Modello REM di vetro di spin con il metodo delle repliche

L. P.

25 Maggio 2012

Il modello REM è stato introdotto da Bernard Derrida nel 1981, e costituisce il modello più semplice di vetro di spin. Si considera un sistema costituito da N spin di Ising ($\sigma_i \in \{+1, -1\}$, $i \in \{1, 2, \ldots, N\}$). A ogni configurazione $\sigma = (\sigma_1, \ldots, \sigma_N)$ è associata l'energia $E(\sigma)$. In un sistema aleatorio, la funzione $\sigma \mapsto E(\sigma)$ dipende dalla particolare istanza del sistema. Nel modello REM, si suppone che le $E(\sigma)$ siano variabili aleatorie, identicamente distribuite, e indipendenti per configurazioni σ e σ' diverse fra loro:

$$P(E(\sigma), E(\sigma')) = P(E(\sigma))P(E(\sigma')), \qquad \forall \sigma, \sigma' : \quad \sigma \neq \sigma'. \tag{1}$$

Considereremo il caso in cui la distribuzione delle $E(\sigma)$ è gaussiana:

$$P(E(\sigma)) = \frac{1}{\sqrt{\pi N J_0^2}} \mathrm{e}^{-E^2(\sigma)/N J_0^2}. \tag{2}$$

Per alleggerire la notazione, porremo J_0 e la costante di Boltzmann k_{B} uguali a 1. Definiamo la funzione generatrice dei momenti $g(\lambda)$ mediante la relazione

$$g(\lambda) = \frac{1}{N} \log \left[\mathrm{e}^{-\lambda E}\right]_{\mathrm{av}} = \frac{1}{N} \log \int \mathrm{d}E\; P(E)\, \mathrm{e}^{-\lambda E}, \tag{3}$$

dove abbiamo definito la *media quenched*

$$[f(E)]_{\mathrm{av}} = \int \mathrm{d}E\; P(E)\, f(E). \tag{4}$$

Si ottiene facilmente

$$g(\lambda) = \left(\frac{\lambda}{2}\right)^2. \tag{5}$$

La funzione di partizione Z è definita da

$$Z = \sum_{\sigma} \mathrm{e}^{-E(\sigma)/T}. \tag{6}$$

Il nostro obiettivo è di calcolare il comportamento termodinamico del sistema, che è definito dal valor medio dell'energia libera di Helmholtz, che viene espressa in termini del *logaritmo* della funzione di partizione Z:

$$[F(T)]_{\mathrm{av}} = -T\, [\log Z]_{\mathrm{av}}\,. \tag{7}$$

Il metodo delle repliche prende le mosse dall'identità

$$\log Z = \lim_{n \to 0} \frac{Z^n - 1}{n}. \tag{8}$$

D'altra parte, per ogni istanza del modello (cioè per ogni assegnazione $\sigma \mapsto E(\sigma)$, ottenuta estraendo le $E(\sigma)$ dalla distribuzione $P(E)$ data dalla (2)), Z^n può essere ottenuta considerando n repliche identiche del modello, e sommando sulle configurazioni di ciascuna:

$$Z^n = \sum_{\sigma^1,\ldots,\sigma^n} \exp\left[-\frac{1}{T}\left(\sum_{\alpha=1}^{n} E(\sigma^\alpha)\right)\right]. \tag{9}$$

Il metodo consiste nel calcolare la media $[Z^n]_{\mathrm{av}}$ in funzione di n, valutando la media dell'espressione (9) sulla distribuzione (2), per poi prendere il limite $n \to 0$. Vogliamo quindi calcolare l'n-esimo momento $[Z^n]_{\mathrm{av}}$ della funzione di partizione, dove Z^n è dato dalla (9). Questa espressione può venire valutata come segue:

$$\begin{aligned} [Z^n]_{\mathrm{av}} &= \left[\sum_{\sigma^1,\ldots,\sigma^n} \exp\left[-\frac{1}{T}\sum_{\sigma} E(\sigma)\left(\sum_{\alpha=1}^{n}\delta_{\sigma\sigma^\alpha}\right)\right]\right]_{\mathrm{av}} \\ &= \left[\sum_{\sigma^1,\ldots,\sigma^n} \exp\left[-\sum_{\sigma} E(\sigma)\cdot\frac{1}{T}\left(\sum_{\alpha=1}^{n}\delta_{\sigma\sigma^\alpha}\right)\right]\right]_{\mathrm{av}} \\ &= \sum_{\sigma^1,\ldots,\sigma^n} \exp\left[N\sum_{\sigma} g\left(\frac{1}{T}\sum_{\alpha=1}^{n}\delta_{\sigma\sigma^\alpha}\right)\right]. \end{aligned} \tag{10}$$

Supponiamo adesso che le configurazioni $\sigma^1, \ldots, \sigma^n$ siano differenti fra loro. Questo si può ottenere in $M(M-1)\cdots(M-n+1)$ modi differenti, dove $M = 2^N$ è il numero totale di configurazioni di un sistema di N spin. Si ha allora

$$[Z^n]_{\mathrm{av}} = M(M-1)\cdots(M-n+1)\exp\left[nNg\left(\frac{1}{T}\right)\right] \simeq \exp\left[n\log M + nN\left(\frac{1}{2T}\right)^2\right]. \tag{11}$$

Nel limite $n \to 0$, l'energia libera per spin è data da

$$f_0(T) = -\frac{T}{N}\left[\log Z\right]_{\mathrm{av}} = -T\log 2 - \frac{1}{4T}. \tag{12}$$

L'entropia per spin è data da

$$s(T) = -\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}T} = \log 2 - \frac{1}{4T^2}. \tag{13}$$

Vediamo che l'entropia si annulla per

$$T = T_0 = \frac{1}{2\sqrt{\log 2}}. \tag{14}$$

Per $T < T_0$, supponiamo che le configurazioni delle repliche siano ripartite in n/m gruppi di m elementi, e che repliche appartenenti allo stesso gruppo abbiano la stessa configurazione. Abbiamo allora

$$\sum_{\sigma} g\left(\frac{1}{T}\sum_{\alpha=1}^{n}\delta_{\sigma\sigma^\alpha}\right) = \frac{n}{m} g\left(\frac{m}{T}\right). \tag{15}$$

Il numero di modi in cui possono essere scelte le configurazioni è dato da

$$M(M-1)\cdots(M-n/m+1)\frac{n!}{(m!)^{n/m}} \simeq \exp\left[\frac{n}{m}\log M + \text{termini subestensivi}\right]. \tag{16}$$

Otteniamo così

$$f(T,m) = -\frac{T}{m}\log 2 - \frac{m}{4T} = f_0\left(\frac{T}{m}\right). \tag{17}$$

Valutando l'estremale di $f(T,m)$ rispetto a m si ottiene

$$m = \frac{T}{T_0}, \tag{18}$$

dove T_0 è dato dalla (14). Notiamo che in questo caso, la condizione di estremale di $f(T,m)$ rispetto a m implica l'annullarsi della derivata di $f(T)$ rispetto a T, e cioè dell'entropia per spin $s(T)$. Otteniamo quindi che, per $T < T_0$, il sistema rimane essenzialmente "congelato" in una configurazione unica. D'altra parte la derivata seconda di $f(T,m)$ rispetto a m vale

$$\frac{\partial^2 f}{\partial m^2} = -\frac{2T\log 2}{m^2}, \tag{19}$$

e quindi, nelle nostre ipotesi, è *negativa!* In altri termini, ll'equilibrio si ottiene per il massimo, e non per il minimo dell'energia libera. Questo è solo uno dei molti paradossi che si incontrano nella teoria delle repliche.

Valutiamo adesso i momenti Y_k del fattore di Boltzmann

$$z(\sigma) = \mathrm{e}^{-E(\sigma)/T}, \tag{20}$$

tenendo conto della normalizzazione. Definiamo quindi Y_k mediante la relazione

$$Y_k = \left[\sum_\sigma \left(\frac{z(\sigma)}{Z}\right)^k\right]_{\mathrm{av}}. \tag{21}$$

Questa quantità ammette l'espressione seguente in termini delle repliche:

$$Y_k = \left[\lim_{n\to 0} z^k Z^{n-k}\right]_{\mathrm{av}} = \left[\lim_{n\to 0} \sum_{\sigma^1,\ldots,\sigma^n} \prod_{j=1}^{k} \delta_{\sigma^1,\sigma^j} \exp\left[-\frac{1}{T}\sum_{j=1}^{n} E(\sigma^j)\right]\right]_{\mathrm{av}}. \tag{22}$$

I fattori δ di Kronecker impongono l'uguaglianza delle configurazioni delle prime k repliche. Questa quantità può essere riscritta nella forma seguente, mediando su tutte le possibili scelte $\alpha_i, \ldots, \alpha_k$ degli indici corrispondenti ai fattori z:

$$Y_k = \lim_{n\to 0} \frac{1}{n(n-1)\cdots(n-k+1)} \sum_{\alpha_1,\ldots,\alpha_k} \sum_{\sigma^{\alpha_1},\cdots,\sigma^{\alpha_n}} \left[z_{\sigma^1}\cdots z_{\sigma^n}\right]_{\mathrm{av}} \prod_{j=1}^{k} \delta_{\sigma^{\alpha_1},\sigma^{\alpha_j}}. \tag{23}$$

Supponiamo che $T > T_0$. In questo caso le configurazioni relative ad indici diversi sono diverse, e quindi le delta di Kronecker si annullano tutte. Si ha così $[Y_k]_{\mathrm{av}} = 0$, e quindi (come ci aspettiamo) che tutte le configurazioni hanno pesi comparabili (di ordine 2^{-N}) nel limite termodinamico. Supponiamo invece che la simmetria fra le repliche sia rotta, e che le repliche si distribuiscano in n/m gruppi, tali che se gli indici appartengono allo stesso gruppo le configurazioni delle repliche corrispondenti sono identiche. Allora gli indici α_1, …, α_k debbono essere scelti nello stesso gruppo, a causa delle delta di Kronecker. Una volta che α_1 è stato scelto, gli altri indici possono essere scelti in $(m-1)\cdots(m-k+1)$ modi. Otteniamo così

$$Y_k = \lim_{n\to 0} \frac{n(m-1)\cdots(m-k+1)}{n(n-1)\cdots(n-k+1)} \left[Z^n\right]_{\mathrm{av}}. \tag{24}$$

Cerchiamo adesso di valutare il limite del fattore combinatorio. Si ha

$$\lim_{n\to 0} n(n-1)\cdots(n-k+1) = (-1)^k (k-1)! = (-1)^k \Gamma(k), \tag{25}$$

dove $\Gamma(z)$ è la funzione gamma di Eulero. D'altra parte si ha

$$(m-1)\cdots(m-k+1) = (-1)^{k-1}(1-m)\cdots(k-1-m) = (-1)^{k-1}\frac{\Gamma(k-m)}{\Gamma(1-m)}. \tag{26}$$

Passando ora la limite $n \to 0$, $m \to \mu = T/T_0$, si ha $[Z^n]_{\mathrm{av}} \to 1$ e quindi

$$Y_k = \frac{\Gamma(k-\mu)}{\Gamma(k)\Gamma(1-\mu)}. \tag{27}$$

In particolare, per $k = 2$ si ha

$$Y_2 = 1 - \mu. \tag{28}$$

Indichiamo con $p(\sigma)$ la probabilità di trovarsi nella configurazione σ. Allora $Y_2 = \sum_\sigma p^2(\sigma)$ misura il valor medio della probabilità che due configurazioni prese a caso con la probabilità $p(\sigma)$ siano identiche. Questa probabilità si annulla per $T > T_0$ ed è diversa da zero (secondo la relazione appena ottenuta) per $T < T_0$. Più in generale si ha $\lim_{T\to T_0^-} Y_k = 0$, $\forall k$, a causa del divergere di $\Gamma(1-\mu)$.