sistema risulta

$$H = -J \sum_{(ij)\in\mathcal{B}} (m+\delta S_i)(m+\delta S_j) - h \sum_{i=1}^N S_i \approx$$
$$\approx -Jm^2 N_{\mathcal{B}} - Jm \sum_{(ij)\in\mathcal{B}} (\delta S_i + \delta S_j) - h \sum_{i=1}^N S_i$$

dove $N_{\mathcal{B}}$ è il numero totale di legami, ovvero il numero di elementi di \mathcal{B} .

Definiamo poi z_i numero di coordinazione del sito i, il quale indica il numero di legami che possiede l'*i*-esimo spin. Ad esempio, nel caso in cui ogni sito possa interagire solamente con i momenti magnetici adiacenti, z dipenderà dalla dimensione del reticolo: in una dimensione, ogni sito ne avrebbe due vicini, quindi z = 2; in due dimensioni, il numero di coordinazione varrebbe z = 4; in k dimensioni, z = 2k. Ammettendo che il cristallo abbia una struttura regolare, posso considerare costante $z_i = z \forall i$. Vale perciò la relazione

$$N_{\mathcal{B}} = \frac{zN}{2}$$

Si nota allora che è possibile semplificare la precedente espressione

$$H = -\frac{Jm^2 zN}{2} - Jmz \sum_{i=1}^{N} \delta S_i - h \sum_{i=1}^{N} S_i = -\frac{Jm^2 zN}{2} - (Jmz + h) \sum_{i=1}^{N} S_i$$

Determinata l'Hamiltoniana, possiamo procedere a calcolare la funzione di partizione:

dalla (2.5)

$$Z = \sum_{\underline{S}} \exp\left[\beta\left(-\frac{Jm^2zN}{2} - (Jmz+h)\sum_{i=1}^N S_i\right)\right]$$
$$= e^{-\frac{1}{2}\beta Jm^2zN} \sum_{\underline{S}} \prod_{i=1}^N \exp\left[-\beta(Jmz+h)S_i\right] =$$
$$= e^{-\frac{1}{2}\beta Jm^2zN} \prod_{i=1}^N \sum_{\underline{S}} \exp\left[-\beta(Jmz+h)S_i\right] =$$
$$= e^{-\frac{1}{2}\beta Jm^2zN} \prod_{i=1}^N \left[e^{-\beta(Jmz+h)} + e^{-\beta(Jmz+h)}\right] =$$
$$= e^{-\frac{1}{2}\beta Jm^2zN} \left\{2\cosh\left[\beta(Jmz+h)\right]\right\}^N$$
(2.17)

Si può notare che, trascurando il termine esponenziale, la funzione di partizione è esattamente quella di N spin indipendenti e distinguibili, ognuno soggetto ad un campo magnetico Jmz + h.

Valuto l'energia libera mediante la sua definizione (1.5)

$$F = \frac{Jm^2 zN}{2} - NT \ln 2\{\cosh[\beta(Jmz + h)]\}$$
(2.18)

Dalla (2.14) ho poi

$$m = \operatorname{tgh} \left[\beta(Jmz + h)\right] \tag{2.19}$$

che determina il parametro d'ordine: questa viene definita equazione di stato.

In assenza di campo magnetico esterno, la soluzione della (2.19) costituisce la cosiddetta magnetizzazione spontanea; tuttavia essa può essere ottenuta precisamente solo tramite via grafica o simulazione numerica, in quanto l'equazione da risolvere è trascendente: da tale valutazione si osserva che: ad alte temperature v'è un'unica soluzione che è m = 0; quando $z\beta J < 1$ vi sono altre soluzioni oltre a quella nulla. Posso perciò individuare la temperatura critica T_c come

$$T_c = \frac{1}{\beta_c} = zJ \tag{2.20}$$

Sapendo quindi che nelle vicinanze della temperatura critica m è piccolo, posso sviluppare in serie di Taylor in un intorno di m = 0 il membro destro della (2.19)

$$m = \beta z Jm - \frac{1}{3} (\beta z Jm)^3 + o_{m \to 0} (m^5)$$

dalla quale, trascurando i termini di ordine superiore al terzo, si ottengono le soluzioni

$$m = 0 \qquad \qquad m = \pm \sqrt{3\frac{T_c - T}{T}} \tag{2.21}$$

La prima risulta un minimo per $T > T_c$, mentre la seconda è accettabile solamente per $T < T_c$. Tali soluzioni corrispondono alla descrizione delle fasi paramagnetica e ferromagnetica, rispettivamente; a T_c si ha la transizione di fase, in concomitanza con la variazione del parametro d'ordine.

Questi risultati sono perfettamente in accordo con quelli che possono essere ottenuti con la teoria di Landau, descritta di seguito.

2.3.1 Teoria di Landau

Questa teoria fu sviluppata proprio a partire dal caso di un modello di Ising di un materiale ferromagnetico ed è molto utile per analizzare le transizioni di fase da un punto di vista delle simmetrie.

In una transizione del secondo ordine il parametro d'ordine cresce con continuità in funzione della temperatura (o di qualche altra grandezza intensiva come la pressione) fino al valore zero, raggiunto quando si ha la transizione.

Poichè il parametro d'ordine si annulla nel punto della transizione ed è molto piccolo in un intorno di esso, Landau suggerì di espandere l'energia libera in serie di Taylor; possiamo inoltre osservare che l'inversione di tutti gli spin (ovvero quelli up in down e viceversa) provoca il cambiamento del parametro d'ordine da m a -m, mentre l'energia libera rimane inalterata: questo implica la presenza dei soli termini di potenze pari di mnell'espansione di f.

Assumendo che essa sia una funzione del parametro d'ordine m e della temperatura T si ha

$$f(m,T) = f(0,T) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 f(0,T)}{\partial m^2} m^2 + \frac{1}{24} \frac{\partial^4 f(0,T)}{\partial m^4} m^4 + o_{m \to 0}(m^6)$$
(2.22)

I termini di cui si tiene conto sono, generalmente, tutti quelli rilevanti che rispettano la simmetria del problema affrontato.

Sappiamo che la condizione di stabilità è la minimizzazione dell'energia libera: ciò avverrà per un certo valore del parametro d'ordine che indicheremo con \tilde{m} . Trascurando i termini di ordine superiore al quarto si ha quindi

$$\frac{\partial f(m,T)}{\partial m} = 0 \qquad \iff \qquad \frac{\partial^2 f(0,T)}{\partial m^2}m + \frac{1}{6}\frac{\partial^4 f(0,T)}{\partial m^4}m^3 = 0$$

• per $\partial^2 f(0,T)/\partial m^2 > 0$, l'unica soluzione reale è

$$\tilde{m} = 0 \tag{2.23}$$

e si può facilmente verificare che essa costituisce un minimo per f(m,T)



Figura 2.2: Energia libera di un materiale ferromagnetico in funzione della magnetizzazione: si distinguono chiaramente i minimi per $T < T_c$ e $T > T_c$. Immagine prelevata da pagina 7 della fonte [3].

• per $\partial^2 f(0,T)/\partial m^2 < 0$, invece, vi sono tre soluzioni: $\underline{\mathbf{m}} = 0$, che però rappresenta un massimo locale, e

$$\tilde{m} = \pm \sqrt{-6 \left. \frac{\partial^2 f(0,T)}{\partial m^2} \right/ \frac{\partial^4 f(0,T)}{\partial m^4}} \tag{2.24}$$

che sono invece due minimi dell'energia libera.

Poichè la transizione di fase avviene alla temperatura $T = T_c$, si deduce che a quel valore il coefficiente del termine quadratico in m dello sviluppo di f(m, T) cambia di segno.

2.4 Modello a range infinito

Analizzo ora cosa succede se la teoria di campo medio viene applicata nel caso di interazioni a range infinito, dove tutte le possibili coppie di siti interagiscono

$$\mathcal{B} = \{(i,j) \mid i \neq j, \text{ con } i, j = 1, ..., N\}$$
(2.25)

L'Hamiltoniana del modello a range infinito è

$$H = -\frac{J}{2N} \sum_{i \neq j} S_i S_j - h \sum_i S_i$$
(2.26)

in cui il fattore 1/2 garantisce che ogni interazione sia contata un'unica volta

$$\frac{S_i S_j + S_j S_i}{2} = S_i S_j (= S_j S_i)$$

ed il fattore N rende (l'energia) una grandezza estensiva, cioè crescente linearmente con N: il numero di termini nella prima sommatoria è infatti N(N-1)/2; noto inoltre che il prodotto misto degli spin può essere riscritto come

$$\sum_{i \neq j} S_i S_j = \sum_{i,j} S_i S_j - \sum_i S_i^2 = \left(\sum_i S_i\right)^2 - N$$

Valuto ora la funzione di partizione: dalla definizione (2.5), utilizzando l'Hamiltoniana (2.26) e tenendo conto dell'ultima relazione

$$Z = \sum_{\underline{S}} \exp\left[\frac{\beta J}{2N} \left(\sum_{i} S_{i}\right)^{2} - \frac{\beta J}{2} + \beta h \sum_{i} S_{i}\right]$$
(2.27)

passando al limite termodinamico $N \to +\infty$, il termine $-\beta J/2$ può essere trascurato, in quanto non dipende (linearmente) da N a differenza degli altri. Cercando ora di semplificare questa espressione, applico il cambio di variabile $x = \sum_i S_i$; ricordando l'integrale gaussiano (A.1) si ha

$$\exp\left(\frac{\beta J}{2N}x^2\right) = \exp\left[\frac{(\beta Jx)^2}{4\frac{N\beta J}{2}}\right] = \sqrt{\frac{N\beta J}{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dm \exp\left(-\frac{N\beta J}{2}m^2 + \beta Jxm\right)$$

Di conseguenza

$$Z = \sum_{\underline{S}} \exp\left[\frac{\beta J}{2N}x^2 + \beta hx\right] = \sum_{\underline{S}} \left[\exp\left(\frac{\beta J}{2N}x^2\right)\exp\left(\beta hx\right)\right]$$
$$= \sqrt{\frac{N\beta J}{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dm \sum_{\underline{S}} \exp\left(-\frac{N\beta J}{2}m^2 + \beta Jm \sum_i S_i + \beta h \sum_i S_i\right)$$

infine, con ragionamenti analoghi a quelli svolti in (2.17) si ottiene

$$Z = \sqrt{\frac{N\beta J}{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dm \exp\left(-\frac{N\beta J}{2}m^2 + N\ln\{2\cosh[\beta(Jm+h)]\}\right)$$
(2.28)

Nel limite termodinamico $N \to +\infty$, l'integrale nell'espressione precedente può essere valutato tramite il metodo della discesa del gradiente: esso è approssimabile con il valore massimo dell'integrando. Per massimizzare l'integrando, si trova il massimo dell'esponente al suo interno

$$\frac{\partial}{\partial m} \left(-\frac{N\beta J}{2} m^2 + N \ln\{2 \cosh[\beta (Jm+h)]\} \right) = 0$$

che fornisce il valore della variabile di integrazione

$$m = \operatorname{tgh} \left[\beta(Jm+h)\right] \tag{2.29}$$

La quantità m, introdotta come variabile di integrazione, dimostra perciò di possedere un preciso significato fisico: dal confronto tra la (2.19) e la (2.29), m risulta essere la magnetizzazione.

Analizzando assieme le equazioni (2.19) e (2.29), si osserva che esse coincidono ponendo nella prima z = N e J = J/N. Il numero di coordinazione di un sito è proporzionale alla dimensione del reticolo considerato: nel limite termodinamico, perciò, tale modello può essere visto come un reticolo di dimensionalità infinita; è come se tutti i siti fossero vicini prossimi ed interagissero. Si conclude perciò che la teoria di campo medio conduce a risultati esatti nel modello a range infinito.

Capitolo 3 Vetri di spin

In primo luogo è bene introdurre il concetto di *vetro di spin*: tali oggetti sono magneti che esibiscono comportamenti magnetici alquanto caratteristici, per via della loro struttura che ne determina interazioni e proprietà. Lo scopo dei successivi capitoli è studiarne le peculiarità, sia dal punto di vista quantitativo, con una descrizione matematica abbastanza accurata, sia da un'ottica più fisica, per comprenderne la bizzarra natura.

3.1 Perchè studiare i vetri di spin

La domanda è lecita: perchè studiare così approfonditamente i vetri di spin? Essi non hanno caratteristiche elettriche o magnetiche particolarmente spendibili in campo tecnologico, eppure la ricerca in questo ambito è abbastanza attiva.

Il principale lascito dello sviluppo della teoria dei vetri di spin è un insieme di metodi matematici, appositamente inventati per risolvere questa tipologia di problemi, che ha trovato modernamente vasta applicazione negli ambiti più disparati della scienza. In particolare, la matematica sviluppata nella teoria dei vetri di spin è largamente impiegata nello studio dei sistemi complessi. Questo fatto, se si guarda attentamente, non sorprende nemmeno troppo; molte proprietà che sorgono naturalmente dallo studio dei materiali protagonisti di questo lavoro sono condivise da numerosi sistemi complessi: un esempio su tutti è la frustrazione dello stato fondamentale, di cui si parlerà nella sezione 3.2.2.

Va inoltre ricordato che la ricerca non deve sempre inseguire il fine di un'immediata applicazione: la storia della scienza è costellata di scoperte che si sono rivelate essere fondamentali per l'uomo solamente dopo svariati anni; il fatto che i vetri di spin abbiano costituito un vuoto teorico nella fisica e, che per alcuni aspetti, lo siano ancora, è un motivo di per sè sufficiente a motivarne lo studio.

3.2 Natura dei vetri di spin

Storicamente, la prima categoria di materiali classificabili come vetri di spin che è stata studiata è quella delle leghe magnetiche diluite: consistono in campioni metallici non magnetici dentro ai quali vengono inseriti elementi magnetici in posizioni casuali; nella prima fase della ricerca, le percentuali di atomi magnetici installati non superava qualche punto percentuale sul totale. Esempi di tali leghe sono blocchi di rame, argento o oro nei quali si innestano atomi di ferro o manganese.

Il primo fenomeno, proprio dei vetri di spin, che è stato studiato è l'*effetto Kondo*: l'omonimo scienziato pubblicò alcuni calcoli nel 1964 nel tentativo di spiegare il fatto che in tali materiali, drogati in minime percentuali con atomi magnetici, si registrasse un innalzamento della resistenza elettrica a pochi gradi al di sopra dello zero assoluto; tale comportamento è insolito in quanto, nei comuni metalli, la resistenza decrementa o addirittura si annulla a quelle temperature.

Al giorno d'oggi si sa che esistono altre tipologie di vetri di spin, alcune addirittura non metalliche: ad esempio $Eu_xSr_{1-x}S$ in cui alcuni atomi magnetici di Europio sono scambiati con collocazione casuale in un elemento di Stronzio in una percentuale x; analogamente LiHo_{0.0167}Y_{0.833}F₄ è uno vetro di spin, in cui gli ioni di Olmio sono quelli magnetici.

3.2.1 Interazioni tra momenti magnetici

Le proprietà peculiari (che saranno successivamente descritte) di questi materiali sono dovute alle interazioni tra gli atomi magnetici presenti al loro interno; per chiarezza e semplicità analizzo ciò che avviene in una lega magnetica diluita. L'interazione diretta tra i momenti magnetici associati agli atomi magnetici è troppo debole per spiegare gli effetti che si misurano sperimentalmente: è necessario perciò che vi sia qualcosa che "veicoli" la loro reciproca influenza.

Considerando il caso di atomi di manganese installati all'interno di un blocco di rame, sappiamo che gli elettroni più esterni degli atomi di quest'ultimo elemento si separano dagli atomi stessi, diventando così elettroni di conduzione, liberi di muoversi all'interno del sistema. Poichè essi trasportano con se stessi il proprio momento angolare intrinseco, sono in grado di interagire con gli atomi di manganese presenti nel campione; inoltre, da nozioni fondamentali di Meccanica Quantistica è noto che questi si propaghino come onde, motivo per cui si può assistere a fenomeni di interferenza, tipici di tali entità.

Le onde in questione consistono in onde sferiche, centrate nei loci degli atomi di manganese, di elettroni di conduzione con spin parallelo e antiparallelo a quello dell'atomo magnetico da cui originano. Tali onde di polarizzazione degli spin sono note come oscillazioni RKKY¹ e sono illustrate in figura 3.1 Il momento magnetico di un secondo atomo

¹dai nomi degli scienzati che per primi le analizzarono: Ruderman, Kittel, Kasuya e Yosida



Figura 3.1: Rappresentazione grafica dell'alternanza di bande di polarizzazione degli spin degli elettroni di conduzione; le impurità magnetiche sono rappresentate con una freccia verso l'alto. Immagine prelevata da pagina 76 della fonte [5].

di manganese trova più energeticamente vantaggioso allinearsi con quello precedente se si trova all'interno di una banda di polarizzazione parallela; viceversa, se esso è collocato in una banda di polarizzazione antiparallela, tenderà a disporsi in maniera opposta al primo momento magnetico.

A tal proposito è da osservare che, seppur gli elettroni di conduzione siano costantemente in movimento, le bande possono considerarsi fisse nello spazio durante lassi di tempo tipici delle scale temporali degli esperimenti che si conducono; in altre parole, l'interazione reciproca tra due momenti magnetici, determinata casualmente dalla collocazione degli atomi di manganese, rimane invariata nel tempo.

Da un punto di vista più quantitativo, l'energia dell'interazione tra due dipoli magnetici può essere valutata

$$J(r) = J_0 \frac{\cos(2k_F r + \phi_0)}{(k_F r)^3}$$
(3.1)

dove k_F è il vettore d'onda di Fermi, tipicamente dell'ordine di grandezza dell'inverso della distanza interatomica, ϕ_0 una fase costante che dipende dal metallo e J_0 una costante delle dimensioni di un'energia. Si nota J è una funzione della sola distanza dall'atomo magnetico, coerentemente con le riflessioni sviluppate in precedenza.

E' bene precisare che, nonostante tali ragionamenti siano stati condotti nell'ambito di leghe magnetiche diluite, gli esperimenti delineano caratteristiche qualitative simili per tutte le categorie di vetri di spin, ovviamente con alcune differenze dettate dalla tipicità del campione studiato.



Figura 3.2: Confronto tra cristallo e vetro e fasi ferromagnetica e di vetro di spin. Immagine prelevata da pagina 69 della fonte [5].

Possiamo infine comprendere il perchè del nome: come nella fase vetrosa le molecole sono disposte in maniera casuale, nei vetri di spin la collocazione degli atomi magnetici è aleatoria; per di più, l'orientamento degli spin di questi è bloccata nel tempo in una configurazione casuale. In figura 3.2 sono messe a confronto le disposizioni microscopiche delle molecole tra cristalli e vetri e degli spin tra fase ferromagnetica e di vetro di spin; se la fase vetrosa può assimilarsi ad una fotografia di quella liquida, la fase di vetro di spin può considerarsi come un'istantanea di quella paramagnetica.

3.2.2 Frustrazione

Una delle conseguenze più problematiche del fatto che l'insieme \mathbf{J} delle interazioni tra i momenti magnetici sia fissato nel tempo è il fenomeno della frustrazione. Si considerino tre spin di Ising interagenti tra di loro con un'energia $J_{i,j}$ della stessa intensità per ogni coppia di momenti.

Nel caso mostrato in figura 3.3a, in cui $J_{12} > 0$ mentre $J_{13}, J_{23} < 0$, è possibile posizionare gli spin nei corrispettivi siti in modo da soddisfare la condizione di minimizzazione dell'energia per ogni interazione: posso quindi affermare che lo stato fondamentale di questo sistema è unico.

Analizziamo ora la figura 3.3b, dove tutte e tre le interazioni sono negative: una volta posizionati gli spin 1 e 2 in modo coerente con i legami che li coinvolgono, risulta



Figura 3.3: Esempi di sistemi in cui si ha (oppure non si ha) frustrazione dello stato fondamentale. Immagini prelevate da pagina 456 della fonte [1].

impossibile soddisfare le interazioni J_{13} e J_{23} con il terzo spin, qualsiasi orientazione si scelga. In tale circostanza lo stato fondamentale è degenere: questo fenomeno è detto frustrazione. Il caso con tre spin interagenti è il più semplice ed immediato; tuttavia costa poco lavoro dimostrare che in una qualsiasi catena chiusa di spin, si ha degenerazione se il prodotto delle interazioni **J** è negativo, mentre lo stato fondamentale è unico quando tale prodotto è maggiore di zero. E' facile immaginare che in un reticolo di spin, in cui vi sono moltissime catene chiuse di momenti, la frustrazione sia un fenomeno molto ricorrente e che le degenerazioni tipiche siano molto elevate. Per questo motivo, determinare la configurazione <u>S</u> degli spin al livello fondamentale (ai livelli fondamentali) sotto queste condizioni risulta un problema assai complesso.

3.2.3 Nuovo stato della materia?

Studiando i vetri di spin drogati di qualche unità percentuale, si scoprirono alcune differenze nelle grandezze termodinamiche rispetto ai materiali non alterati: ad esempio, la suscettività magnetica esibisce un una discontinuità alla temperatura T_f , collocata differentemente a seconda delle percentuali di atomi magnetici inserite (si veda la figura 3.4); questa discontinuità sembra suggerire la transizione ad un'altra fase della materia.

Agli albori della ricerca, si pensava che tale nuova fase fosse quella antiferromagnetica dato che la magnetizzazione totale del materiale in quella fase rimane nulla; ben presto si scoprì però che non era così. E' da sottolineare che tale valore di M = 0, però, è dovuto ad un comportamento differente di quello che conduce allo stesso risultato nella alla fase paramagnetica a temperature più elevate: in quest'ultima, gli spin si invertono costante-



Figura 3.4: Suscettività magnetica della lega oro-ferro in funzione della temperatura: si nota distintamente la discontinuità (cuspide) presente a T differenti per le varie concentrazioni di ferro. Immagine prelevata da pagina 66 della fonte [5].

mente, facendo sì che la media temporale della magnetizzazione fornisca un valore nullo; al di sotto di T_f , invece, i momenti magnetici intrinseci appaiono bloccati nel tempo ma con un'orientazione casuale, la quale garantisce l'annullarsi della magnetizzazione totale.

D'altra parte, però, la capacità termica in questo range di temperature risulta essere una funzione continua di T: esibisce solamente un massimo, nemmeno collocato precisamente in T_f ; ciò fa sorgere grossi interrogativi sul fatto che il cambiamento analizzato costituisca effettivamente una transizione di fase.

La risposta a tale domanda è che si è al cospetto di una transizione di fase o meno a seconda della dimensionalità del sistema: è stato dimostrato che in una e due dimensioni non è possibile che avvenga tale transizione, in tre dimensioni il problema è ancora aperto, da 4 dimensioni in su vi sono numerose indicazioni che avvalorano la tesi della transizione di fase; tuttavia non è ancora stata fornita una dimostrazione di questo fatto per alcuna dimensione finita. L'unica dimostrazione accertata riguarda il caso infinito dimensionale, in cui tale passaggio costituisce effettivamente una transizione di fase; per tali materiali, la fase di approdo, al di sotto della temperatura critica, è definita fase di vetro di spin e sarà indicata con la sigla SG.

3.3 Teoria di campo medio dei vetri di spin

Come spiegato in precedenza, le interazioni tra gli spin non possono essere considerate costanti del caso dei vetri di spin: esse saranno ferromagnetiche in alcuni frangenti ed antiferromagnetiche nei legami rimanenti; si è anche chiarito che nella fase SG gli spin sono distribuiti in modo casuale nello spazio ma bloccati nel tempo.

In questa sezione estendo la teoria di campo medio in modo tale che sia applicabile anche per i vetri di spin: utilizzerò un modello di spin di Ising $(S_i = \pm 1)$ collocati randomicamente nello spazio con valore immutabile nel tempo.

L'espressione dell'Hamiltoniana non è difficile da ricavare, anzi, è già stata enunciata: nel caso in cui le interazioni di scambio non siano tutte della stessa entità, è necessario utilizzare l'espressione (2.3).

Ora bisogna capire come associare una certa energia di scambio ad uno specifico legame; l'impiego dell'espressione (3.1) o di una analoga ad essa rende impossibile procedere con la trattazione. Si può asserire che la collocazione casuale degli spin comporti la casualità anche della tipologia e dell'intensità dell'interazione tra di essi: è essenziale perciò introdurre una distribuzione di probabilità per le J_{ij} . In tale condizione, l'Hamiltoniana (2.3) in assenza di campo magnetico esterno costituisce il modello di Edwards-Anderson.

Ogni J_{ij} , perciò, può essere considerato distribuito, indipendentemente dal legame (i, j) considerato, secondo una certa distribuzione di probabilità; scelte tipiche sono:

• l'impiego di un modello gaussiano con media J_0 e varianza J

$$p(J_{ij}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi J^2}} \exp\left[-\frac{(J_{ij} - J_0)}{2J^2}\right]$$
(3.2)

• l'utilizzo di un modello $\pm J$, in cui l'interazione vale J > 0 in una frazione p dei casi e -J negli altri

$$p(J_{ij}) = p\delta(J_{ij} - J) + (1 - p)\delta(J_{ij} + J)$$
(3.3)

3.3.1 Modello di Sherrington-Kirkpatrik

Il modello SK^2 è l'analogo, per i vetri di spin, del modello a range infinito studiato nella sezione 2.4 a proposito dei materiali ferromagnetici ed antiferromagnetici. L'Hamiltoniana, come detto, è la (2.3), con l'insieme dei legami considerati definito come in (2.25)

$$H = -\sum_{i < j} J_{ij} S_i S_j - h \sum_{i=1}^N S_i$$
(3.4)

dove si considera costante il campo magnetico esterno avvertito da ogni spin.

In questo modello, assumo che la distribuzione di probabilità della energia di scambio sia del tipo (3.2) gaussiano, con media J_0/N e varianza J^2/N

$$p(J_{ij}) = \frac{1}{J} \sqrt{\frac{N}{2\pi}} \exp\left[-\frac{N}{2J^2} \left(J_{ij} - \frac{J_0}{N}\right)^2\right]$$
(3.5)

tale scelta di media e varianza è attuata per rendere estensive alcune quantità termodinamiche che saranno ricavate a seguire, come energia e calore specifico.

Consideriamo J_{ij} fissati per le motivazioni già discusse, dati dalla distribuzione (3.5): con **J** indicheremo la configurazione delle interazioni.

3.4 Valutazione dell'energia libera

Desidero ora valutare l'energia libera per il modello SK di un vetro di spin, in modo da riuscire a trovare i punti di equilibrio e calcolare le principali grandezze termodinamiche.

Dalla definizione di energia libera (1.5) posso scrivere

$$F = -T \ln \sum_{\underline{S}} e^{-\beta H}$$
(3.6)

Per ottenere l'espressione finale di tale grandezza è necessario calcolare il valore di aspettazione per la distribuzione (3.5) delle **J**: tale procedura è detta media configurazionale e d'ora in poi sarà indicata con il simbolo $\langle ... \rangle_{\mathbf{J}}$

$$\langle F \rangle_{\mathbf{J}} = -T \langle \ln Z \rangle_{\mathbf{J}} = -T \int \prod_{(ij)} dJ_{ij} p(J_{ij}) \ln Z$$
 (3.7)

²Sherrington-Kirkpatrik, dai nomi degli scienziati che lo svilupparono

L'applicazione della somma sulle configurazioni \underline{S} ad un fissato \mathbf{J} è coerente con il fatto che la posizione degli atomi può considerarsi fissata nel tempo quando si tratta il moto termico degli spin, che ha una scala temporale molto più rapida.

3.4.1 Proprietà di self-avereging

Una grandezza che gode di tale proprietà tende, nel limite termodinamico, alla sua media con probabilità 1. Ad esempio l'energia libera per spin è una quantità *self-avereging*: fissata una certa configurazione delle interazioni \mathbf{J}

$$f(\mathbf{J}) = \frac{F(\mathbf{J})}{N} \xrightarrow{N \to \infty} \langle f \rangle_{\mathbf{J}}$$
(3.8)

Quando si tratta di quantità di questo tipologia, si possono utilizzare indifferentemente la grandezza stessa o la media, rispettando le dovute condizioni. Per quanto riguarda l'energia libera per spin, sarà molto utile lavorare con la quantità media in quanto questa non dipende esplicitamente da **J**.

3.4.2 Metodo delle repliche

Il metodo delle repliche viene introdotto per semplificare la dipendenza dell'integrale (3.7) dalla media logaritmo della funzione di partizione; la procedura è la seguente:

1. si sfrutta l'identità

$$\langle \ln Z \rangle_{\mathbf{J}} = \lim_{n \to 0} \frac{\langle Z^n \rangle_{\mathbf{J}} - 1}{n} {}^3$$
(3.9)

introducendo n repliche fittizie del sistema iniziale;

- 2. si valuta la media configurazionale del prodotto delle loro funzioni di partizione;
- 3. si estende n dai numeri interi a quelli reali (o si assume che tale processo sia attuabile);
- 4. si effettua il limite $n \to 0$ per rendere vera l'identità (3.9)

Procedo dunque con questa tecnica al fine di valutare l'energia libera media; applicando l'identità delle repliche all'espressione (3.7) si ha

$$\langle F \rangle_{\mathbf{J}} = -T \langle \ln Z \rangle_{\mathbf{J}} = -T \lim_{n \to 0} \frac{\langle Z^n \rangle_{\mathbf{J}} - 1}{n}$$
 (3.10)

 $^{^{3}}$ Mi riferirò a questa identità, di natura puramente matematica, con il termine *identità delle repliche*

Valuto prima la media configurazionale del prodotto delle funzioni di partizione

$$\langle Z^n \rangle_{\mathbf{J}} = \int \left(\prod_{i < j} dJ_{ij} p(J_{ij}) \right) \sum_{\underline{S}} \exp \left(\beta \sum_{i < j} J_{ij} \sum_{\alpha = 1}^n S_i^\alpha S_j^\alpha + \beta h \sum_{i=1}^N \sum_{\alpha = 1}^n S_i^\alpha \right)$$
(3.11)

dove α è l'indice riferito alle repliche. L'integrale su ogni J_{ij} può essere effettuato indipendentemente, come se ogni energia di interazione fosse una variabile differente; utilizzando sempre la (3.5) per esprimere $p(J_{ij})$

$$\begin{split} \langle Z^n \rangle_{\mathbf{J}} &= \sum_{\underline{S}} \int \left[\prod_{i < j} dJ_{ij} p(J_{ij}) \exp\left(\beta J_{ij} \sum_{\alpha} S_i^{\alpha} S_j^{\alpha} + \beta h \sum_{i} \sum_{\alpha} S_i^{\alpha} \right) \right] = \\ &= \frac{1}{J} \sqrt{\frac{N}{2\pi}} \sum_{\underline{S}} \exp\left(\beta h \sum_{i} \sum_{\alpha} S_i^{\alpha} \right) \cdot \\ &\quad \cdot \prod_{i < j} \int dJ_{ij} \exp\left[-\frac{N}{2J^2} \left(J_{ij} - \frac{J_0}{N} \right)^2 + \beta J_{ij} \sum_{\alpha} S_i^{\alpha} S_j^{\alpha} \right] \end{split}$$

Sfruttando l'integrale di Gauss (A.1) valutiamo ora solo l'integrale della riga precedente

$$\int dJ_{ij} \exp\left[-\frac{N}{2J^2} \left(J_{ij} - \frac{J_0}{N}\right)^2 + \beta J_{ij} \sum_{\alpha} S_i^{\alpha} S_j^{\alpha}\right] =$$

$$= \exp\left(-\frac{J_0^2}{2NJ^2}\right) \int dJ_{ij} \exp\left[-\frac{N}{2J^2} J_{ij}^2 + \left(\beta \sum_{\alpha} S_i^{\alpha} S_j^{\alpha} + \frac{J_0}{J^2}\right) J_{ij}\right] =$$

$$= \sqrt{\frac{2\pi J^2}{N}} \exp\left(-\frac{J_0^2}{2NJ^2}\right) \exp\left[\frac{\left(\beta \sum_{\alpha} S_i^{\alpha} S_j^{\alpha} + \frac{J_0}{J^2}\right)^2 J^2}{2N}\right] =$$

$$= \sqrt{\frac{2\pi J^2}{N}} \exp\left[\frac{1}{2N} \left(\beta^2 J^2 \sum_{\alpha,\beta=1}^n S_i^{\alpha} S_j^{\alpha} S_j^{\beta} S_j^{\beta} + 2\beta J_0 \sum_{\alpha} S_i^{\alpha} S_j^{\alpha}\right)\right]$$

Ho quindi ottenuto la relazione

$$\langle Z^n \rangle_{\mathbf{J}} = \sum_{\underline{S}} \exp\left[\beta h \sum_{\alpha} \sum_{i} S_i^{\alpha} + \frac{1}{N} \sum_{i < j} \left(\frac{1}{2} \beta^2 J^2 \sum_{\alpha, \beta = 1}^n S_i^{\alpha} S_j^{\beta} S_j^{\beta} + \beta J_0 \sum_{\alpha} S_i^{\alpha} S_j^{\alpha}\right)\right]$$

Riscrivendo le somme su $i, j \in \alpha, \beta$, si trova la forma seguente per N elevati

$$\begin{split} \langle Z^{n} \rangle_{\mathbf{J}} &= \exp\left(\frac{N\beta^{2}J^{2}n}{4}\right) \cdot \\ &\cdot \sum_{\underline{S}} \exp\left[\frac{\beta^{2}J^{2}}{2N} \sum_{\alpha < \beta} \left(\sum_{\alpha} S_{i}^{\alpha} S_{j}^{\alpha}\right)^{2} + \frac{\beta J_{0}}{2N} \sum_{\alpha} \left(\sum_{i} S_{i}^{\alpha}\right)^{2} + \beta h \sum_{i} \sum_{\alpha} S_{i}^{\alpha}\right] = \\ &= \exp\left(\frac{N\beta^{2}J^{2}n}{4}\right) \cdot \\ &\cdot \sum_{\underline{S}} \exp\left[\frac{N\beta^{2}J^{2}}{2} \sum_{\alpha < \beta} \left(\frac{1}{N} \sum_{i} S_{i}^{\alpha} S_{j}^{\alpha}\right)^{2} + \frac{N\beta J_{0}}{2} \sum_{\alpha} \left(\frac{1}{N} \sum_{i} S_{i}^{\alpha}\right)^{2} + \beta h \sum_{i} \sum_{\alpha} S_{i}^{\alpha}\right] \end{split}$$
(3.12)

Per eseguire le somme su S_i^{α} indipendentemente dal sito i, è necessario che le quantità negli esponenti siano linearizzate; a tale scopo, utilizzo due integrali gaussiani, introducendo le variabili

• $q_{\alpha\beta}$ per il termine $(\sum_i S_i^{\alpha} S_j^{\beta})^2$: allora posso scrivere

$$\exp\left[\sum_{\alpha<\beta} \left(\frac{1}{N} \sum_{i} S_{i}^{\alpha} S_{j}^{\alpha}\right)^{2}\right] = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int \prod_{\alpha<\beta} dq_{\alpha\beta} \exp\left(-\sum_{\alpha<\beta} q_{\alpha\beta}^{2} + \frac{2}{N} \sum_{i} S_{i}^{\alpha} S_{j}^{\alpha} \sum_{\alpha<\beta} q_{\alpha\beta}\right)$$

• m_{α} per il termine $(\sum_{i} S_{i}^{\alpha})^{2}$: si ha quindi

$$\exp\left[\sum_{\alpha} \left(\frac{1}{N} \sum_{i} S_{i}^{\alpha}\right)^{2}\right] = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int \prod_{\alpha} dm_{\alpha} \exp\left(-\sum_{\alpha} m_{\alpha}^{2} + \frac{2}{N} \sum_{i} S_{i}^{\alpha} \sum_{\alpha} m_{\alpha}\right)$$

Reinserisco tutto ciò nella (3.12): ignorando il prefattore $1/\pi$ ed estraendo dalla somma-

toria sulle configurazioni le parti che non contengono termini di spin, si ha

$$\langle Z^{n} \rangle_{\mathbf{J}} = \exp\left(\frac{N\beta^{2}J^{2}n}{4}\right) \int \prod_{\alpha < \beta} dq_{\alpha\beta} \int \prod_{\alpha} dm_{\alpha}$$
$$\cdot \exp\left(-\frac{N\beta^{2}J^{2}}{2} \sum_{\alpha < \beta} q_{\alpha\beta}^{2} - \frac{N\beta J_{0}}{2} \sum_{\alpha} m_{\alpha}^{2}\right) \cdot$$
$$\cdot \sum_{\underline{S}} \exp\left[\beta^{2}J^{2} \sum_{\alpha < \beta} q_{\alpha\beta} \sum_{i} S_{i}^{\alpha} S_{j}^{\beta} + \beta \sum_{\alpha} (J_{0}m_{\alpha} + h) \sum_{i} S_{i}^{\alpha}\right]$$
(3.13)

Osservo ora che la terza riga dell'espressione precedente può essere scritta come

$$\sum_{\underline{S}} \exp\left[\beta^2 J^2 \sum_{\alpha < \beta} q_{\alpha\beta} \sum_i S_i^{\alpha} S_j^{\beta} + \beta \sum_{\alpha} (J_0 m_{\alpha} + h) \sum_i S_i^{\alpha}\right] = \\ = \left\{ \sum_{\underline{S}} \exp\left[\beta^2 J^2 \sum_{\alpha < \beta} q_{\alpha\beta} S^{\alpha} S^{\beta} + \beta \sum_{\alpha} (J_0 m_{\alpha} + h) S^{\alpha}\right] \right\}^N = \\ = \exp\left(N \ln \sum_{\underline{S}} e^L\right)$$

dove è stato definito

$$L = \beta^2 J^2 \sum_{\alpha < \beta} q_{\alpha\beta} S^\alpha S^\beta + \beta \sum_{\alpha} (J_0 m_\alpha + h) S^\alpha =$$

$$^4 = \frac{\beta^2 J^2}{2} \sum_{\alpha \neq \beta} q_{\alpha\beta} S^\alpha S^\beta + \beta \sum_{\alpha} (J_0 m_\alpha + h) S^\alpha \qquad (3.14)$$

Ho quindi ottenuto la media configurazionale del prodotto delle energie libere delle singole repliche nella forma

$$\langle Z^n \rangle_{\mathbf{J}} = \exp\left(\frac{N\beta^2 J^2 n}{4}\right) \int \prod_{\alpha < \beta} dq_{\alpha\beta} \int \prod_{\alpha} dm_{\alpha}$$
$$\cdot \exp\left[-\frac{N\beta^2 J^2}{4} \sum_{\alpha \neq \beta} q_{\alpha\beta}^2 - \frac{N\beta J_0}{2} \sum_{\alpha} m_{\alpha}^2 + N \ln \sum_{\underline{S}} e^L\right]$$
(3.15)

Utilizzando il metodo della discesa del gradiente, possiamo valutare l'integrale precedente, nel limite termodinamico $N \to +\infty$, come la funzione integranda valutata nel suo

⁴si è semplicemente osservato che $\sum_{\alpha < \beta} = (1/2) \sum_{\alpha \neq \beta}$.

 $\operatorname{massimo}$

$$\langle Z^n \rangle_{\mathbf{J}} \approx \exp\left[\frac{N\beta^2 J^2 n}{4} - \frac{N\beta^2 J^2}{4} \sum_{\alpha \neq \beta} q_{\alpha\beta}^2 - \frac{N\beta J_0}{2} \sum_{\alpha} m_{\alpha}^2 + N \ln \sum_{\underline{S}} e^L\right]$$

approssimando poi con Taylor per $n \to 0$, mantenendo N grande ma finito

$$\langle Z^n \rangle_{\mathbf{J}} \approx 1 + nN \left[\frac{\beta^2 J^2}{4} - \frac{\beta^2 J^2}{4n} \sum_{\alpha \neq \beta} q_{\alpha\beta}^2 - \frac{\beta J_0}{2n} \sum_{\alpha} m_{\alpha}^2 + \frac{1}{n} \ln \sum_{\underline{S}} e^L \right]$$
(3.16)

E' d'uopo precisare che questo passaggio è stato effettuato assumendo l'interscambiabilità dei limiti per $n \rightarrow 0$ e quello termodinamico: il calcolo richiedeva infatti di attuare prima quello termodinamico e successivamente quello che compare nell'identità delle repliche (3.9).

Ciò detto, l'energia libera può finalmente essere valutata:

$$-\beta \langle f \rangle_{\mathbf{J}} = \frac{1}{N} \lim_{n \to 0} \frac{\langle Z^n \rangle_{\mathbf{J}} - 1}{n} =$$
$$= \lim_{n \to 0} \left[\frac{\beta^2 J^2}{4} - \frac{\beta^2 J^2}{4n} \sum_{\alpha \neq \beta} q_{\alpha\beta}^2 - \frac{\beta J_0}{2n} \sum_{\alpha} m_{\alpha}^2 + \frac{1}{n} \ln \sum_{\underline{S}} e^L \right]$$
(3.17)

Bisogna ora applicare la condizione di punto di sella per estremizzare l'energia libera:

• rispetto alla variabile $q_{\alpha\beta}$

$$0 = -\beta \frac{\partial \langle f \rangle_{\mathbf{J}}}{\partial q_{\alpha\beta}} = -\frac{\beta^2 J^2}{2n} q_{\alpha\beta} + \frac{1}{n} \frac{\beta^2 J^2 \sum_{\underline{S}} S^{\alpha} S^{\beta} e^L}{2 \sum_{\underline{S}} e^L}$$

che porta a scrivere

$$q_{\alpha\beta} = \frac{\sum_{\underline{S}} S^{\alpha} S^{\beta} e^{L}}{\sum_{\underline{S}} e^{L}} = \left\langle S^{\alpha} S^{\beta} \right\rangle_{L}$$
(3.18)

• rispetto alla variabile m_{α}

$$0 = -\beta \frac{\partial \langle f \rangle_{\mathbf{J}}}{\partial m_{\alpha}} = \frac{\beta J_0}{n} m_{\alpha} - \frac{1}{n} \frac{\beta J_0 \sum_{\underline{S}} S^{\alpha} e^L}{\sum_{S} S^{\alpha} e^L}$$

da cui si ottiene

$$m_{\alpha} = \frac{\sum_{\underline{S}} S^{\alpha} e^{L}}{\sum_{\underline{S}} e^{L}} = \langle S^{\alpha} \rangle_{L}$$
(3.19)

dove si indica con $\langle ... \rangle_L$ la media con il peso e^L .

Nel caso in cui $J_0 = h = 0$, posso inoltre valutare la media configurazionale dell'energia interna del sistema, dall'espressione dell'energia libera (3.17) secondo la relazione (1.6)

$$\langle U \rangle_{\mathbf{J}} = -\frac{\beta J^2}{2} \lim_{n \to 0} \left(1 + \frac{1}{n} \sum_{\alpha \neq \beta} q_{\alpha\beta}^2 \right)$$
(3.20)

mentre la suscettività magnetica media si ricava dalla relazione (2.15)

$$\langle \chi \rangle_{\mathbf{J}} = \beta \lim_{n \to 0} \left(1 + \frac{1}{n} \sum_{\alpha \neq \beta} q_{\alpha\beta} \right)$$
 (3.21)

3.4.3 Parametri d'ordine

Le grandezze $q_{\alpha\beta} \in m_{\alpha}$ sono state introdotte come variabili di integrazione degli integrali gaussiani per pura convenienza; ciononostante esse rappresentano parametri d'ordine, analogamente a quanto visto nella sezione 2.4:

• m_{α} è il solito parametro d'ordine ferromagnetico; si può mostrare che la (3.19) può essere scritta in forma equivalente

$$m_{\alpha} = \left\langle \left\langle S_i^{\alpha} \right\rangle_{\rm GB} \right\rangle_{\mathbf{J}} \tag{3.22}$$

• $q_{\alpha\beta}$ è il parametro d'ordine tipico dei vetri di spin; si può mostrare che la (3.18) può essere scritta in forma equivalente

$$q_{\alpha\beta} = \left\langle \left\langle S_i^{\alpha} S_i^{\beta} \right\rangle_{\rm GB} \right\rangle_{\rm J} = \left\langle \left\langle S_i^{\alpha} \right\rangle_{\rm GB} \left\langle S_i^{\beta} \right\rangle_{\rm GB} \right\rangle_{\rm J}$$
(3.23)

Nella fase P, $\langle S_i \rangle_{\rm GB}$ si annulla in ogni sito per ognuna delle *n* repliche del sistema, per via delle velocissime fluttuazioni degli spin: i parametri d'ordine in questa fase assumono quindi i valori $m_{\alpha} = q_{\alpha\beta} = 0$. Nella fase F, gli spin sono praticamente tutti allineati: scegliendo l'orientazione positiva si avrà $m_{\alpha} > 0$ e $q_{\alpha\beta} > 0$.

Supponendo infine che esista la fase SG per il modello SK dei i vetri di spin, quanto dovrebbero valere i parametri d'ordine in questa fase? In questa circostanza, il materiale avrebbe gli spin che non fluttuano significativamente nel tempo, perciò bloccati in orientazioni casuali descritte da <u>S</u>: il valore di $\langle S_i \rangle_{\rm GB}$ non sarebbe quindi nullo ma assumerebbe valori positivi o negativi in funzione di **J**. Tuttavia, dopo un lasso di tempo opportunamente lungo, gli spin assumerebbero una nuova configurazione <u>S'</u> (bloccata anch'essa per le scale temporali considerate) e di conseguenza un nuovo insieme di interazioni **J**' che determinerebbero i segni dei nuovi valori medi di S_i. Questo ragionamento sembra suggerire che, nell'eventuale fase SG, $m_{\alpha} = \langle \langle S_i^{\alpha} \rangle_{\rm GB} \rangle_{\mathbf{J}} = 0$; al contrario, supponendo che i valori medi degli spin di ogni sito abbiano valore simile per ogni replica, $q_{\alpha\beta}$ dovrebbe assumere un valore positivo, essendo la media configurazionale di una quantità positiva $\langle S_i^{\alpha} \rangle_{\rm GB} \langle S_i^{\beta} \rangle_{\rm GB} \approx \langle S_i \rangle_{\rm GB}^2$. Riassumendo, l'ipotetica fase SG dovrebbe essere caratterizzata da

$$m_{\alpha} = 0 \qquad \qquad q_{\alpha\beta} > 0 \qquad (3.24)$$

Per procedere, è necessario valutare l'energia libera ed i parametri d'ordine; per fare ciò, bisogna conoscere la dipendenza esplicita di $m_{\alpha} \in q_{\alpha\beta}$ dagli indici delle repliche. Nel prossimo capitolo si farà una prima ipotesi su tale dipendenza e se ne analizzeranno le conseguenze.

Capitolo 4

RS: soluzione simmetrica delle repliche

La soluzione simmetrica (RS) consiste nel considerare i parametri d'ordine indipendenti dalla replica considerata: questa appare una scelta sensata in quanto sembra eliminare la dipendenza della fisica del sistema dalle repliche, che sono state introdotte solamente come un comodo artificio matematico.

In tal caso si ha perciò

$$\forall \alpha, \beta \qquad q_{\alpha\beta} = q \qquad m_{\alpha} = m \tag{4.1}$$

Allora dalla (3.17) possiamo scrivere l'espressione dell'energia libera come

$$-\beta \langle f \rangle_{\mathbf{J}} = \lim_{n \to 0} \left[\frac{\beta^2 J^2}{4} - \frac{\beta^2 J^2}{4n} n(n-1)q^2 - \frac{\beta J_0}{2n} nm^2 + \frac{1}{n} \ln \sum_{\underline{S}} e^L \right] =$$
$$= \lim_{n \to 0} \left[\frac{\beta^2 J^2}{4} - \frac{\beta^2 J^2(n-1)}{4} q^2 - \frac{\beta J_0}{2} m^2 + \frac{1}{n} \ln \sum_{\underline{S}} e^L \right]$$
(4.2)

prima di effettuare il limite per $n \to 0$, conviene calcolare l'ultimo termine della somma: L, dalla sua definizione (3.14) risulta sotto le ipotesi (4.1) fatte

$$L = \frac{\beta^2 J^2 q}{2} \sum_{\alpha \neq \beta} S^{\alpha} S^{\beta} + \beta (J_0 m + h) \sum_{\alpha} S^{\alpha} =$$
$$= \frac{\beta^2 J^2 q}{2} \left(\sum_{\alpha} S^{\alpha}\right)^2 - \frac{\beta^2 J^2 n q}{2} + \beta (J_0 m + h) \sum_{\alpha} S^{\alpha}$$

usando l'integrale gaussiano (A.1) e la nozione di misura gaussiana (A.3)

$$e^{L} = \exp\left[\frac{\left(\beta^{2}J^{2}q\sum_{\alpha}S^{\alpha}\right)^{2}/2}{4\beta^{2}J^{2}q}\right] \exp\left[-\frac{\beta^{2}J^{2}nq}{2} + \beta(J_{0}m+h)\sum_{\alpha}S^{\alpha}\right] =$$

$$=\sqrt{\frac{\beta^{2}J^{2}q}{2\pi}}\int dy \exp\left[-\frac{\beta^{2}J^{2}q}{2}y^{2} + \beta^{2}J^{2}qy\sum_{\alpha}S^{\alpha} - \frac{\beta^{2}J^{2}nq}{2} + \beta(J_{0}m+h)\sum_{\alpha}S^{\alpha}\right] =$$

$$^{1} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int dz \exp\left[-\frac{z^{2}}{2} + \beta J\sqrt{q}z\sum_{\alpha}S^{\alpha} - \frac{\beta^{2}J^{2}nq}{2} + \beta(J_{0}m+h)\sum_{\alpha}S^{\alpha}\right] =$$

$$=\int Dz \exp\left[\beta(J\sqrt{q}z + J_{0}m+h)\sum_{\alpha}S^{\alpha}\right] \exp\left[-\frac{\beta^{2}J^{2}nq}{2}\right]$$

Allora, definendo

$$\tilde{H}(z) = J\sqrt{q}z + J_0m + h \tag{4.3}$$

posso valutare

$$\ln \sum_{\underline{S}} e^{L} = \ln \int Dz \exp\left[n \ln(2\cosh(\beta \tilde{H}(z)))\right] \exp\left[-\frac{\beta^{2} J^{2} n q}{2}\right] = \\ = \ln \int Dz \exp\left\{n \left[\ln(2\cosh(\beta \tilde{H}(z))) - \frac{\beta^{2} J^{2} q}{2}\right]\right\}$$

Espandendo quanto ottenuto in serie di Taylor in un intorno di $n=0\ {\rm per}$ due volte

$$\ln \sum_{\underline{S}} e^{L} \approx \ln \left[1 + n \int Dz \left(\ln(2\cosh(\beta \tilde{H}(z))) - \frac{\beta^{2} J^{2} q}{2} \right) + o_{n \to 0}(n^{2}) \right] \approx \\ \approx n \left[\int Dz \ln(2\cosh(\beta \tilde{H}(z))) - \frac{\beta^{2} J^{2} q}{2} \right] + o_{n \to 0}(n^{2})$$

Reinserendo ciò nella (4.2) ed eseguendo il limite $n \to 0$ si ottiene

$$-\beta \langle f_{RS} \rangle_{\mathbf{J}} = \frac{\beta^2 J^2}{4} + \frac{\beta^2 J^2}{4} q^2 - \frac{\beta J_0}{2} m^2 + \int Dz \ln(2 \cosh(\beta \tilde{H}(z))) - \frac{\beta^2 J^2 q}{2}$$
$$= \frac{\beta^2 J^2}{4} (1-q)^2 - \frac{\beta J_0}{2} m^2 + \int Dz \ln(2 \cosh(\beta \tilde{H}(z)))$$
(4.4)

4.1 Equazioni di stato

Le equazioni di stato si ottengono, come nel caso dei materiali ferromagnetici, estremizzando l'energia libera rispetto ai parametri d'ordine

¹è stata fatta la sostituzione $z = \beta J \sqrt{q} y$

• Per quanto riguarda la condizione su m si ha

$$0 = -\beta \frac{\partial \langle f \rangle_{\mathbf{J}}}{\partial m} = -\beta J_0 m + \beta J_0 \int Dz \operatorname{tgh} \left(\beta \tilde{H}(z)\right)$$

da cui si evince l'equazione di stato per m

$$m = \int Dz \operatorname{tgh} \left(\beta \tilde{H}(z)\right) \tag{4.5}$$

Posso osservare che l'equazione precedente coincide con la (3.19) dove la sommatoria sulle configurazioni <u>S</u> è stata esplicitata. Confrontando la (4.5) appena ottenuta con l'equazione di stato di un singolo spin in un campo magnetico h, valutabile dalla (2.29) ponendo J = 0

$$m = \operatorname{tgh} \beta h$$

si giunge all'ipotesi che il campo interno al magnete abbia una distribuzione gaussiana, imputabile alla casualità delle interazioni tra momenti magnetici.

• Trattando la variabile q invece porta a scrivere

$$0 = -\beta \frac{\partial \langle f \rangle_{\mathbf{J}}}{\partial q} = -\frac{\beta^2 J^2}{2} (1-q) + \frac{\beta J}{2\sqrt{q}} \int Dz \operatorname{tgh}(\beta \tilde{H}(z)) z$$

allora, integrando per parti, si ottiene l'equazione di stato per q

$$q = 1 - \int Dz \operatorname{sech}^2(\beta \tilde{H}(z)) = \int Dz \operatorname{tgh}^2(\beta \tilde{H}(z))$$
(4.6)

4.2 Diagramma delle fasi

Per semplicità, analizziamo il diagramma delle fasi della soluzione simmetrica in assenza di campi magnetici esterni. Il comportamento delle soluzioni delle equazioni di stato (4.5) e (4.6) dipende criticamente dai parametri $\beta \in J_0$.

Dalle riflessioni elaborate in precedenza, ci aspettiamo di trovare per certo due fasi magnetiche, quella paramagnetica e quella ferromagnetica, tra le quali avverrà una transizione nel punto in cui m passa da zero ad un valore non nullo (o viceversa); in entrambe, il parametro d'ordine q deve risultare nullo.

Se dovesse esistere una fase di vetro di spin SG, i parametri d'ordine dovrebbero essere quelli ipotizzati in (3.24): m = 0 e q > 0; l'eventuale transizione P \leftrightarrow SG dovrebbe coincidere con la variazione di q, mentre tra F \leftrightarrow SG mi aspetto un cambiamento di m.

Valuto ora le condizioni in cui avvengono le transizioni sopra descritte; i risultati sono mostrati in figura 4.1

• $P \leftrightarrow SG$

Considero il caso in cui $J_0 = 0$, ovvero la distribuzione (3.5) di J_{ij} è simmetrica: dalla (4.3) si ha allora $\tilde{H}(z) = J\sqrt{q}z$; quindi tgh $\beta \tilde{H}(z)$ è una funzione dispari, di conseguenza dalla (4.5) risulta m = 0: ciò significa che con una distribuzione simmetrica delle energie di scambio non si ha una fase ferromagnetica. L'energia libera risulta

$$-\beta \langle f \rangle_{\mathbf{J}} = \frac{\beta^2 J^2}{4} (1-q)^2 + \int Dz \ln(2\cosh(\beta J\sqrt{q}z))$$
(4.7)

La teoria di Landau (vedi la sezione 2.3.1) viene in soccorso al fine di valutare il punto in cui si ha la transizione dettata dalla variazione del parametro d'ordine q. Espando l'energia libera in un intorno di q = 0; il punto critico, ovvero quello a cui avviene la transizione, è determinato dall'annullamento del coefficiente del termine del secondo ordine

$$-\beta \langle f \rangle_{\mathbf{J}} = -\frac{\beta^2 J^2}{4} - \ln 2 - \frac{\beta^2 J^2}{4} (1 - \beta^2 J^2) q^2 + o_{q \to 0}(q^3)$$

allora la temperatura critica T_f è presto individuabile

$$T_f \mid 1 - \beta_f^2 J^2 = 0 \qquad \Rightarrow \qquad T_f = J \tag{4.8}$$

• $F \leftrightarrow P$

Ora prendo in esame il caso in cui $J_0 > 0$, in modo da poter ottenere una soluzione ferromagnetica. Espando la (4.6) in serie di Taylor in un intorno di q = 0 (siccome sia in P sia in F deve essere q = 0) e tengo solamente i termini di ordine inferiore in $m \in q$

$$q = \beta^2 J^2 q + \beta^2 J_0^2 m^2$$

Se m > 0 allora la precedente relazione implica che $q = o_{m \to 0}(m^2)$. Espandendo, nuovamente, in serie di Taylor la (4.5) in un intorno di m = 0 si ottiene

$$m = \beta J_0 m + o_{m \to 0}(q)$$

Quindi posso affermare che la transizione tra fase paramagnetica e ferromagnetica si ha per

$$m = \beta_c J_0 m \quad \Rightarrow \quad \beta_c J_0 = 1 \quad \Rightarrow \quad T_c = J_0$$

$$(4.9)$$

• $F \leftrightarrow SG$

Il confine tra queste due fasi si ottiene solo risolvendo numericamente le (4.5) e (4.6); il risultato è una curva nel diagramma delle fasi, che in figura 4.1 è rappresentata dalla linea puntinata: su questa linea è prevista la transizione tra la fase ferromagnetica e quella di vetro di spin. Si nota che la fase SG si estende al di sotto di $T = T_f$ anche per valori di J_0 superiori a J.



Figura 4.1: Diagramma delle fasi per il modello SK; la linea puntinata delimita il confine tra SG ed F per la soluzione simmetrica. Immagine prelevata da pagina 20 della fonte [3].

Si precisa che la linea denominata AT è stata inserita nel grafico ma verrà spiegata e ricavata in seguito, solamente una volta introdotta la rottura della simmetria delle repliche.

4.3 Problemi della soluzione simmetrica

Sebbene la soluzione simmetrica possa sembrare corretta da un punto di vista dell'intuizione fisica e predica qualitativamente il comportamento delle transizioni tra fasi magnetiche, alcune delle conseguenze provano incontrovertibilmente che essa non è la risposta esatta alla dipendenza dei parametri d'ordine dagli indici delle repliche; le principali incongruenze sono l'instabilità di tale soluzione e il fatto che l'entropia dello stato fondamentale risulti negativa sotto tale ipotesi.

4.3.1 Instabilità soluzione simmetrica

Restringiamo la nostra indagine al caso h = 0. Per studiare la stabilità della soluzione simmetrica è comodo riscalare i parametri d'ordine come segue

$$\beta J q_{\alpha\beta} = y^{\alpha\beta} \qquad \qquad \sqrt{\beta J_0} m_\alpha = x^\alpha \tag{4.10}$$

Supponiamo delle lievi fluttuazioni di queste nuove grandezze attorno ai valori (medi) ottenuti per la RS $y = \beta Jq$ e $x = \sqrt{\beta J_0}m$

$$y^{\alpha\beta} = y + \eta^{\alpha\beta} \qquad \qquad x^{\alpha} = x + \varepsilon^{\alpha} \tag{4.11}$$

Espando ora l'energia libera (3.17) al secondo ordine in $\eta^{\alpha\beta} \in \varepsilon^{\alpha}$; indico il termine di grado massimo con Δ . Ci si riferisce alla matrice dei coefficienti di tale termine con G: essa assume il nome di matrice Hessiana, ed è determinante nel concertare la (non) stabilità della soluzione trovata. In particolare, quest'ultima è stabile se la matrice Hessiana è definita o semidefinita positiva, quindi se hai tutti e tre gli autovalori non negativi.

- Per quanto riguarda la soluzione paramagnetica, le condizioni di stabilità coincidono esattamente con il dominio di esistenza di tale fase; concludiamo quindi che la soluzione simmetrica è stabile nella fase paramagnetica.
- Nelle fasi ordinate il discorso si complica: sarà necessario risolvere l'equazione agli autovalori

$$G\vec{\mu} = \lambda\vec{\mu} \tag{4.12}$$

dove gli autovettori avranno forma

$$\vec{\mu} = \begin{pmatrix} \{\varepsilon^{\alpha}\}\\ \{\eta^{\alpha\beta}\} \end{pmatrix} = \left(\varepsilon_1, \varepsilon_2, \dots \varepsilon_n, \eta^{12}, \eta^{23}, \dots, \eta^{n-1n}\right)^T$$
(4.13)

La richiesta che due dei corrispondenti autovalori λ_1 e λ_2 siano positivi coincide con la condizione di punto di sella di $\langle f_{RS} \rangle_{\mathbf{J}}$ espressa in (4.4).

La condizione di positività sul terzo autovalore, definito in letteratura come *repli*cone mode, invece è esprimibile mediante la disequazione

$$\left(\frac{T}{J}\right)^2 > \int Dz \,\operatorname{sech}^4(\beta J \sqrt{q} z + \beta J_0 m) \tag{4.14}$$

Risolvendo numericamente la (4.14), si trova che la soluzione simmetrica è stabile solamente per valori oltre la linea denominata AT^2 : quindi ho ottenuto che la soluzione RS non è stabile nella fase di vetro di spin.

Da quanto detto, emerge inoltre l'esistenza di una nuova fase: la fase mista, indicata con la lettera M in figura 4.1: in questa regione, il comportamento dei vetri di spin è ferromagnetico; tuttavia, dato che in quella regione il *replicone mode* della RS è negativo, una soluzione stabile potrà essere ottenuta solo mediante la rottura di simmetria delle repliche.

Analogamente si può analizzare il caso con h finito e non nullo, con una distribuzione delle interazioni centrata in $J_0 = 0$. Svolgendo procedimenti del tutto analoghi al caso precedente, si ottiene la condizione di positività del *replicone mode* seguente

$$\left(\frac{T}{J}\right)^2 > \int Dz \,\operatorname{sech}^4(\beta J \sqrt{q} z + \beta h) \tag{4.15}$$

Anche in questo caso, il limite della stabilità è segnato dalla linea AT.

²Da Almeida e Thouless, i nomi degli scienziati che per primi la descrissero

4.3.2 Entropia negativa

Considero la distribuzione delle probabilità delle J_{ij} (3.5) centrata in zero; lo scopo è valutare l'entropia dello stato fondamentale di un vetro di spin nel caso di temperature molto basse.

In primo luogo ricavo la forma del parametro d'ordine q per valori minimi di temperatura: notiamo immediatamente che per $T \to 0$, q tende ad assumere il valore unitario; supponiamo di poter approssimare q a 1 all'interno dell'espressione (4.3) di $\tilde{H}(z)$. Approssimo allora q come

$$q = 1 - \int Dz \operatorname{sech}^2(\beta \tilde{H}(z)) = 1 - \frac{1}{\beta J} \int Dz \frac{d}{dz} \operatorname{tgh} (\beta Jz)$$

Dato che J è una costante, si può notare inoltre che

$$\operatorname{tgh} (\beta Jz) \xrightarrow{T \to 0} \theta(z) - \theta(-z)$$

dove θ è la funzione di Heaviside. Allora

$$q = 1 - \frac{1}{\beta J} \int Dz \frac{d}{dz} [\theta(z) - \theta(-z)] = 1 - \frac{1}{\beta J} \int dz \frac{e^{-z^2/2}}{\sqrt{2\pi}} [\delta(z) + \delta(-z)] =$$
$$= 1 - \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{1}{\beta J} \int e^{-z^2/2} \delta(z) = 1 - \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{T}{J}$$
(4.16)

A questo punto valuto l'energia libera a partire dalla (4.7):

• il primo termine può essere direttamente calcolato inserendo l'espressione (4.16) di q appena ricavata

$$\frac{\beta^2 J^2}{4} (1-q)^2 = \frac{1}{2\pi} \tag{4.17}$$

• il secondo termine si osserva essere l'integrale di una funzione pari: può quindi essere valutato come

$$\int_{-\infty}^{+\infty} Dz \ln(2\cosh(\beta J\sqrt{q}z)) = 2 \int_{0}^{+\infty} Dz \ln\left(e^{\beta J\sqrt{q}z} + e^{-\beta J\sqrt{q}z}\right) =$$
$$= 2 \int_{0}^{+\infty} \left[Dz \ln\left(1 - e^{-2\beta J\sqrt{q}z}\right) - \ln\left(e^{-\beta J\sqrt{q}z}\right)\right] =$$
$$= 2 \int_{0}^{+\infty} Dz \ln\left(1 - e^{-2\beta J\sqrt{q}z}\right) + 2 \int_{0}^{+\infty} Dz \beta J\sqrt{q}z$$

notando che il secondo integrale può essere risolto

$$\int_{0}^{+\infty} Dz \ \beta J \sqrt{q} z = -\beta J \sqrt{\frac{q}{2\pi}} \int_{0}^{+\infty} dz \frac{d}{dz} \exp\left(\frac{z^2}{2}\right) = \beta J \sqrt{\frac{q}{2\pi}}$$

sviluppo in serie di Taylor in un intorno di T = 0

$$\sqrt{q} = \sqrt{1 - \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{T}{J}} \approx 1 - \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{T}{J}$$
$$\ln\left(1 - e^{-2\beta J\sqrt{q}z}\right) \approx e^{-2\beta J\sqrt{q}z}$$

per ottenere infine

$$\int_{-\infty}^{+\infty} Dz \ln(2\cosh(\beta J\sqrt{q}z)) \approx 2 \int_{0}^{+\infty} Dz \, e^{-2\beta J\sqrt{q}z} + 2\frac{\beta J}{\sqrt{2\pi}} \left(1 - \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\frac{T}{J}\right) \approx \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sqrt{\frac{2}{\pi}}\frac{J}{T} - \frac{1}{\pi}$$
(4.18)

dove si è notato che il termine integrale è $o_{T \to 0}(T^2)$

L'espressione approssimata dell'energia libera risulta allora dalla (4.17) e dalla (4.18)

$$-\beta \langle f \rangle_{\mathbf{J}} \approx \frac{1}{2\pi} + \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{J}{T} - \frac{1}{\pi} = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{J}{T} - \frac{1}{2\pi}$$
(4.19)

di conseguenza si osserva che l'energia libera e l'entropia dello stato fondamentale sono

$$\langle f \rangle_{\mathbf{J}} = -\sqrt{\frac{2}{\pi}}J \\ s = -\frac{\partial \langle f \rangle_{\mathbf{J}}}{\partial T} = -\frac{1}{2\pi}$$

Tale risultato è chiaramente incompatibile con le ipotesi del nostro problema: la soluzione simmetrica è quindi da scartare nella fase di vetro di spin.

Nella prima fase della ricerca su questi temi si credeva che tale assurdo fosse dovuto allo scambio dei limiti

$$N \to +\infty \qquad \qquad n \to 0$$

nel calcolo effettuato per ottenere la (3.17). In seguito si capì invece che è l'assunzione di simmetria delle repliche $q_{\alpha\beta} = q \forall \alpha, \beta$ a causare questa incongruenza.

Capitolo 5

Rottura della simmetria delle repliche

Dato l'insuccesso della soluzione simmetrica, è necessario ammettere che non tutte le repliche siano caratterizzate allo stesso modo: è naturale quindi supporre che i parametri d'ordine $q_{\alpha\beta} \in m_{\alpha}$ mostrino una qualche dipendenza dagli indici delle repliche dai quali sono distinti. In realtà, solo il parametro d'ordine dei vetri di spin necessita di tale dipendenza: m_{α} sarà quindi il medesimo per ogni replica, mentre per $q_{\alpha\beta}$ la situazione si complicherà. Purtroppo non è ancora stata individuata una motivazione alla base di tale rottura di simmetria, dunque non v'è un punto di partenza teorico saldo su cui basarsi per cercare la nuova soluzione: l'unico modo per procedere è effettuare dei tentativi per poi testarne la correttezza (ad esempio calcolandone la stabilità nella fase SG e l'entropia dello stato fondamentale).

L'unica soluzione che al giorno d'oggi rispetta tutte le condizioni del problema è quella proposta da Giorgio Parisi nel 1979, che sarà descritta in seguito. Seppur introdotta come un artificio matematico per impedire conseguenze non fisiche dei sistemi, tale soluzione si dimostra origine di molte implicazioni interessanti, che rispecchiano l'effettivo comportamento dei vetri di spin in ambito sperimentale: la presenza di molti stati (meta)stabili e l'ultrametricità dello spazio delle soluzioni sono solo alcune di esse.

5.1 Soluzione di Parisi

La strategia di Parisi si basa su una sorta di algoritmo che mediante passaggi consecutivi porta alla costruzione della soluzione. Il fisico italiano suppose che i parametri $q_{\alpha\beta}$ costituiscano gli elementi di matrici $n \times n$ determinabili tramite la rottura da simmetria in seguito descritta a partire dalla soluzione RS.

Prima di iniziare, osservo che l'identificazione di $q_{\alpha\beta}$ come elemento di matrice porta ad una "reinterpretazione matematica" della sommatoria sulle configurazioni degli spin \underline{S} : essa infatti potrà esprimersi come la traccia della matrice; nel proseguimento, perciò avrò la sostituzione di tali simboli

$$\sum_{\underline{S}} \longrightarrow \mathrm{Tr} \tag{5.1}$$

Per addentrarsi nella soluzione di Parisi, è bene analizzare un esempio, in modo da poter avere un riscontro concreto dei passaggi effettuati. Consideriamo quindi 12 repliche di un dato sistema: avremo perciò n = 12, quindi $\alpha, \beta = 1, ..., 12$; la soluzione simmetrica in questo caso è rappresentata dalla seguente matrice¹

dove si hanno solamente degli zeri sulla diagonale principale, mentre tutti gli elementi $q_{\alpha\beta}$ tali che $\alpha \neq \beta$ possiedono il valore $q_{\alpha\beta} = q_0$, ovvero la soluzione simmetrica delle repliche (indicata semplicemente con q nel capitolo precedente).

Il primo passaggio della rottura di simmetria è attuato introducendo un numero naturale $m_1 \leq n$ e formando n/m_1 blocchi quadrati di dimensione m_1 da disporsi lungo la diagonale principale; in questi blocchi, il valore q_0 è rimpiazzato da q_1 . Tornando all'esempio, scelgo $m_1 = 6$: si formeranno $n/m_1 = 12/6 = 2$ blocchi di dimensione 6

¹il simbolo ^ sarà utilizzato per distinguere la matrice dai suoi elementi

sulla diagonale principale

$$\hat{q}_{\alpha,\beta} = \begin{pmatrix} 0 & & & & & & & & \\ 0 & & q_1 & & & & & \\ & 0 & & & q_0 & & & \\ & & 0 & & & & & \\ q_1 & 0 & & & & & \\ & & 0 & & & & \\ & & & 0 & & & \\ & & & 0 & & & \\ q_0 & & & 0 & & \\ & & & & q_1 & & 0 \\ & & & & & & 0 \end{pmatrix}$$
(5.3)

Il secondo step di tale procedura è molto simile a quello appena descritto: si sceglie un numero naturale $m_2 \leq m_1$ e si divide ogni blocco sulla diagonale in m_1/m_2 blocchi quadrati di dimensione m_2 , nei quali il valore q_1 va rimpiazzato con q_2 ; i blocchi non diagonali sono lasciati inalterati. Continuando a sviluppare l'esempio, scegliendo $m_2 = 2$, si formano $m_1/m_2 = 6/2 = 3$ blocchi di dimensione 2 all'interno di ognuno dei blocchi formatisi nel primo passaggio

In generale, posso ripetere questo procedimento p volte; intendendo con m_0 la dimensione della matrice (definendo perciò $m_0 = n$), devono rispettarsi le condizioni seguenti

$$\forall i = 0, ..., p - 1$$
 1. $m_i \ge m_{i+1}$ 2. $m_i \ge 1$ (5.5)

Si definisce poi una funzione q(x) tale che

$$q(x) = q_i \qquad \forall x \mid m_{i+1} < x \leqslant m_i \tag{5.6}$$

e si esegue il limite per $n \to 0$, come previsto dalla procedura del metodo delle repliche (vedi sezione 3.4.2). Facendo ciò, le condizioni espresse in (5.6) si invertono in un certo qual senso, divenendo

$$0 \leqslant m_1 \leqslant m_2 \leqslant \dots \leqslant m_p \leqslant 1 \tag{5.7}$$

Di conseguenza, x sarà compreso tra 0 e 1; si suppone inoltre che la funzione q sia continua e restituisca valori anch'essi compresi tra 0 ed 1. Si mostrerà come q(x) sia una funzione d'ordine dei vetri di spin, analoga ad un parametro d'ordine ma con un argomento continuo.

5.2 1RSB: prima rottura di simmetria delle repliche

Mi propongo ora di valutare le principali grandezze fisiche nel contesto del primo passaggio della rottura di simmetria delle repliche; in primo luogo, intendo calcolare l'energia libera, a partire dalla relazione (3.17). Per prima cosa valuto L, la cui espressione è (3.14), in particolare il termine in cui compare $q_{\alpha\beta}$

$$\sum_{\alpha \neq \beta} q_{\alpha\beta} S^{\alpha} S^{\beta} = q_0 \left(\sum_{\alpha} S^{\alpha}\right)^2 + (q_1 - q_0) \sum_{\Gamma=1}^{n/m_1} \left(\sum_{\alpha \in \Gamma}^{m_1} S^{\alpha}\right)^2 - nq_1$$

dove Γ è un indice introdotto per per caratterizzare i blocchi della matrice $\hat{q}_{\alpha\beta}$. Si osserva che è possibile intuire chiaramente il ruolo di ogni termine nella precedente espressione: il primo riempie tutti gli elementi della matrice con il valore del parametro d'ordine dei vetri di spin nel caso della RS, il secondo sostituisce q_1 a q_0 all'interno dei blocchi diagonali formati nello step di rottura della simmetria e l'ultimo fa sì che sulla diagonale tutti gli elementi si annullino.

Calcolo poi il termine che dipende quadraticamente in maniera esplicita da $q_{\alpha\beta}$ nel limite $n\to 0$

$$\lim_{n \to 0} \frac{1}{n} \sum_{\alpha \neq \beta} q_{\alpha\beta}^2 = \lim_{n \to 0} \frac{1}{n} \left[n^2 q_0^2 + \frac{n}{m_1} m_1^2 (q_1^2 - q_0^2) - n q_1^2 \right] = (m_1 - 1) q_1^2 - m_1 q_0^2$$

Inserisco ciò nell'espressione (3.17) dell'energia libera, ricordando che $m_{\alpha} = m$ per ognuna delle *n* repliche

$$-\beta \langle f \rangle_{\mathbf{J}} = \frac{\beta^2 J^2}{4} - \frac{\beta^2 J^2}{4} \left[(m_1 - 1)q_1^2 - m_1 q_0^2 \right] - \frac{\beta J_0}{2} m^2 + \\ + \lim_{n \to 0} \left(\frac{1}{n} \ln \operatorname{Tr} \exp\left\{ \frac{\beta^2 J^2}{2} \left[q_0 \left(\sum_{\alpha} S^{\alpha} \right)^2 + (q_1 - q_0) \sum_{\Gamma=1}^{n/m_1} \left(\sum_{\alpha \in \Gamma}^{m_1} S^{\alpha} \right)^2 - nq_1 \right] + \beta \sum_{\alpha} (J_0 m + h) \sum_i S_i^{\alpha} \right\} \right)$$
(5.8)

In questa espressione, decisamente complessa, mi accorgo che all'interno dell'esponenziale si presentano $1 + n/m_1$ termini che dipendono dal quadrato della somma degli spin; per poter procedere è necessario linearizzare quei termini: introduco allora altrettante variabili gaussiane per gli integrali della forma (A.1) ed eseguo conti analoghi a quelli svolti nel caso simmetrico. Applicando infine il limite per $n \to 0$ anche al termine esponenziale si ottiene finalmente

$$\beta \langle f_{1RSB} \rangle_{\mathbf{J}} = \frac{\beta^2 J^2}{4} \left[(m_1 - 1)q_1^2 - m_1 q_0^2 + 2q_1 - 1 \right] + \frac{\beta J_0}{2} m^2 - \ln 2 - \frac{1}{m_1} \int Du \ln \int Dv \cosh^{m_1} \Xi$$
(5.9)

dove

$$\Xi = \beta \left(J \sqrt{q_0} u + J \sqrt{q_1 - q_0} v + J_0 m + h \right)$$
(5.10)

5.2.1 Equazioni di stato

Estremizzando l'energia libera per i parametri q_0 , q_1 , $m \in m_1$ ottengo le equazioni; riporto di seguito le espressioni che si ricavano in questo modo, omettendo quella per il parametro m_1 che risulta molto complessa e non viene impiegata nel resto della trattazione

$$m = \int Du \frac{\int Dv \cosh^{m_1} \Xi \, \text{tgh } \Xi}{\cosh^{m_1} \Xi} \tag{5.11}$$

$$q_0 = \int Du \left(\frac{\int Dv \cosh^{m_1}\Xi \, \text{tgh }\Xi}{\cosh^{m_1}\Xi}\right)^2 \tag{5.12}$$

$$q_1 = \int Du \frac{\int Dv \cosh^{m_1} \Xi \, \mathrm{tgh}^2 \Xi}{\cosh^{m_1} \Xi} \tag{5.13}$$

con $q_1 \ge q_0$ garantito dalla disequazione di Schwarz.

Notiamo che nelle equazioni (5.11) e (5.13) le espressioni integrande sono rispettivamente la magnetizzazione ed il parametro d'ordine della 1RSB valutati su un singolo blocco; dunque m e q_1 si possono interpretare rispettivamente come le medie, con peso gaussiano, sui blocchi della matrice.

Inoltre, ricordando l'espressione (3.23) di $q_{\alpha\beta}$ che riporto per comodità con la sostituzione (5.1)

$$q_{\alpha\beta} = \frac{\operatorname{Tr} S^{\alpha} S^{\beta} e^{L}}{\operatorname{Tr} e^{L}}$$
(5.14)

si può verificare che, calcolando la traccia della matrice:

- se α e β appartengono allo stesso blocco, si ottiene l'espressione di q_1
- se $\alpha \in \beta$ appartengono a blocchi differenti, si ottiene l'espressione di q_0

Posso infine osservare che la transizione tra la fase paramagnetica e quella di vetro di spin per la 1RSB avviene alla stessa temperatura della soluzione simmetrica. Presi $J_0 = h = 0$, la funzione Ξ è dispari rispetto a v ed u, di conseguenza l'integrale (5.11) che definisce la magnetizzazione è nullo²; sviluppando in serie di Taylor la (5.13) per valori piccoli di q_0 e q_1 si ottiene al primo ordine

$$q_1 \approx \beta^2 J^2 q_1$$

Di conseguenza, la transizione P \leftrightarrow SG avviene anche in questo caso a $T_f = J$.

5.2.2 Stabilità ed entropia

Riporto alcuni risultati dapprima sulla stabilità della soluzione 1RSB; anche in questo frangente è in esame il caso con $J_0 = h = 0$. Si possono distinguere due situazioni:

• se α e β appartengono allo stesso blocco, allora la condizione di stabilità del *replicone mode* può essere espressa come

$$\lambda_3 = 1 - \beta^2 J^2 \int Du \frac{\int Dv \cosh^{m_1 - 4} \Xi}{\int Dv \cosh^{m_1} \Xi} > 0$$
(5.15)

• se α e β si trovano in blocchi differenti, la condizione di stabilità del *replicone mode* risulta

$$\lambda_3 = 1 - \beta^2 J^2 \int Du \left(\frac{\int Dv \cosh^{m_1 - 1}\Xi}{\int Dv \cosh^{m_1}\Xi} \right)^4 > 0$$
(5.16)

dove Ξ è la quantità definita in (5.10). Impiegando la disuguaglianza di Schwarz, si nota che la prima condizione è più restrittiva in quanto l'integrale in essa è maggiore di quello presente nella condizione successiva; di conseguenza è sufficiente considerare solo la (5.15).

Si può verificare numericamente che l'autovalore, anche in questo caso, assume un valore negativo nella fase SG; tuttavia il suo valore è molto più prossimo allo zero rispetto a quello ottenuto nel caso della RS.

Il medesimo comportamento è esibito dall'entropia: da un valore di $-1/2\pi \approx -0.16$ nel caso della soluzione simmetrica, si passa ad un valore di -0.01 in questa circostanza.

Questi risultati dimostrano che la soluzione non è ancora esatta ma che è stato compiuto un passo nel giusto verso: ci si aspetta perciò che proseguendo con la rottura di simmetria si ottengano valori sempre migliori.

 $^{^2 {\}rm coerentemente}$ con quanto avviene nella RS: per una distribuzione delle probabilità di J centrata nell'origine non si può assistere alla fase ferromagnetica

5.3 FRSB: rottura completa di simmetria delle repliche

Dopo aver visto cosa succede quando v'è una prima rottura della simmetria delle repliche, procedo con il metodo descritto all'inizio del capitolo per valutare le principali grandezze termodinamiche nel caso della FRSB; pongo $J_0 = 0$ per semplicità.

In primo luogo valuto l'energia libera dello step *p*-esimo della rottura di simmetria (pRSB). Il primo passo è calcolare quanto vale la sommatoria in cui compare la somma dei quadrati di $q_{\alpha\beta}$. Volendo generalizzare un minimo, posso selezionare un intero *l* arbitrario e scrivere

$$\sum_{\alpha \neq \beta} q_{\alpha\beta}^{l} = q_{0}^{l} n^{2} + (q_{1}^{l} - q_{0}^{l}) m_{1}^{2} \frac{n}{m_{1}} + (q_{2}^{l} - q_{1}^{l}) m_{2}^{2} \frac{n}{m_{1}} + \dots - n q_{p}^{l} =$$
$$= n \sum_{i=0}^{p} (m_{i} - m_{i+1}) q_{i}^{l}$$

dove nell'ultimo passaggio ho indicato $n = m_0$ e $m_{p+1} = 1$. L'interpretazione dei singoli termini che compaiono nell'equazione è analoga a quella spiegata nel caso della 1RSB.

Nel limite $n \to 0$, i numeri m_i diventano reali compresi tra 0 e 1; se gli step della RSB sono numerosi, la differenza tra due di essi diviene sempre minore, a tal punto da poter essere considerata come una variabile continua: posso allora fare il passaggio $m_i - m_{i+1} \leftrightarrow -dx$. Allora, nel limite per $n \to 0$ posso considerare la sostituzione

$$\frac{1}{n}\sum_{\alpha\neq\beta}q_{\alpha\beta}^{l}\to -\int_{0}^{1}dx\,q^{l}(x)$$
(5.17)

L'energia interna, a questo punto, può essere ottenuta semplicemente dalla (3.20) utilizzando la precedente relazione

$$U = -\frac{\beta J^2}{2} \left(1 - \int_0^1 dx \, q^2(x) \right) \tag{5.18}$$

dove si è omesso il simbolo $\langle ... \rangle_{\mathbf{J}}$ per alleggerire la notazione: altrettanto si farà in seguito dove non specificato diversamente. Analogamente si procede per la suscettività magnetica: dalla (3.21)

$$\chi = \beta \left(1 - \int_0^1 dx \, q(x) \right) \tag{5.19}$$

Infine, mi interesso all'energia libera; il calcolo di questa grandezza per lo schema completo di rottura della simmetria risulta un po' ostico. Riporto quindi solo l'espressione finale, che risulta

$$\beta \langle f_{FRSB} \rangle_{\mathbf{J}} = -\frac{\beta^2 J^2}{4} \left[1 + \int_0^1 q^2(x) dx - 2q(1) \right] - \int Dz f_0(0, \sqrt{q(0)}z)$$
(5.20)

dove f_0 è una funzione a due variabili che soddisfa l'equazione di Parisi

$$\frac{\partial f_0(x,h)}{\partial x} = -\frac{J^2}{2} \frac{dq}{dx} \left[\frac{\partial^2 f_0(x,h)}{\partial h^2} + x \left(\frac{\partial f_0(x,h)}{\partial h} \right)^2 \right]$$
(5.21)

con la condizione iniziale

$$f_0(1,h) = \ln[2\cosh(\beta h)] \tag{5.22}$$

5.3.1 Parametri d'ordine vicino al punto critico

In generale è difficile trovare una soluzione alla condizione di estremizzazione per l'energia libera (5.20) rispetto a q(x). Tuttavia possiamo ancora una volta applicare la teoria di Landau (vedi sezione 2.3.1) nella circostanza in cui la temperatura è vicina al valore critico T_c e di conseguenza q(x) è piccolo; pongo per il momento $J_0 = h = 0$ ed espando l'energia libera (3.17) al quarto ordine in $q_{\alpha\beta}$, omettendo i termini che non dipendono da $q_{\alpha\beta}$

$$-\beta f = \lim_{n \to 0} \frac{1}{n} \left[\frac{1}{4} \left(\frac{T^2}{T_f^2} - 1 \right) \operatorname{Tr} Q^2 - \frac{1}{6} \operatorname{Tr} Q^3 - \frac{1}{8} \operatorname{Tr} Q^4 + \frac{1}{4} \sum_{\alpha \neq \beta \neq \gamma} Q^2_{\alpha\beta} Q^2_{\alpha\gamma} - \frac{1}{12} \sum_{\alpha \neq \beta} Q^4_{\alpha\beta} \right]$$

dove si è indicato $Q_{\alpha\beta} = \beta^2 J^2 q_{\alpha\beta}$ e $Q = \beta^2 J^2 q$, con q soluzione della RS (4.6).

L'ultimo termine dell'espressione precedente è quello che caratterizza la rottura di simmetria delle repliche, nonchè l'unico che rende la soluzione RS instabile al di sotto di T_c ; ignorando tutti i termini del quarto ordine eccetto quello ed eseguendo il limite per $n \to 0$ si ottiene

$$\beta f = \frac{1}{2} \int_0^1 dx \left[|\tau| q^2(x) - \frac{1}{3} x q^3(x) - q(x) \int_0^x dy \, q^2(y) + \frac{1}{6} q^4(x) \right]$$
(5.23)

dove y è una variabile di integrazione ed è stato definito

$$\tau = \frac{T_f - T}{T_f} \tag{5.24}$$

Allora la condizione di estremizzazione rispetto a q(x), ottenuta derivando l'espressione precedente in tale variabile, risulta

$$2|\tau|q(x) - xq^{2}(x) - \int_{0}^{x} dy \, q^{2}(y) - 2q(x) \int_{x}^{1} dy \, q(y) + \frac{2}{3}q^{3}(x) = 0$$
 (5.25)

Differenziando poi quanto ottenuto ottengo

$$2q'(x)\left[|\tau| - xq(x) - \int_0^x dy \, q(y) + q^2(x)\right] = 0$$

e differenziando ulteriormente il termine tra parentesi, si possono scrivere le due soluzioni

$$q'(x) = 0 \tag{5.26}$$

$$q(x) = \frac{x}{2} \tag{5.27}$$

• la (5.26) corrisponde ad una soluzione costante, ovvero la soluzione del caso simmetrico; essa è determinata dalla (5.25) e risulta valere

$$q(x) = |\tau| \tag{5.28}$$

• la (5.27) invece costituisce una soluzione dipendente da x, che può essere espressa come

$$q = \begin{cases} x/2 & \text{per} \quad x \in [0, 2q(1)] \\ q(1) & \text{per} \quad x \in [2q(1), 1] \end{cases}$$
(5.29)

ed inserendo tale soluzione all'interno di (5.25) si ottiene il valore della funzione all'estremo superiore x = 1

$$q(1) = |\tau| + o_{x \to 1}(\tau^2) \tag{5.30}$$

Dalla (5.19), la suscettività magnetica, in prossimità della temperatura critica T_f vale

$$\chi = \beta_f \left(1 - \int_0^{2q(1)} dx \, \frac{x}{2} + \int_{2q(1)}^1 dx \, q(1) \right) = \beta_f \left(1 - |\tau|^2 + |\tau| - 2 \, |\tau|^2 \right) =$$
$$= \frac{1}{T_f} \left(1 - \frac{|T_f - T|}{T_f} + o_{T \to T_f} \left(\, |\tau|^2 \, \right) \right) \approx \frac{1}{T_f} = \frac{1}{J}$$
(5.31)

dove sono state impiegate le soluzioni (5.29) e (5.30) della condizione di estremizzazione di q(x) in prossimità del punto critico T_c , la definizione (5.24) di τ e la relazione (4.8).

Si può mostrare che χ mantiene tale valore in tutta la regione al di sotto di T_f : questo fatto consente di ricavare il confine tra le fasi F ed SG nel caso della FRSB. Dalle espressioni (3.17) dell'energia libera e (3.4) dell'Hamiltoniana del modello di Sherrington-Kirkpatrik, si intuisce che un cambio del centro (media) della distribuzione degli J_{ij} da 0 a J_0/N modifichi l'energia libera per spin con un termine $-J_0m^2/2$; dato che $\sum_{\alpha} m_{\alpha}^2 = nm^2$, si ha perciò

$$f(T, m, J_0) = f(T, m, 0) - \frac{J_0 m^2}{2}$$
(5.32)

Inoltre, dalle relazioni (2.14), (2.15) e dalla legge termodinamica

$$\frac{\partial f(T,m,0)}{\partial m} = h$$

siccome per $J_0 = h = 0$ si ham = 0 (vedi la sezione 4.2) , ottengo poi

$$\chi^{-1} = \left(\frac{\partial m}{\partial h}\Big|_{h \to 0}\right)^{-1} = \frac{\partial^2 f(T, m, 0)}{\partial m^2}\Big|_{m \to 0}$$
(5.33)

Allora, combinando le ultime due relazioni, si ha che per m sufficientemente piccoli vale

$$f(T,m,0) = f(T,0,0) + \frac{1}{2}\chi^{-1}m^2$$
(5.34)

dove ho omesso il termine di primo grado in quanto la derivata dell'energia libera si deve annullare per la condizione di estremizzazione.

Indicando con $f_0(T) = f(T, 0, 0)$, dalla (5.32) e dalla (5.34) si ottiene

$$f(T, m, J_0) = f_0(T) + \frac{1}{2} \left(\chi^{-1} - J_0 \right) m^2$$
(5.35)

A questo punto possiamo finalmente applicare la teoria di Landau (vedi sezione 2.3.1): il coefficiente di m^2 si annulla per $\chi = 1/J_0$, di conseguenza per tale valore si avrà una transizione di fase. Poichè abbiamo precedentemente discusso il fatto che $\chi = 1/J$ in tutto il range di temperature T tali che $T < T_f$, concludiamo che il confine tra F e SG esiste a $J = J_0$.

5.3.2 Stabilità della FRSB

Si può mostrare che il *replicone mode* nella soluzione di Parisi ha un valore nullo: ciò rende l'hessiana semidefinita positiva, quindi stabile marginalmente. Questa soluzione è l'unica che fino ad oggi è stata scoperta con tutti gli autovalori non negativi.

5.4 Implicazioni fisiche della RSB

In questa sezione analizzo i molteplici risvolti della rottura della simmetria delle repliche la quale, nonostante sia stata introdotta per pura convenienza, si dimostra ricca di implicazioni fisiche.

5.4.1 Struttura a molte valli e stati puri

Una delle peculiarità dei vetri di spin è il profilo dell'energia libera che manifestano: esso appare assai complicato, come si nota dalla figura 5.1, in maniera assai differente da quello di un materiale ferromagnetico mostrato in figura 2.2. L'energia libera di un vetro di spin, in funzione dello stato assunto dal sistema, presenta molti minimi locali: solo alcuni di essi costituiscono dei minimi assoluti per tale funzione, quindi individuano uno

Figura 5.1: Profilo energetico tipo di un vetro di spin, dove ϕ è una coordinata di stato astratta. Immagine prelevata da pagina 88 della fonte [5].

degli stati fondamentali; il fatto che lo stato fondamentale sia degenere è conseguenza diretta della frustrazione (vedi 3.2.2) e rispecchia la proprietà che una matrice ottenuta mediante una qualsiasi permutazione degli indici delle repliche di una soluzione della $\hat{q}_{\alpha\beta}$ di RSB è a sua volta una soluzione.

I punti di minimo dell'energia libera, come evidente in 5.1, sono separati da barriere energetiche più o meno alte: in particolare, si osserva sperimentalmente che le barriere di energia tra i minimi assoluti aumentano proporzionalmente alla dimensione del sistema.

Assumendo ciò, è possibile dare un'interpretazione fisica chiara della RSB. Si supponga che la dimensione del sistema sia molto elevata ma finita: il sistema allora sarà "intrappolato" all'interno di una valle attorno ad un minimo assoluto dell'energia libera per un lungo lasso di tempo; in questo caso, lo stato assunto dal sistema viene definito *puro*. Posso allora ricavare la probabilità che il sistema si trovi nella valle a, ovvero che si trovi nello stato puro a

$$P_a = \frac{e^{-\beta F_a}}{Z} \tag{5.36}$$

dove F_a è l'energia libera posseduta dal sistema nello stato considerato.

Tuttavia dopo un tempo ancor più esteso, si suppone che il sistema possa evolvere superando le barriere che separano le valli, potendosi così spostare nelle altre; quindi, ad un tempo estremamente lungo, è possibile osservare un comportamento che riflette le proprietà di tutte le valli. Tale situazione è quella solitamente considerata in meccanica statistica all'equilibrio, in cui il sistema è in grado di "esplorare" tutto lo spazio delle configurazioni. Sulla base di ciò, si può esprimere la magnetizzazione per spin del sito *i*-esimo considerando il "contributo" di ogni valle, pesato in base a (5.36)

$$m_i = \sum_a P_a m_i^a \tag{5.37}$$

5.4.2 Parametri d'ordine della RSB

Posso introdurre due parametri d'ordine che rendano conto delle due situazioni descritte in precedenza.

Per comprendere l'ordine/disordine degli spin in una singola valle, introdo la quantità

$$q_{EA} = \lim_{t \to \infty} \lim_{N \to \infty} \left\langle \left\langle S_i(t_0) S_i(t_0 + t) \right\rangle_{\rm GB} \right\rangle_{\mathbf{J}} \quad ^3 \tag{5.38}$$

appropriata una volta che si considera il limite termodinamico, quindi barriere energetiche molto elevate tra le valli, che sostanzialmente impediscono le transizioni tra quest'ultime. Tale parametro misura la similitudine (o sovrapposizione) dello stato dello spin nel sito *i*-esimo al tempo iniziale t_0 con se stesso, una volta trascorso un lungo lasso di tempo. Il significato fisico di tale quantità suggerisce l'equivalenza con la media dei quadrati delle magnetizzazioni per spin di ogni replica, ovvero

$$q_{EA} = \left\langle \sum_{a} P_a(m_i^a)^2 \right\rangle_{\mathbf{J}} = \left\langle \sum_{a} P_a \frac{1}{N} \sum_{i} (m_i^a)^2 \right\rangle_{\mathbf{J}}$$
(5.39)

dove, nel secondo passaggio, si è assunto che $(m_i^a)^2$ non dipenda dal sito *i* considerato.

Possiamo poi definire un altro parametro d'ordine che rappresenti la media su tutte le valli, corrispondente ad un'osservazione ancor più prolungata del sistema (di una scala temporale superiore rispetto a quella tipica delle transizioni tra le valli): si tiene perciò conto, in questo caso, della sovrapposizione tra le valli

$$\overline{q} = \left\langle \left(\sum_{a} P_{a} m_{i}^{a}\right)^{2} \right\rangle_{\mathbf{J}} = \left\langle \sum_{a,b} P_{a} P_{b} m_{i}^{a} m_{i}^{b} \right\rangle_{\mathbf{J}} = \frac{1}{N} \left\langle \sum_{a,b} P_{a} P_{b} \sum_{i} m_{i}^{a} m_{i}^{b} \right\rangle_{\mathbf{J}} = \left\langle m_{i}^{2} \right\rangle_{\mathbf{J}} = \left\langle \langle S_{i} \rangle_{\mathrm{GB}}^{2} \right\rangle_{\mathbf{J}}$$
(5.40)

dove è stata impiegata la relazione (5.37) nel passaggio tra la prima e la seconda riga.

In generale si osserva che

$$q_{EA} \geqslant \overline{q} \tag{5.41}$$

In particolare, i due parametri coincidono (ovvero vale l'uguaglianza nella precedente relazione) precisamente quando esiste un'unica valle di energia libera; negli altri casi, q_{EA} risulta maggiore di \bar{q} . La differenza $q_{EA} - \bar{q}$ misura perciò, in un certo senso, l'esistenza di una struttura a molte valli.

Ci si può aspettare uno spettro continuo di parametri d'ordine tra $q_{EA} \in \overline{q}$, associato alla varietà dei gradi di transizione tra valli; analizzò come ciò corrisponda alla funzione continua q(x), soluzione della RSB.

 $^{^{3}\}mathrm{Il}$ pediceEAfa riferimento agli scienziati Edward ed Anderson che per primi introdussero il parametro

5.4.3 Distribuzione delle sovrapposizioni

Definiamo la sovrapposizione tra due valli $a \in b$

$$q_{ab} = \frac{1}{N} \sum_{i} m_i^a m_i^a \tag{5.42}$$

Si può dimostrare che tale grandezza si annulla per valli completamente non correlate tra loro, mentre ha un massimo quando le due valli $a \in b$ coincidono: per tale situazione vale la relazione

$$q_{EA} = \left\langle \sum_{a} P_a q_{aa} \right\rangle_{\mathbf{j}}$$

Definisco ora la distribuzione relativa alla sovrapposizione tra $a \in b$: per una data interazione **J** casuale si ha

$$P_{\mathbf{J}}(q) = \langle \delta(q - q_{ab}) \rangle_{\mathrm{GB}} = \sum_{a,b} P_a P_b \,\delta(q - q_{ab}) \tag{5.43}$$

Torniamo all'esempio di un materiale ferromagnetico: per esso ci saranno solamente due valli e i valori che possono essere assunti da q_{ab} sono solamente $\pm m^2$; di conseguenza P(q) sarà costituita da due sole delta di Dirac $\delta(q \pm m^2)$ e sarà rappresentabile come in figura (5.2a). Se invece il materiale considerato presenta una struttura dell'energia libera a molte valli (come un vetro di spin), q_{ab} può assumere più valori e $P_{\mathbf{J}}(q)$ assumerà di conseguenza una forma più complessa, come mostrato in figura 5.2b.

E' interessante inoltre osservare che, indipendentemente da quanto grande si preso il numero di siti N, la distribuzione delle sovrapposizioni cambia a seconda dell'insieme delle interazioni **J** che si considera: in altre parole, la distribuzione delle sovrapposizioni non è *self-avereging* (al contrario dell'energia libera per spin, ad esempio); ciò significa che si avranno variazioni della grandezza anche a livello macroscopico per un cambiamento delle interazioni tra spin.

Infine può essere introdotto il cosiddetto *parametro d'ordine di Parisi*, che consiste nella media configurazionale della distribuzione delle sovrapposizioni

$$P(q) = \langle P_{\mathbf{J}}(q) \rangle_{\mathbf{J}} \tag{5.44}$$

Nel caso di un materiale ferromagnetico, questa grandezza coincide con la (5.43), quindi la rappresentazione è sempre quella in figura 5.2a; per un vetro di spin, invece, P(q)assume la forma mostrata in figura 5.3.

5.4.4 Rappresentazione dei parametri d'ordine in termini delle repliche

Cerco ora di connettere quanto elaborato fin'ora in questa sezione con la soluzione di Parisi descritta in precedenza. Per cominciare, osservo che è possibile intendere la quan-



Figura 5.2: Rappresentazione della distribuzione delle sovrapposizioni per un materiale ferromagnetico e per un vetro di spin. Immagini prelevate da pagina 103 della fonte [5].



Figura 5.3: Illustrazione del parametro d'ordine di Parisi P(q). Immagine prelevata da pagina 105 della fonte [5].

tità $q_{\alpha\beta}$ nel formalismo delle repliche come la sovrapposizione di due repliche α e β in un preciso sito i

$$q_{\alpha\beta} = \left\langle S_i^{\alpha} S_i^{\beta} \right\rangle_{\rm GB} \tag{5.45}$$

tale quantità avrà un valore differente, in generale, a seconda della coppia di repliche considerate.

La media su tutti i possibili valori di $q_{\alpha\beta}$ deve coincidere con la media effettuata secondo i canoni della meccanica statistica, quindi con il parametro \overline{q} ; abbiamo allora

$$\overline{q} = \lim_{n \to 0} \frac{1}{n(n-1)} \sum_{\alpha \neq \beta} q_{\alpha\beta}$$
(5.46)

dove il coefficiente che precede la sommatoria è inserito affinchè ogni coppia di repliche sia contata un'unica volta.

Invece, il parametro q_{EA} , siccome relativo ad un'unica valle, non è influenzato dalle possibili transizioni tra queste; in base alla (5.41), risulterà essere il maggiore tra tutti i valori di $q_{\alpha\beta}$

$$q_{EA} = \max_{(\alpha\beta)} q_{\alpha\beta} \tag{5.47}$$

Nel caso della FRSB, come già discusso nella sezione 5.3, si può introdurre una variabile continua $x \in [0, 1]$ che diventi argomento di una funzione continua q; è ora possibile mettere in luce i legami tra i parametri d'ordine $q_{EA} \in \overline{q}$ con la soluzione di Parisi della RSB q(x):

• per il parametro q_{EA} si ha semplicemente

$$q_{EA} = \max_{x} q(x) \tag{5.48}$$

• per il parametro \overline{q} , utilizzando l'espressione (5.17), dalla (5.46) si ha

$$\overline{q} = \int_0^1 q(x)dx \tag{5.49}$$

Si può inoltre definire x(q) come la funzione di partizione di P(q), ovvero

$$x(q) = \int_0^q dq' P(q') \qquad \frac{dx(q)}{dq} = P(q) \tag{5.50}$$

tramite la quale è esplicitato il legame tra il parametro d'ordine di Parisi e la soluzione formale della RSB. Inoltre, si evince il significato della funzione q(x): essa è la funzione inversa di x(q), la quale fornisce la probabilità di trovare una coppia di stati puri con una sovrapposizione minore o uguale a q.



Figura 5.4: Struttura ad albero degli stati di un vetro di spin. Immagine prelevata da pagina 479 della fonte [1].

5.4.5 Ultrametricità

L'ultima proprietà che descrivo è la struttura dello spazio degli stati di un vetro di spin: essi formano uno spazio ultrametrico.

Siano $a, b \in c$ tre stati; definiamo allora la distribuzione delle sovrapposizioni reciproche come

$$P_{\mathbf{J}}(q_1, q_2, q_3) = \sum_{a, b, c} P_a P_b P_c \,\delta(q_1 - q_2) \delta(q_1 - q_3) \delta(q_2 - q_3) \tag{5.51}$$

Possiamo valutarne la media configurazionale mediante il metodo della rottura di simmetria delle repliche, ottenendo

$$\langle P_{\mathbf{J}}(q_1, q_2, q_3) \rangle_{\mathbf{J}} = \frac{1}{2} P(q_1) x(q_1) \delta(q_1 - q_2) \delta(q_1 - q_3) + \frac{1}{2} P(q_1) P(q_2) \theta(q_1 - q_2) \delta(q_2 - q_3) + \frac{1}{2} P(q_2) P(q_3) \theta(q_2 - q_3) \delta(q_3 - q_1) + \frac{1}{2} P(q_3) P(q_1) \theta(q_3 - q_1) \delta(q_1 - q_2)$$
(5.52)

dove x(q) è stata definita in (5.50) e θ è la funzione di Heaviside.

Si osserva che il primo termine (nella prima riga dell'espressione) è diverso da zero se e solo se le tre sovrapposizioni q_1 , q_2 e q_3 sono uguali tra loro; gli altri tre impongono che le sovrapposizioni siano gli spigoli di un triangolo isoscele. Si può perciò strutturare lo spazio degli stati come un albero (un esempio è in figura 5.4).

La distanza tra due stati, allora, può essere intesa come il numero di livelli che è necessario risalire affinchè i due rami considerati si ricongiungano; è facile convincersi che, con questa nozione, lo spazio degli stati sia ultrametrico.

Appendice A

Appendici matematiche

A.1 Integrale Gaussiano e misura gaussiana

L'integrale gaussiano a cui si fa riferimento nel corso della trattazione è il seguente

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx \exp\left(-ax^2 + bx\right) = \sqrt{\frac{\pi}{a}} \exp\left(\frac{b^2}{4a}\right) \tag{A.1}$$

La validità di tale espressione può essere facilmente provata utilizzando il noto integrale gaussiano tipico

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dy \exp\left(-y^2\right) = \sqrt{\pi} \tag{A.2}$$

In particolare, si procede a completare il quadrato nell'esponente del membro sinistro dell'equazione (A.1)

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx \exp\left[-\left(\sqrt{a}x - b\right)^2\right] \exp\left(\frac{b^2}{2a}\right)$$

ed effettuando la sostituzione di variabile $\sqrt{ax} - b = y$. Impiegando la (A.2) si ottiene direttamente la (A.1).

La misura gaussiana (canonica), invece, è definita come

$$\Gamma_n(A) = \int_A d\mathbf{x} \gamma_n(\mathbf{x}) \tag{A.3}$$

dove A è un qualsiasi insieme di Borel, $A\subseteq \mathbb{R}^n$ e

$$\gamma_n(\mathbf{x}) = \frac{e^{-\|\mathbf{x}\|^2/2}}{(2\pi)^{\frac{n}{2}}}$$
(A.4)

in cui $\|\mathbf{x}\|$ indica la norma euclidea di \mathbf{x} .

Nella trattazione si ha sempre n = 1, quindi per riferirsi alla misura gaussiana si usa per comodità la notazione

$$Dx = \frac{e^{-x^2/2}}{\sqrt{2\pi}}dx\tag{A.5}$$

A.2 Identità delle repliche

L'identità matematica che sta alla base dell'introduzione delle repliche nella sezione 3.4.2 è la seguente

$$\langle \ln Z \rangle_{\mathbf{J}} = \lim_{n \to 0} \frac{\langle Z^n \rangle_{\mathbf{J}} - 1}{n}$$
 (A.6)

e può essere dimostrata semplicemente sviluppando la funzione esponenziale x^n in serie di Taylor in un intorno din=0

$$x^{n} = \sum_{\nu=0}^{+\infty} \frac{n^{\nu} \ln^{\nu}(x)}{\nu!} = 1 + n \ln x + o_{n \to 0}(n^{2})$$

Riarrangiando l'equazione ed applicando il limite per $n \to 0$ si ha

$$\ln x = \lim_{n \to 0} \frac{x^n - 1}{n}$$

Eseguendo il valore medio di entrambi i membri si ottiene direttamente la (A.6)

A.3 Funzione di Heaviside e delta di Dirac

La delta di Dirac, spesso chiamata impropriamente funzione di Dirac (e scritta come tale) per comodità, è una distribuzione che agisce su un'arbitraria funzione di classe C_0^{∞} nel modo seguente

$$\langle \delta, \varphi \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \, \delta(x) \varphi(x) = \varphi(0)$$
 (A.7)

Ne consegue che la "funzione" ha valori diversi da zero solamente se valutata in zero.

La funzione di Heaviside ad una dimensione è definita invece

$$\theta(x) = \begin{cases} 1 & \text{per} \quad x > 0\\ 0 & \text{per} \quad x < 0 \end{cases}$$
(A.8)

Essa risulta localmente sommabile ed ha derivata nulla per ogni $x \neq 0$ (in x = 0 non esiste la derivata, anche se si potrebbe estendere il valore 0 in quel punto). Tuttavia, in

senso distribuzionale si ha che

$$\left\langle \frac{d\theta}{dx},\varphi\right\rangle = -\left\langle \theta, \frac{d\varphi}{dx}\right\rangle = -\int_{-\infty}^{+\infty} dx \,\theta(x) \frac{d\varphi(x)}{dx} = \int_{0}^{+\infty} \frac{d\varphi(x)}{dx} = \varphi(0)$$

da cui si ricava che, in senso distribuzionale

$$\frac{d\theta}{dx} = \delta \tag{A.9}$$

A.4 Disuguaglianza di Schwarz

La disuguaglianza di Schwarz è una relazione di carattere puramente matematico, di applicabilità molto generale. Sia V uno spazio vettoriale dotato di un prodotto interno, indicato con \cdot ; allora

$$\forall v, w \in V \qquad |v \cdot w| \leqslant \sqrt{\|v\|} \sqrt{\|w\|} \qquad (A.10)$$

dove con il simbolo $\|...\|$ si indica la norma del vettore, che è una funzione a valori reali tale che $\forall v, w \in V$ e $\forall c \in \mathbb{C}$

1. $||v|| \ge o \in ||v|| = 0 \iff v = 0$

2.
$$||cv|| = |c| ||v||$$

3. $||v + w|| \leq ||v|| + ||w||$

A.5 Spazio ultrametrico

Uno spazio metrico è uno spazio vettoriale V dotato di una funzione a valori reali

$$d(x,y): V \times V \to \mathbb{R} \tag{A.11}$$

detta distanza tale che per ogni $x, y, z \in V$ soddisfa le tre seguenti proprietà

1. $d(x,y) \ge 0 e d(x,y) = 0 \iff x = y$ 2. d(x,y) = d(y,x)3. $d(x,z) \le d(x,y) + d(y,z)$ la terza delle quali è detta disuguaglianza triangolare.

Uno spazio ultrametrico è uno spazio metrico caratterizzato da una versione "rafforzata" della disuguaglianza triangolare: il particolare, la distanza di uno spazio ultrametrico soddisfa le proprietà 1. e 2. precedenti e

3. $d(x,z) \leq \max\{d(x,y), d(y,z)\}$

Per visualizzare ciò in maniera figurata, è possibile pensare ad uno spazio ultrametrico come uno spazio tale che tre punti casuali al suo interno possono formare solamente un triangolo isoscele acutangolo (eventualmente un triangolo equilatero).

Esempi di spazi ultrametrici sono: un linguaggio formale, in cui si definisce la distanza tra due stringhe s_1 ed s_2 come $d(s_1, s_2) = 2^{-n}$, dove n è la posizione del primo carattere per cui differiscono; uno spazio con struttura ad albero, come quello delle soluzioni della RSB.

Bibliografia

- [1] Viktor S Dotsenko. «Physics of the spin-glass state». In: *Physics-Uspekhi* 36.6 (1993), pp. 455-485. DOI: 10.1070/pu1993v036n06abeh002161. URL: https://doi.org/10.1070/pu1993v036n06abeh002161.
- [2] Malcolm P. Kennett. *Essential Statistical Physics*. Cambridge University Press, 2020. DOI: 10.1017/9781108691116.
- [3] Hidetoshi Nishimori. Statistical Physics of Spin Glasses and Information Processing. An Introduction. Oxford Scholarship Online, 2001. ISBN: 9780198509417. DOI: 10. 1093/acprof:0s0/9780198509417.001.0001.
- [4] Fabio Ortolani. Appunti di Metodi Matematici. 2007.
- [5] Daniel L. Stein e Charles M. Newman. Spin glasses and complexity. English (US). Copyright: Copyright 2013 Elsevier B.V., All rights reserved. Princeton University Press, gen. 2013. ISBN: 0691147337.