

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA MARIA
CENTRO DE CIÊNCIAS NATURAIS E EXATAS
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

TRANSIÇÕES DE PRIMEIRA ORDEM NO MODELO
VIDRO DE SPIN ISING FERMIÔNICO EM UM CAMPO
TRANSVERSO

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

Carlos Alberto Vaz de Moraes Junior

Santa Maria, RS, Brasil
2006

**TRANSIÇÕES DE PRIMEIRA ORDEM NO MODELO
VIDRO DE SPIN ISING FERMIÔNICO EM UM CAMPO
TRANSVERSO**

por

Carlos Alberto Vaz de Moraes Junior

Dissertação apresentada ao curso de Mestrado do Programa de Pós-Graduação em Física, Área de Concentração em Física da Matéria Condensada, da Universidade Federal de Santa Maria (UFSM, RS), como requisito parcial para a obtenção do grau de **Mestre em Física.**[‡]

Orientador: Sergio Garcia Magalhães

**Santa Maria, RS, Brasil
2006**

[‡]Trabalho parcialmente financiado pela CAPES

**Universidade Federal de Santa Maria
Centro de Ciências Naturais e Exatas
Programa de Pós-Graduação em Física**

A Comissão Examinadora, abaixo assinada,
Aprova a Dissertação de Mestrado

**TRANSIÇÕES DE PRIMEIRA ORDEM NO MODELO
VIDRO DE SPIN ISING FERMIÔNICO EM UM CAMPO
TRANSVERSO**

elaborada por
Carlos Alberto Vaz de Moraes Junior

como requisito parcial para obtenção do grau de
Mestre em Física

COMISSÃO EXAMINADORA:

Sergio Garcia Magalhães, Dr.
(Orientador)

Rubem Erichsen Junior, Dr.(UFRGS)

Marcos André Carara, Dr.(UFSM)

Santa Maria, 31 de outubro de 2006.

Agradecimentos

Agradeço a todos que colaboraram de alguma forma para a realização deste trabalho e em particular

- ao professor Sergio Garcia Magalhães pela orientação e dedicação;
- a Fabio Mallmann Zimmer, pela ajuda prestada durante esta etapa;
- à minha noiva, Joice Ane Teixeira, pelo carinho dedicado a cada novo dia;
- aos meus pais, Carlos Alberto Vaz de Moraes e Maria Celi Rodrigues de Moraes, e irmã, Talia Rodrigues de Moraes, pelo apoio e carinho ao longo de toda minha vida;
- aos colegas de Laboratório e sala de estudos, pelo bom relacionamento e pelo auxílio durante o andamento deste trabalho.

Resumo

Dissertação de Mestrado
Programa de Pós-Graduação em Física
Universidade Federal de Santa Maria

TRANSIÇÕES DE PRIMEIRA ORDEM NO MODELO VIDRO DE SPIN ISING FERMIÔNICO EM UM CAMPO TRANSVERSO

AUTOR: CARLOS ALBERTO VAZ DE MORAIS JUNIOR

ORIENTADOR: SERGIO GARCIA MAGALHÃES

Data e Local da Defesa: Santa Maria, 31 de outubro de 2006.

O presente trabalho analisa o modelo vidro de spin Ising com um campo transversal, descrito no ensemble grande canônico, em uma formulação fermiônica, em que os operadores de spin são escritos como uma combinação bilinear de operadores de criação e destruição. Neste modelo, o campo transversal Γ é um mecanismo de “flipagem” dos spins, que insere flutuações de natureza quântica, que podem conduzir a temperatura de transição T_f ao ponto crítico quântico (PCQ). Neste caso, a transição de fase vidro de spin-paramagnética ocorre em $T = 0$. Por outro lado, flutuações de carga controladas pelo potencial químico mostram a existência de um ponto tricrítico. O método das réplicas com simetria de réplicas e a aproximação estática são usados para resolver este problema. Contudo, a solução com simetria de réplicas apresenta certos problemas na fase vidro de spin como, por exemplo, entropia negativa em baixas temperaturas. Desta forma, as condições de estabilidade são derivadas para testar a solução gerada pelo modelo.

O objetivo geral é observar os efeitos combinados das flutuações quânticas e de carga na competição entre as fases paramagnética e vidro de spin. A partir das condições de estabilidade, as soluções geradas pela simetria de réplicas são vistas detalhadamente na forma de diagramas de fase. As condições de estabilidade, todavia, mostram outras aplicações no presente problema, uma vez que podem, inclusive, ser utilizadas na derivação do ponto tricrítico.*

*Palavras-Chave: Flutuações de Carga, Flutuações Quânticas, Condições de Estabilidade, Ponto Tricrítico

Abstract

Master's Thesis
Programa de Pós-Graduação em Física
Universidade Federal de Santa Maria

**FIRST-ORDER TRANSITION IN THE FERMIONIC ISING SPIN GLASS
MODEL IN A TRANSVERSE FIELD**

AUTHOR: CARLOS ALBERTO VAZ DE MORAIS JUNIOR

ADVISER: SERGIO GARCIA MAGALHÃES

Time and Place: Santa Maria, October 31th, 2006.

The present work analyzes the fermionic Ising spin glass model in a transverse magnetic field. The problem is written in the Grand Canonical ensemble with the spin operators represented by bilinear combinations of fermionic fields. The transverse field is a spin “flip” mechanism and inserts quantum fluctuations, which can lead the transition temperature T_f to quantum critical point (QCP). In this case, the phase transition from spin glass to paramagnetic phases occurs in $T = 0$. On the other hand, charge fluctuations controlled by chemical potential μ show the existence of a tricritical point. The replica method with replica symmetry and static approximation are used to solve this problem. However, the replica symmetry solution shows some problems, like negative entropy in low temperatures. Thus, the stability conditions are derived to test the generated solution of this model.

The main purpose of this work is to study the competition between spin glass and paramagnetic phases with both quantum and charge fluctuations. After the stability conditions are derived, a detailed sight into the generated solution is shown under the form of diagrams phase. The stability conditions, however, show another applications in the present problem, once they can be used, for instance, in the tricritical point derivation.*

*Keywords: Charge Fluctuations, Quantum Fluctuations, Stability Conditions, Tricritical Point

Sumário

1	Introdução	p. 8
2	Desenvolvimento Experimental e Teórico	p. 12
2.1	Introdução	p. 12
2.2	Resultados Experimentais	p. 12
2.2.1	Observações Experimentais na Fase Vidro de Spin	p. 12
2.2.2	Transições Vidro de Spin em Temperatura Zero	p. 15
2.3	Conceitos Teóricos Gerais e Modelos	p. 18
2.3.1	Teoria de Réplicas	p. 18
2.3.2	Ergodicidade e Parâmetros de Ordem	p. 18
2.3.3	Modelo de Sherrington e Kirkpatrick (SK)	p. 20
2.4	Transições de Primeira Ordem	p. 21
2.4.1	Modelo de Ghatak e Sherrington (GS)	p. 22
2.4.2	Vidro de Spin Ising Fermiônico (ISGf)	p. 25
2.4.3	Mapeamento Entre os Modelos ISGf e GS	p. 26
3	Métodos Utilizados	p. 28
3.1	Introdução	p. 28
3.2	Segunda Quantização	p. 28
3.2.1	Estados Coerentes	p. 31
3.2.2	Álgebra de Grassmann	p. 32
3.2.3	Estados Coerentes Para Férmions	p. 34

3.3	Formulação de Integrais Funcionais	p. 36
3.3.1	Integrais de Caminho Fermiônicas	p. 37
4	Modelo	p. 41
4.1	Introdução	p. 41
4.2	Vidro de Spin Fermiônico com Campo Transverso	p. 42
4.3	Resultados	p. 53
4.3.1	Resultados com Potencial Químico Fixo	p. 54
4.3.2	Resultados para um Campo Transverso Fixo	p. 56
5	Estabilidade da Solução no Modelo Fermiônico	p. 64
5.1	Introdução	p. 64
5.2	Estabilidade da Simetria de Réplicas	p. 64
5.3	Cálculo da Matriz Hessiana	p. 65
5.4	A Solução Paramagnética	p. 69
5.5	Condições de Estabilidade com a Introdução do Campo Transverso	p. 73
6	Conclusão	p. 82
	Apêndice A	p. 85
A.1	Autovalor 1	p. 85
A.2	Autovalor 2	p. 87
A.3	Autovalor 3	p. 88
	Apêndice B	p. 89
B.1	Cálculo das Correlações	p. 89
	Apêndice C	p. 91
	Referências	p. 93

1 *Introdução*

Por volta de 1970, determinados sistemas magnéticos foram largamente estudados experimentalmente. Neles, impurezas foram depositadas em hospedeiros metálicos não magnéticos. A introdução destas impurezas produzia então uma polarização dos elétrons de condução do metal hospedeiro. Como consequência, o momento magnético de cada impureza, ao sentir esta polarização, procurava se alinhar com o momento das impurezas restantes. Dada a colocação aleatória das impurezas, as interações entre os momentos das impurezas podiam ser tanto positivas quanto negativas. Devido a esta “competição” de interações entre os momentos, nenhuma ordem de longo alcance convencional, ferromagnética ou antiferromagnética, por exemplo, poderia ser estabelecida. Todavia, estes sistemas apresentavam uma espécie de transição de “congelamento” para uma espécie de nova “ordem” na qual os spins eram alinhados em direções aleatórias. A este tipo de ordem que descreve este comportamento de aleatoriedade e competição de interações foi atribuída a denominação vidro de spin.

Na fase vidro de spin, acredita-se que os momentos magnéticos estão congelados em direções aleatórias. Em outras palavras, o vidro de spin é uma coleção de spins em que, à baixa temperatura, há um congelamento desordenado, no lugar dos padrões periódicos ou uniformes que se costumam encontrar em magnetos convencionais. Para produzir tal estado, duas condições são necessárias. Primeiramente, deve haver competição de diferentes interações entre os momentos, de tal forma que nenhuma configuração seja favorecida através das interações (isto comumente é chamado de frustração). Segundo, estas interações devem ser no mínimo parcialmente aleatórias. Desde então, vários estudos experimentais foram feitos com o intuito de observar a existência da fase vidro de spin e também sua competição com diversos tipos de ordenamento (ferromagnética e supercondutora, por exemplo).

Na parte teórica, uma série de modelos foram propostos, em sua grande maioria utilizando teorias de campo médio, que tornavam possível encontrar parâmetros de ordem e descrever diagramas para a fase vidro de spin. Para descrever teoricamente a fase vidro de

spin, Edwards e Anderson (1975) propuseram um modelo de curto alcance que introduziu desordem e foi o primeiro que escreveu o problema vidro de spin em termos de parâmetros de ordem. Neste modelo, as interações entre impurezas ocorrem somente entre pares de vizinhos mais próximos. Em seguida, Sherrington e Kirkpatrick (1978) introduziram um modelo de Ising com interações de longo alcance, de modo que as impurezas podiam interagir com todas as outras impurezas da rede. Este modelo tem como sua principal característica ser exatamente solúvel.

Apesar de mostrar bons resultados nas transições de fase em altas temperaturas, o modelo de Ising de Sherrington e Kirkpatrick (1978), que utilizava em sua resolução o método das réplicas, apresentou certos problemas a baixas temperaturas, entre eles, um valor negativo para a entropia. Com isso, Almeida e Thouless (1978) investigaram a solução gerada pelo método das réplicas e descobriram que esta solução com simetria na fase vidro de spin é totalmente instável. Em 1980, Bray e Moore escreveram uma formulação quântica para modelo vidro de spin Ising introduzido por Sherrington e Kirkpatrick. Algum tempo depois, Theumann e Gusmão (1984) introduziram uma formulação fermiônica no problema vidro de spin, em que os operadores de spin foram representados pela combinação bilinear de operadores de criação e destruição. Na resolução deste problema vidro de spin escrito em termos de operadores, o formalismo das integrais de caminho fermiônicas foi utilizado. Porém, a utilização neste modelo da aproximação estática, com a qual as correlações no tempo são desprezadas, pode comprometer a solução em baixas temperaturas, desde que as correlações desprezadas podem conter efeitos importantes. Já em 1984, Ishii e Yamamoto acrescentaram no modelo de Sherrington e Kirkpatrick uma componente, conhecida como campo transverso Γ , a qual introduz um mecanismo de “flipagem”, contrário ao ordenamento dos spins, que permite acessar transições de fase no ponto crítico quântico, em que ocorrem transições de fase em temperatura $T = 0$. Em 2002, Theumann, Schmidt e Magalhães acrescentaram o campo transverso Γ no modelo vidro de spin fermiônico, introduzindo este mecanismo de “flipagem” dos spins, e, por consequência, o acesso ao ponto crítico quântico também no formalismo fermiônico.

Paralelamente, Ghatak e Sherrington (1977) propuseram um modelo de curto alcance, com spin S generalizado, em que efeitos de campos de cristal, através de um parâmetro anisotrópico D , foram introduzidos para observação de propriedades anisotrópicas em sistemas vidro de spin. Como resultado, este modelo demonstrou a existência de transições descontínuas em certas regiões do diagrama $T \times D$. Naturalmente, a utilização do método da réplicas levaram Lage e Almeida (1982), agora em um modelo de longo alcance, a derivar as condições de estabilidade da solução gerada no modelo Ghatak e Sherrington

(1977).

Posteriormente a estes trabalhos, Rosenow e Oppermann (1996), em um sistema vidro de spin descrito no ensemble grande canônico dentro do formalismo fermiônico, também observaram a existência destes comportamentos não usuais na competição entre as fase paramagnética e vidro de spin. Foi possível observar que, com a introdução de flutuações de carga, além das usuais transições contínuas, estes sistemas vidro de spin também apresentam transições de fase descontínuas, separadas através de um ponto tricrítico. Em 1999, Feldmann e Oppermann introduziram um mapeamento entre os modelos fermiônico no ensemble Grande Canônico (ISGf) e o modelo de Ghatak e Sherrington (GS), o que possibilitou relacionar de forma direta as propriedades termodinâmicas em nível de energia livre de ambos os modelos. No entanto, Perez e Sherrington (2005) foram além e observaram que os modelos ISGf e GS eram mapeáveis não somente em nível de energia livre, mas também em nível de densidade de estados.

O trabalho em questão tem por objetivo, dentro de uma formulação fermiônica, de observar os efeitos, que até então haviam sido estudados isoladamente, das flutuações quânticas e de carga, agora combinados, no problema vidro de spin. Desta forma, espera-se observar quais são os efeitos que a “flipagem” dos spins tem sobre regiões de primeira ordem, entre outros, bem como observar quais efeitos que as flutuações no número de ocupação exercem sobre as transições de fase em $T = 0$. Além disso, o método das réplicas também é utilizado na resolução deste problema. Desta forma, neste trabalho, também é feita a derivação das condições de estabilidade da solução gerada pelo “ansatz” de simetria de réplicas, que demonstram, inclusive, possuir outras aplicações, o que inclui, por exemplo, a localização do ponto tricrítico. Para um melhor entendimento, este trabalho apresenta os resultados separados em dois capítulos. No capítulo dois, é apresentado o desenvolvimento experimental do problema vidro de spin e também a fundamentação teórica necessária para a derivação do modelo proposto. O capítulo três apresenta o formalismo de segunda quantização, uma álgebra para variáveis anticomutantes e a formulação das integrais de caminho fermiônicas que é utilizado para tratar com o problema vidro de spin em termos de operadores que não comutam. O capítulo quatro é reservado ao cálculo analítico do modelo vidro de spin Ising fermiônico, em que os spins são escritos como uma combinação bilinear de operadores de criação e destruição. Ainda neste capítulo, são discutidos os resultados demonstrando a existência das transições de primeira ordem, bem como os efeitos que as flutuações quânticas e de carga exercem sobre a competição entre as fases paramagnética e vidro de spin. O capítulo cinco é focado na derivação das condições de estabilidade da solução gerada pela utilização do “ansatz” de simetria de réplicas no

modelo fermiônico. Em seguida, é apresentada uma seção com resultados relacionados à solução paramagnética que fornece uma série de informações interessantes. Além disso, é observado também que o estudo da estabilidade fornece uma visão completa da solução com simetria de réplicas na competição entre as fases em questão. Finalmente, o último capítulo faz um apanhado geral das principais características vistas durante os capítulos três e quatro, bem como descreve a utilização dos conceitos reproduzidos em trabalhos futuros.

2 *Desenvolvimento Experimental e Teórico*

2.1 Introdução

Neste capítulo, são apresentados os principais conceitos experimentais e teóricos envolvidos na descrição da fase vidro de spin. Uma seção experimental relata as evidências experimentais que confirmaram a existência da fase vidro de spin, bem como suas principais características. Ainda nesta parte, são relatadas as evidências observadas quando um campo perpendicular, conhecido como campo transverso, é aplicado no composto $LiHo_xY_{1-x}F_4$. Em seguida, é incluída uma seção que descreve sucintamente parte do tratamento analítico utilizado na resolução dos problemas teóricos, entre eles o método das réplicas. O segmento final apresenta dois modelos vidro de spin que possuem transições de primeira ordem, além das usuais transições de segunda ordem. No problema vidro de spin em específico, estas regiões costumam apresentar uma série de soluções metaestáveis para os parâmetros de ordem. Além disso, tais sistemas apresentam comportamentos tricríticos. Com isso, para um melhor entendimento destes fenômenos, o modelo vidro de spin fermiônico (ISGf) e o modelo clássico de Ghatak e Sherrington (GS), ambos apresentando transições de primeira ordem e comportamentos tricríticos, são discutidos.

2.2 Resultados Experimentais

2.2.1 Observações Experimentais na Fase Vidro de Spin

A fase vidro de spin é caracterizada pelo congelamento dos momentos magnéticos, de forma aleatória, a baixas temperaturas. Seu surgimento se deve a dois fatores: deve haver competição entre interações ferromagnéticas (*positivas*) e antiferromagnéticas (*negativas*) e estas interações devem ser aleatórias. Experimentalmente, uma série de compostos apresentam este tipo de ordenamento. Sugere-se que esta ordem, na qual observa-se que

os momentos magnéticos estão “congelados” em escalas de tempo macroscópicas, tenha magnetização espontânea local $m_i = \langle S_i \rangle$ não nula para um dado sítio i , ainda que a magnetização média $M = N^{-1} \sum_i m_i$ sobre todos os sítios o seja. De fato, compostos que apresentam o ordenamento vidro de spin demonstram a existência de picos na suscetibilidade magnética, seguidos pela redução do valor da suscetibilidade, que são efeitos da magnetização espontânea local m_i não nula, como mostram os exemplos da figura 1. É relevante salientar também que, na fase vidro de spin, a redução no valor da suscetibilidade magnética ocorre desde que não há mais resposta do sistema ao campo magnético aplicado. O surgimento do pico na suscetibilidade ocorre em uma transição de fase de segunda ordem entre o estado paramagnético desordenado e o estado vidro de spin. Outra

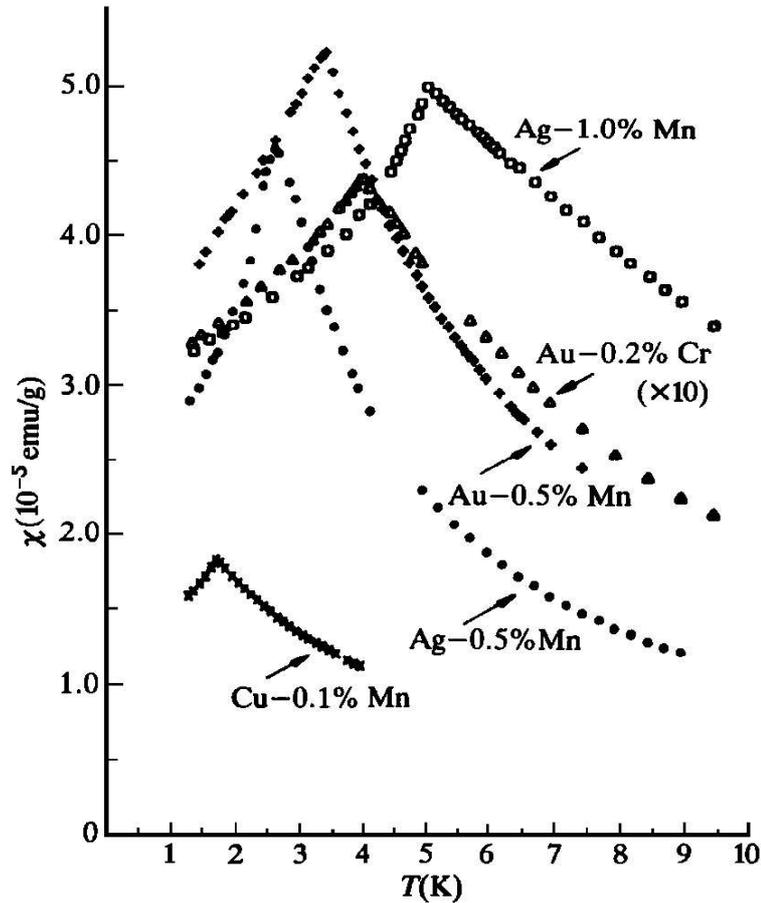


Figura 1: A suscetibilidade de Cu-0.1% Mn, Ag-0.5% Mn, Au-0.5% Mn, Au-0.2% Cr, and Ag -1.0 % Mn pela temperatura para um campo magnético $H = 20$ Oe e 100 Hz (FISCHER; HERTZ, 1991). O pico na suscetibilidade magnética marca a transição entre as fases paramagnética e vidro de spin para diferentes compostos.

importante característica observada experimentalmente na fase vidro de spin é que ela não possui nenhuma ordem de longo alcance, o que a diferencia drasticamente de uma ordem ferromagnética ou antiferromagnética, por exemplo. Além disso, em sistemas vi-

dro de spin, para $T < T_f$, é encontrada experimentalmente uma magnetização remanente, observada em escalas de tempo macroscópicas, quando um campo externo já aplicado é desligado. Esta universalidade de características observadas no fenômeno vidro de spin, como desordem e competição de interações, podem ser reproduzidas por meio de modelos. Em um destes modelos, os spins S_i se localizam em posições aleatórias \mathbf{R} , interagindo de forma assintótica como em

$$J(\mathbf{R}) = J_0 \frac{\cos(2K_F R + \varphi_0)}{(K_F R)^3} \quad ; \quad \mathbf{R} \rightarrow \infty \quad (2.1)$$

Aqui, J_0 e φ_0 são constantes, e K_F é o número de onda de Fermi do metal hospedeiro. A característica oscilatória, dependente da distância \mathbf{R} entre impurezas magnéticas, observada na equação 2.1, foi introduzida por Ruderman e Kittel (1954) em trabalhos sobre magnetismo nuclear, e aplicada posteriormente por Kasuya (1956) e Yosida (1957) no problema vidro de spin. Desde então, interações que descrevem este caráter oscilatório, onde os elétrons de condução polarizados possibilitam interações entre momentos magnéticos das impurezas, são chamados interações **RKKY**. Este caráter oscilatório e dependente da distância \mathbf{R} , como mostra a figura 2, surge devido à colocação aleatória das impurezas.

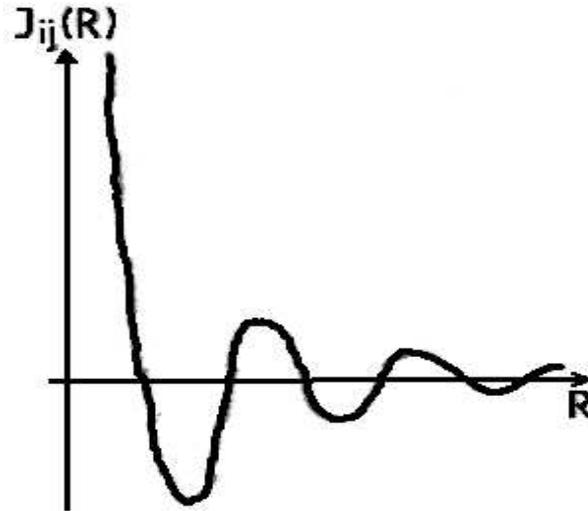


Figura 2: A interação de troca **RKKY** plotada como uma função da distância (BINDER; YOUNG, 1986).

Considerando que a distância entre spins é aleatória, algumas das interações de um determinado spin com o restante serão positivas, favorecendo o alinhamento paralelo, e negativas, favorecendo o alinhamento anti-paralelo: Percebe-se que nenhuma configuração dos spins consegue satisfazer todos os vínculos de troca nesta interação oscilatória. Esta característica, conhecida como frustração, é o segundo ingrediente básico, juntamente com

o congelamento desordenado apresentado no comportamento vidro de spin.

Para ilustrar a física da frustração, considera-se o exemplo simples de uma rede quadrada com interações entre vizinhos mais próximos, que podem ser positivas (+) ou negativas (-). Agora, examinamos algumas das possíveis configurações de spin nessa rede quadrada que tem quatro acoplamentos mútuos como mostra a figura 3. Se o número de

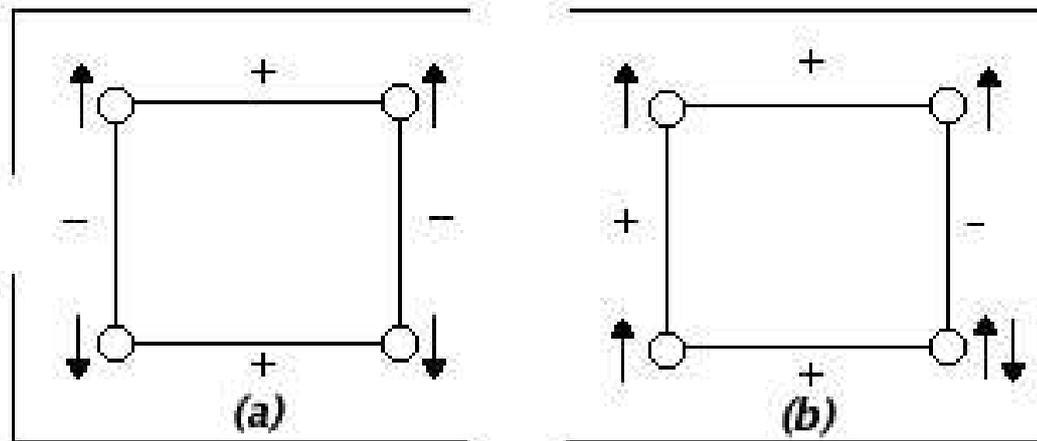


Figura 3: Frustração em uma rede quadrada: (a) uma rede não frustrada; (b) uma rede frustrada.

interações + e - é par (figura 3a), então é sempre possível encontrar uma configuração que satisfaça todas as interações. Quando um spin é fixado, determina-se o valor do spin vizinho, multiplicando-se o valor da interação que conecta o spin fixado e este vizinho. Logo, não haverá interações conflitantes vindas do spin originalmente fixado.

Por outro lado, se o número de interações negativas é ímpar (figura 3b), então haverá um conflito quando são analisadas todas as interações da rede. O vínculo conectando o último e o primeiro spin originalmente fixado não será satisfeito. Ao tentar satisfazer os vínculos ao redor do spin originalmente fixado, outras interações não serão satisfeitas. Portanto, o termo frustração refere-se à incapacidade de satisfazer todas as interações simultaneamente.

2.2.2 Transições Vidro de Spin em Temperatura Zero

Se as flutuações quânticas se apresentam com intensidade suficiente, elas têm um grande impacto na natureza das interações entre os momentos na temperatura de congelamento T_f e nas transições de fase em si. O modelo Ising em um campo magnético

perpendicular ao eixo z , conhecido como campo transverso Γ , com o hamiltoniano

$$H = - \sum_{ij} J_{ij} \sigma_i^z \sigma_j^z - \Gamma \sum_i \sigma_i^x \quad (2.2)$$

é uma construção teórica que introduz a mecânica quântica no problema vidro de spin. Aqui, J_{ij} é uma variável de acoplamento aleatória e σ^z e σ^x são as matrizes de Pauli. O campo transverso tem o papel de um operador que formalmente combina os auto-estados de spin puros. Experimentalmente, o efeito do campo transverso é observado em ligas de $LiHo_xY_{1-x}F_4$.

O composto de $LiHo_xY_{1-x}F_4$ é uma diluição isoestrutural, em que íons magnéticos Ho^{3+} e não magnéticos Y^{3+} ocupam aleatoriamente os sítios de terras-raras \mathbf{R} nas redes $Li\mathbf{R}F_4$, que têm sua estrutura central no formato tetragonal (WU et al., 1991). A interação dominante entre os momentos é dipolar, e um certo nível de diluição destrói qualquer ordem de longo alcance. Neste caso, um valor de $x = 0.167$ na amostra é suficiente para produzir desordem e frustração e, por conseqüência, uma fase vidro de spin. A partir de então, um campo magnético H_t perpendicular ao eixo Ising z é aplicado no material.

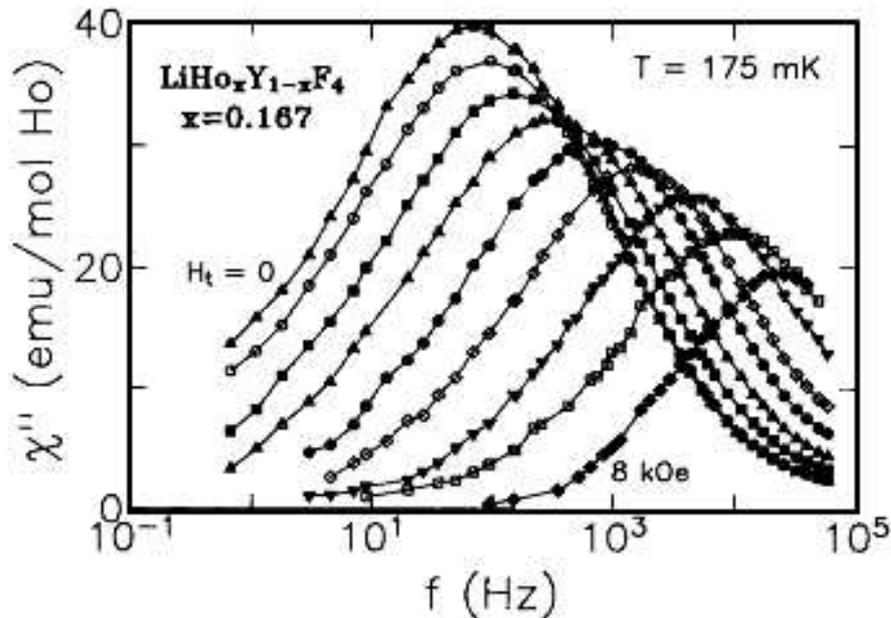


Figura 4: Parte imaginária da suscetibilidade χ'' pela frequência f em $T > T_g$ para uma série de valores de campo transversal com intervalos de $1 - KOe$. A velocidade de resposta na fase paramagnética sobe drasticamente quando o campo transversal introduz flutuações quânticas (WU et al., 1991).

Os efeitos da mecânica quântica são aparentes na resposta do sistema a este campo

magnético aplicado, onde essa resposta é dependente da frequência. A figura 4 mostra a parte imaginária da suscetibilidade χ'' para vários valores de H_t em $T = 0.175K$, uma temperatura ainda na fase paramagnética. A aplicação do campo transverso afeta radicalmente a escala de tempo da resposta do sistema. Com o aumento de H_t , a frequência de pico f_p aumenta sua magnitude em duas ordens de grandeza com somente $H_t = 6kOe$. Este aumento na frequência de pico altera os processos de relaxação e afeta os modos de tempos longos.

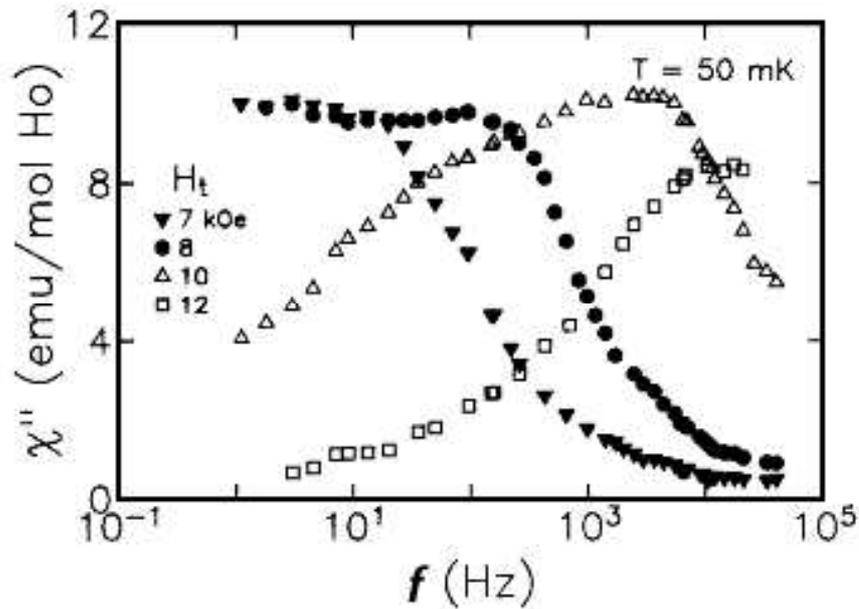


Figura 5: Contrapartida da figura 4 para $T < T_f$ em $H_t = 0$. Com o aumento de H_t a resposta do sistema se torna paramagnética (WU et al., 1991).

Já na figura 5, é plotada a χ'' em função de f para vários valores de H_t para $T = 0.05K$. Observa-se que para um dado H_t , em torno de $H_t = 8kOe$, $\chi''(f)$ simula o resultado para $T > T_f$ em $H_t = 0$, indicando os efeitos deste campo magnético transversal. Em ambas as fases, o efeito do campo transversal é introduzir flutuações quânticas que facilitam os processos de relaxação, desde que os modos de tempos longos são afetados devido ao deslocamento da resposta do sistema para altos valores de f . Como consequência, há um decréscimo da temperatura de transição T_f juntamente com o aumento de H_f .

2.3 Conceitos Teóricos Gerais e Modelos

2.3.1 Teoria de Réplicas

O cálculo de qualquer quantidade física na mecânica estatística começa a partir da função de partição, que é o traço sobre $e^{-\beta H(J)}$ e é uma função das interações da amostra. Esta quantidade física geralmente é definida por

$$F(J) = -\frac{1}{\beta} \ln Z(J) \quad (2.3)$$

em que F é energia livre e uma variável extensiva em função de J , e $Z = \text{Tr} e^{-\beta H(J)}$ é a função de partição. O próximo passo é calcular a média sobre todas as possíveis configurações de distribuição de impurezas, já que estas são distribuídas de forma aleatória. Este procedimento é conhecido como média configuracional e é denotado da seguinte forma:

$$\langle F(J) \rangle = -\frac{1}{\beta} \langle \ln Z(J) \rangle = -\frac{1}{\beta} \int dJP(J) \ln Z(J) \quad (2.4)$$

na qual a função de partição $Z(J)$ não é uma quantidade extensiva. Calcula-se no entanto $\ln Z$, desde esta é uma quantidade extensiva. Porém, $\ln Z$ apresenta certas dificuldades analíticas durante o cálculo da média configuracional $\langle \ln Z \rangle$. Há uma forma que contorna esta dificuldade. Pode-se transformar $\langle \ln Z \rangle$ na média da função de partição $\langle Z \rangle$ usando um procedimento que consiste essencialmente na identidade

$$\langle \ln Z \rangle = \lim_{(n \rightarrow 0)} (\langle Z^n \rangle - 1)/n \quad (2.5)$$

Para n inteiro, Z^n pode ser expresso como

$$Z^n = \prod_{\alpha=1}^n Z_{\alpha} \quad (2.6)$$

e α é um índice mudo. A utilização desta técnica torna o cálculo $\langle \ln Z \rangle$ relativamente simples. O conjunto $\alpha = 1, \dots, n$ pode ser interpretado como réplicas idênticas do sistema real, compartilhando a mesma distribuição de probabilidade dos J_{ij} .

2.3.2 Ergodicidade e Parâmetros de Ordem

Quando um experimento é feito em um intervalo de tempo muito grande, o sistema explora todas as regiões do espaço de fase com igual probabilidade, de modo que a média temporal realizada pelo experimento seja equivalente a uma média na mecânica estatística, em que todos os estados de equilíbrio estão incluídos, avaliados com a distribuição canônica

$$\frac{e^{-\beta\mathcal{H}}}{Z}. \quad (2.7)$$

Logo, quando um sistema é encontrado no equilíbrio com a probabilidade de Gibbs-Boltzmann $\propto e^{-\beta\mathcal{H}}$ em qualquer uma das possíveis configurações, é dito ergótico. Porém, sistemas não ergóticos possuem restrições a uma parte do espaço de fase. Um exemplo da quebra de ergodicidade ocorre no ferromagneto de Ising. Abaixo da temperatura de Curie, ocorre uma magnetização espontânea, e o sistema encontra-se em um estado com spins apontando para cima ou para baixo com igual probabilidade. Para reproduzir este comportamento, é preciso restringir o espaço de fase na mecânica estatística, quebrando a ergodicidade, escolhendo então uma das magnetizações, processo que é feito quando um campo H é aplicado. Da mesma forma, também é necessário restringir o espaço de fase para reproduzir o comportamento encontrado na fase vidro de spin, mas de maneira diferente. Como no problema vidro de spin o sistema se encontra em muitos estados termodinâmicos, não há como escolher um espaço configuracional específico. Entretanto, para contornar esta situação, é possível associar a cada um dos estados termodinâmicos um peso estatístico apropriado. Uma vez que seja feita a média sobre todos os pesos estatísticos, que pode ser associada a um parâmetro de ordem, o comportamento vidro de spin é reproduzido.

Como o parâmetro de ordem é uma forma de caracterizar o ordenamento vidro de spin, é necessário introduzir um conceito formal sobre o seu significado. Uma fase vidro de spin possui propriedades termodinâmicas distintas em relação a uma fase paramagnética desordenada como, por exemplo, calor específico, e, para caracterizar estas diferenças, utiliza-se o conceito de parâmetro de ordem. Em um ferromagneto, por exemplo, o parâmetro de ordem é a magnetização espontânea (por sítio)

$$M = \frac{1}{N} \sum_i \langle S_i \rangle \quad (2.8)$$

em que S_i é o valor do spin em um sítio i . Magnetização é um exemplo típico de um parâmetro de ordem que é a medida que define se um sistema está ou não em estado ordenado no sentido propriamente dito. A utilização dos parâmetros de ordem é útil para demarcar as diferentes fases através da representação de diagramas de fases, em que são determinados contornos que separam os diferentes ordenamentos.

2.3.3 Modelo de Sherrington e Kirkpatrick (SK)

Um modelo teórico muito utilizado para estudar a fase vidro de spin é o modelo de interações de longo alcance proposto por Sherrington e Kirkpatrick (1978), definido pelo hamiltoniano

$$\mathcal{H} = - \sum_{ij} J_{ij} S_i S_j - h \sum_j S_j \quad (2.9)$$

em que a soma ij da equação (2.9) cobre todos os pares distintos de spins S_i , em que S_i assume os valores -1 e $+1$. Define-se h como um campo magnético paralelo externo e J_{ij} uma variável com distribuição de probabilidade gaussiana dada por

$$P(J_{ij}) = \frac{1}{J} \sqrt{\frac{N}{2\pi}} \exp \left[-\frac{N}{2J^2} \left(J_{ij} - \frac{J_0}{N} \right)^2 \right] \quad (2.10)$$

em que J^2 é a variância e J_0 descreve a tendência para uma ordem ferromagnética. Calculando a média configuracional da energia livre através do método das réplicas, o seguinte resultado é obtido:

$$-\beta f = \lim_{(n \rightarrow 0)} \left[-\frac{\beta^2 J^2}{4n} \sum_{\alpha \neq \beta} q_{\alpha\beta}^2 - \frac{\beta J_0}{2n} \sum_{\alpha} m_{\alpha}^2 + \frac{1}{4} \beta^2 J^2 + \frac{1}{n} \ln T_r e^{\mathcal{L}} \right] \quad (2.11)$$

em que

$$\mathcal{L} = \beta^2 J^2 \sum_{\alpha < \beta} q_{\alpha\beta} S^{\alpha} S^{\beta} + \beta \sum_{\alpha} (J_0 m_{\alpha} + h) \sum_i S^{\alpha}. \quad (2.12)$$

As variáveis $q_{\alpha\beta}$ e m_{α} foram introduzidas para linearizar o problema na resolução das integrais gaussianas. Contudo, tais variáveis representam parâmetros de ordem. A variável $m_{\alpha} = \langle S^{\alpha} \rangle$ representa o parâmetro de ordem ferromagnético e $q_{\alpha\beta} = \langle S^{\alpha} \rangle^2$ define o parâmetro de ordem vidro de spin (ver Sherrington e Kirkpatrick (1978)).

Ao assumir a solução com simetria de réplicas, $q_{\alpha\beta} = q$ e $m_{\alpha} = m$, e utilizando a condição de extremização da energia livre da equação (2.11) em relação a estes parâmetros, as seguintes equações são obtidas (SHERRINGTON; KIRKPATRICK, 1978):

$$m = \int Dz \tanh \beta \rho(z) \quad (2.13)$$

$$q = \int Dz \tanh^2 \beta \rho(z) \quad (2.14)$$

em que $Dz = dz \exp(-z^2/2)/\sqrt{2\pi}$ e $\rho(z) = J\sqrt{q}z + J_0 + h$.

Na fase paramagnética, a média $\langle S_i \rangle$ é nula em cada sítio, e como consequência, $m = q = 0$. Já na fase ferromagnética, há um ordenamento uniforme no espaço com orientações na direção positiva, de tal forma que $\langle S_i \rangle > 0$ em grande parte dos sítios, o que resulta $m > 0$ e $q > 0$. Dentro da fase vidro de spin, a média $\langle S_i \rangle$ pode ser não nula em um dado sítio. Todavia, a média sobre todo os sítios $M = N^{-1} \sum_i m_i$ o é, o que indica que $m = 0$ e $q > 0$.

A utilização do “ansatz” de simetria de réplicas no modelo SK apresenta o problema de entropia negativa a baixas temperaturas. Esta observação motivou Almeida e Thouless (1978) a estudar a estabilidade da solução com simetria de réplicas do modelo SK, através da introdução de pequenas perturbações na energia livre, como uma forma de garantir ou testar sua estabilidade. Com a expansão até segunda ordem em torno da solução com simetria de réplicas, é obtida uma matriz \bar{G} , conhecida como matriz *Hessiana*. Para que a solução com simetria de réplicas seja estável, todos os autovalores desta matriz \bar{G} , $-\lambda_+$, λ_- e λ_{at-} , devem ser positivos. Contudo, no modelo SK, enquanto que a fase paramagnética apresenta todos os autovalores positivos, a fase vidro de spin mostra que o terceiro autovalor, λ_{at} , conhecido como *replicon*, é negativo na fase vidro de spin, indicando que a solução com simetria de réplicas é instável dentro desta fase (para uma revisão mais completa, ver Nishimori (2001)). No modelo proposto, o “ansatz” de simetria de réplicas também é utilizado de tal forma que a estabilidade da solução com simetria obtida no presente trabalho é objeto de estudo durante todo o capítulo cinco.

2.4 Transições de Primeira Ordem

Uma vez apresentada a definição de ordenamento e transições de fase, se faz necessária a complementação acerca dos conceitos anteriormente introduzidos. Para tal, considere primeiramente o potencial termodinâmico Ω e suas derivadas em uma dada transição. Se as derivadas primeiras de Ω exibirem singularidades, o que significa matematicamente que a função não é definida em um dado ponto, a transição é dita de primeira ordem. Em contrapartida, se as derivadas primeiras são contínuas, há transição de segunda ordem. Em regiões de primeira ordem, um ou mais parâmetros que descrevem o sistema apresentam as chamadas soluções metaestáveis. Soluções metaestáveis são aquelas que correspondem ao mínimo local do potencial termodinâmico. Há também os chamados fenômenos multicríticos, demarcados por “pontos multicríticos”, em que diversas linhas críticas distintas se encontram. Como em outros sistemas, o problema vidro de spin também apresenta transições de primeira ordem e fenômenos multicríticos, como poderá ser visto nas próxi-

mas seções. No entanto, regiões com múltiplas soluções apresentam certas dificuldades na escolha das soluções fisicamente aceitáveis e serão discutidas no decorrer deste trabalho. Logo, o restante deste capítulo voltará a sua atenção para dois modelos vidro de spin distintos que demonstram a existência de regiões com transições descontínuas (ver Binder (1987)).

2.4.1 Modelo de Ghatak e Sherrington (GS)

Em 1977, Ghatak e Sherrington generalizaram o modelo de vidro de spin Ising de longo alcance de Sherrington e Kirkpatrick para um spin S arbitrário e incluíram o termo anisotrópico D para levar em consideração os efeitos dos campos de cristal. A introdução deste parâmetro tem um importante papel, como é visto a seguir. Determinados compostos tais como $(Ti_{1-x}V_x)_xO_3$ mostram um caráter anisotrópico na fase vidro de spin para certo alcance de x (Dumas et al. (1979)). Na solução de simetria de réplicas para S inteiro, o modelo GS mostra tanto transições de segunda ordem quanto de primeira ordem entre as fases paramagnética e vidro de spin.

O modelo introduzido por Ghatak e Sherrington (1977) é dado pelo seguinte hamiltoniano

$$\mathcal{H} = - \sum_{ij} J_{ij} S_i S_j + D \sum_i S_i^2 \quad (2.15)$$

em que os N spins $S_i = \pm S$ e a soma (ij) é feita sobre todos os pares distintos de spins; J_{ij} é uma variável aleatória com distribuição de probabilidade gaussiana

$$P(J_{ij}) = \left(\frac{N}{2\pi J^2} \right)^{1/2} \exp \left(- \frac{N J_{ij}^2}{2J^2} \right) \quad (2.16)$$

e $D \sum_i S_i^2$ é a componente que simula os efeitos de campos de cristal responsáveis pela introdução do caráter anisotrópico ao problema vidro de spin. A simetria de réplicas que consiste da identidade $\ln x = \lim_{n \rightarrow 0} [(x^n - 1)/n]$ é usada para calcular a média configuracional da energia livre por spin

$$-\beta f = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{Nn} (\langle Z^n \rangle - 1). \quad (2.17)$$

A energia livre é avaliada pelo método “steepest descent”, em que os parâmetros p_α e $q_{\alpha\beta}$ são escolhidos de maneira a extremizar a energia livre

$$p_\alpha = \langle (S_\alpha)^2 \rangle \quad ; \quad q_{\alpha\beta} = \langle S_\alpha S_\beta \rangle \quad (2.18)$$

Restringindo o problema para o caso em que os spins assumem os valores $S = -1, 0, 1$ e

utilizando o “ansatz” de simetria de réplicas, as soluções das equações dos extremos tomam a forma

$$p_\alpha = p \quad ; \quad q_{\alpha\beta} = q \quad (2.19)$$

para todo α e β . A energia livre obtida através da solução com simetria de réplicas resulta em

$$f = \frac{p^2 - q^2}{4T} - T \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{\sqrt{2\pi}} e^{-x^2/2} \ln z(x) \quad (2.20)$$

em que

$$z(x) = 1 + 2e^{-\beta D} e^{\frac{1}{2}\beta^2(p-q)} \cosh(\beta\sqrt{q}x). \quad (2.21)$$

As condições de extremização da energia livre (2.20) com respeito a q e p são, respectivamente,

$$p = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{\sqrt{2\pi}} e^{-x^2/2} \varphi_2(x) \quad (2.22)$$

$$q = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{\sqrt{2\pi}} e^{-x^2/2} [\varphi_1(x)]^2 \quad (2.23)$$

com

$$\varphi_2(x) = \frac{\cosh(\beta\sqrt{q}x)}{2e^{-\beta D} e^{-\frac{1}{2}\beta^2(p-q)} + \cosh(\beta\sqrt{q}x)} \quad (2.24)$$

$$\varphi_1(x) = \frac{\sinh(\beta\sqrt{q}x)}{2e^{-\beta D} e^{-\frac{1}{2}\beta^2(p-q)} + \cosh(\beta\sqrt{q}x)}. \quad (2.25)$$

No entanto, $\varphi_1(x)$, $\varphi_2(x)$ e $z(x)$ podem ser reescritos em termos da variável x^* , que é definida por

$$x^* = \frac{1}{\sqrt{q}} \left(D - \frac{p-q}{2T} \right) \quad (2.26)$$

de tal forma que

$$\varphi_2(x) = \frac{2e^{-\sqrt{q}x^*/T}}{z(x)} \cosh\left(\frac{\sqrt{q}x}{T}\right) \quad (2.27)$$

$$\varphi_1(x) = \frac{2e^{-\sqrt{q}x^*/T}}{z(x)} \sinh\left(\frac{\sqrt{q}x}{T}\right) \quad (2.28)$$

sendo que, agora

$$z(x) = 1 + 2e^{-\sqrt{q}x^*/T} \cosh\left(\frac{\sqrt{q}}{T}x\right). \quad (2.29)$$

Este procedimento utilizado por Costa, Yokoi e Salinas (1994) reduz o problema de duas equações não lineares acopladas ao problema de uma única equação, possibilitando também, através de métodos numéricos, a obtenção de todas as soluções para os parâmetros p e q nas regiões de primeira ordem. Para o parâmetro q , as múltiplas soluções são observadas na figura 6(a). Além disso, os três autores citados estudaram em detalhes a solução

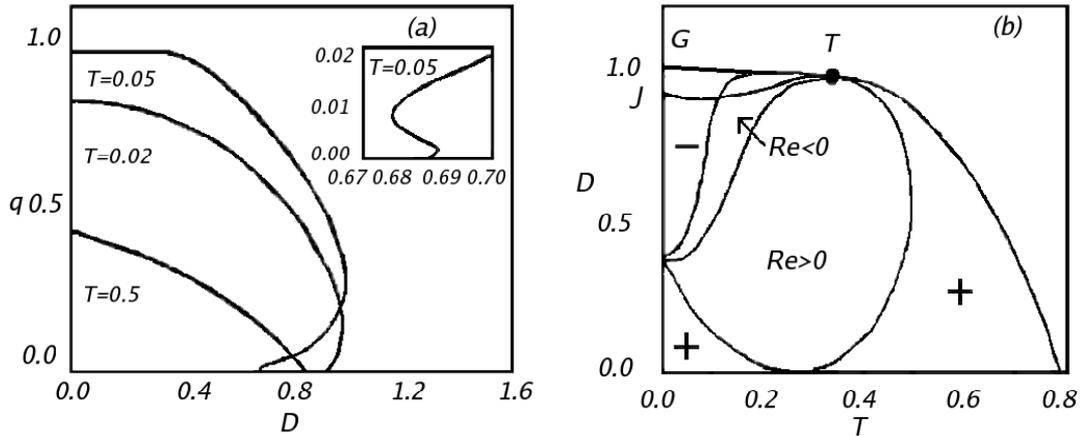


Figura 6: Figura (a): Parâmetro de ordem vidro de spin q como uma função do parâmetro anisotrópico D para algumas temperaturas representativas, indicando as múltiplas soluções do parâmetro q dentro de uma faixa de temperatura. Figura (b): Diagrama de fase D versus T com uma visão detalhada da estabilidade da solução com simetria de réplicas (COSTA; YOKOI; SALINAS, 1994).

com simetria de réplicas, que é apresentada sob a forma de um diagrama de fases D versus T . O surgimento do parâmetro de ordem p , através da generalização para um S arbitrário ao modelo GS, afeta diretamente a estabilidade da solução com simetria de réplicas. No estudo da estabilidade do modelo SK, por exemplo, somente foram encontrados autovalores positivos e negativos. Porém, durante a análise da estabilidade do modelo GS, autovalores negativos e até mesmo complexos são obtidos em algumas regiões do diagrama de fases e podem ser observados pelos símbolos $Re > 0$ (autovalores complexos com a parte real positiva) e $Re < 0$ (autovalores complexos com a parte real negativa) no diagrama da figura 6(b), indicando uma instabilidade adicional da solução em relação ao modelo SK. Ainda na figura 6(b), os símbolos $+$ e $-$ indicam a região onde os autovalores λ_{\pm} são positivos e negativos, respectivamente. Observa-se também que as curvas separando todas as regiões demarcadas se encontram no ponto T , que é um ponto tricrítico, sendo que a linha TJ define a linha de transição de primeira ordem. A linha que separa as soluções paramagnética e vidro de spin é dada pelo replicon λ_{at} e, devido à negatividade do autovalor λ_{at} , a solução com simetria de réplicas na fase vidro de spin é também instável no modelo GS. Além disso, Costa, Yokoi e Salinas utilizaram as condições de estabilidade da solução paramagnética, primeiramente estudadas por Lage e Almeida (1982), como base para localização do ponto tricrítico. Demarcaram inclusive a exata localização da linha de primeira ordem comparando as energias livres das soluções paramagnéticas e vidro de spin, justificando que quando são comparadas às energias livres de ambas as soluções, somente as soluções estáveis se encontram continuamente, de tal forma que as soluções

metaestáveis podem ser descartadas.

2.4.2 Vidro de Spin Ising Fermiônico (ISGf)

O modelo de vidro de spin Ising fermiônico (ISGf) é descrito pelo hamiltoniano grande canônico

$$\hat{\mathcal{H}} = - \sum_{ij} J_{ij} \hat{\sigma}_i \hat{\sigma}_j - \mu \sum_i \hat{n}_i, \quad (2.30)$$

sendo que o acoplamento J_{ij} é uma distribuição gaussiana em torno do zero com variância J^2 . A principal diferença deste modelo para modelos clássicos é que os spins são dados em termos de operadores fermiônicos que atuam sobre um espaço de quatro estados por sítio, dois deles não magnéticos $|00\rangle$ e $|\uparrow\downarrow\rangle$, e dois estados magnéticos $|\uparrow 0\rangle$, $|0 \downarrow\rangle$

$$\sigma = a_{\uparrow}^{\dagger} a_{\uparrow} - a_{\downarrow}^{\dagger} a_{\downarrow} \quad ; \quad n = a_{\uparrow}^{\dagger} a_{\uparrow} + a_{\downarrow}^{\dagger} a_{\downarrow} \quad (2.31)$$

sendo n o número de ocupação. Neste modelo, o potencial químico μ introduz flutuações

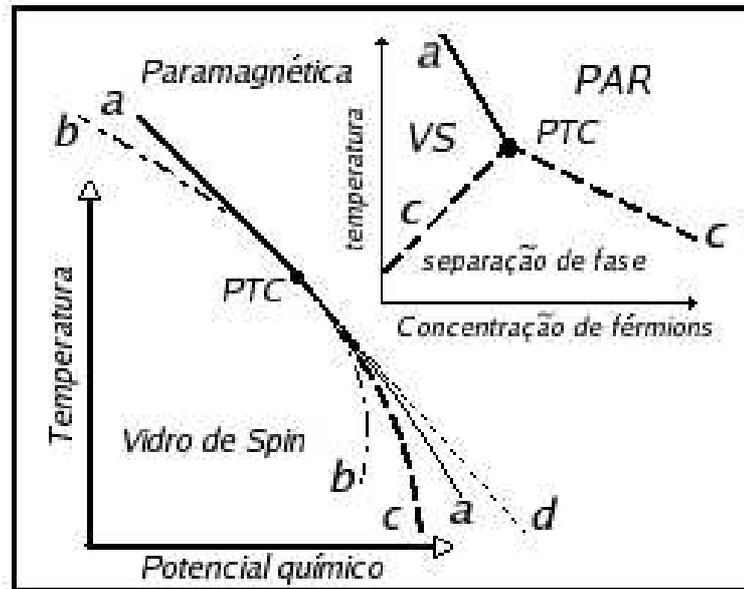


Figura 7: Vizinhanças do Ponto Tricrítico (PTC) para um potencial químico positivo. Acima de PTC ocorre uma transição de segunda ordem entre as fases paramagnética e vidro de spin. Abaixo de PTC surge uma transição de primeira ordem. A linha d define o limite de validade da solução vidro de spin e a linha b define o limite de validade da solução paramagnética. (ROSENOW; OPPERMANN, 1996)

no número de ocupação dos sítio (flutuações de carga), devido aos estados não magnéticos provenientes do espaço fermiônico. O procedimento para obtenção da solução do problema vidro no modelo fermiônico é assunto recorrente dos capítulos três e quatro. No entanto,

alguns resultados ilustrativos são demonstrados nesta seção, lembrando apenas que o tratamento formal utilizado para problemas fermiônicos ainda não foi apresentado.

Uma vez obtido o potencial termodinâmico, ele é extremizado com respeito a q e \bar{q} , de tal forma que

$$\bar{q} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{\sqrt{2\pi}} e^{-x^2/2} \varrho_2(x) \quad (2.32)$$

$$q = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{\sqrt{2\pi}} e^{-x^2/2} [\varrho_1(x)]^2 \quad (2.33)$$

com

$$\varrho_2(x) = \frac{\cosh(\beta\sqrt{q}x)}{\cosh(\beta\mu)e^{-\frac{1}{2}\beta^2(p-q)} + \cosh(\beta\sqrt{q}x)} \quad (2.34)$$

$$\varrho_1(x) = \frac{\sinh(\beta\sqrt{q}x)}{\cosh(\beta\mu)e^{-\frac{1}{2}\beta^2(p-q)} + \cosh(\beta\sqrt{q}x)}. \quad (2.35)$$

Neste modelo fermiônico, são observadas transições de fase com a existência de comportamentos tricríticos, que surgem devido à mudança na concentração de férmions, ajustada pelo potencial químico. Trabalhando no ensemble grande canônico, o modelo ISGf mostra que, com o aumento no potencial químico, somente há transição de segunda ordem até o ponto tricrítico localizado em $T_{tc} = 1/3$. Para $T_{tc} < 1/3$, todavia, o sistema apresenta uma transição de primeira ordem (descontínua), como é vista na figura 7, em que as vizinhanças do ponto tricrítico (PTC) são mostradas em um diagrama T versus μ . Neste diagrama, a transição contínua ocorre na curva (a) acima do PTC. Abaixo de PTC, transições termodinâmicas de primeira ordem (descontínuas) surgem sobre a curva (c). As curvas (b) e (d) limitam a região de existência das fases ordenadas.

2.4.3 Mapeamento Entre os Modelos ISGf e GS

A apresentação de dois modelos distintos neste capítulo é validada pelo fato de que há uma estreita relação entre os modelos ISGf no ensemble grande canônico e modelo GS clássico. Observando atentamente as equações dos parâmetros de ordem (2.22) e (2.32), e também (2.23) e (2.33), é notável a equivalência entre estas soluções, desde que obedeçam à seguinte relação:

$$e^{\beta D} = e^{\beta\mu} + e^{-\beta\mu} \quad (2.36)$$

Esta equação que define um mapeamento em nível de potencial termodinâmico (energia livre) entre os modelos ISGf e GS foi introduzida por Feldmann e Oppermann (1999). Como consequência direta da equação (2.36), as propriedades termodinâmicas de ambos os

modelos estão diretamente relacionadas. No modelo Ghatak e Sherrington, a introdução do parâmetro anisotrópico D proporciona o surgimento de transições de primeira ordem, assim como μ o faz no modelo fermiônico. No modelo clássico de spin generalizado que possui um parâmetro de ordem p_α , os autovalores λ_\pm são negativos e até mesmo complexos em algumas regiões do diagrama de fase. O mesmo ocorre no modelo fermiônico, em que são obtidos autovalores negativos e complexos. Perez e Sherrington (2005), em um trabalho complementar, concluíram que o modelo ISGf é mapeável ao modelo clássico GS não somente em nível de potencial termodinâmico, mas inclusive em nível de densidade de estados.

Dadas as características apresentadas dos modelo ISGf e GS, é natural que, através do mapeamento, seja possível comparar resultados gerais obtidos no modelo ISGf com aqueles obtidos por Ghatak e Sherrington para o modelo GS. Dentro deste contexto, o presente trabalho, que tem por objetivo introduzir flutuações quânticas no modelo ISGf através do campo transversal, utilizará a técnica introduzida por Costa, Yokoi e Salinas para demarcar a linha de transição de primeira ordem no modelo ISGf. Em adição às características citadas anteriormente, os conceitos introduzidos por Lage e Almeida (1982) durante a análise das condições de estabilidade da solução com simetria do modelo Ghatak e Sherrington são de grande importância na obtenção do ponto tricrítico do modelo fermiônico proposto. Além disso, o formalismo fermiônico, apresentado no decorrer deste trabalho, permitirá estudar a competição entre a fase vidro de spin e diversos outros tipos de acoplamentos entre férmions, como por exemplo supercondutividade.

3 *Métodos Utilizados*

3.1 Introdução

Durante este capítulo, é feita uma revisão sobre os métodos necessários para o cálculo das integrais funcionais utilizadas no tratamento de sistemas de muitas partículas idênticas, e que atuam como base formal para o trabalho apresentado nos capítulos seguintes. Sistemas de muitas partículas podem ser descritos em segunda quantização, sendo que qualquer operador físico pode ser expresso em termos de operadores de criação e destruição. Logo, é possível introduzir este tipo de formalismo também no problema vidro de spin, já que este, basicamente, é um problema de muitos corpos. Primeiramente, é feita uma introdução sobre o formalismo de segunda quantização. Na seção seguinte, é introduzida a base dos estados coerentes, uma base natural para sistemas de muitas partículas, que são auto-estados dos operadores de destruição. Na representação de férmions idênticos, que é o caso do presente trabalho, é requerida uma álgebra especial para tratar com a anticomutatividade dos operadores que representam as partículas em questão. Como consequência, é apresentada uma seção a cerca da álgebra de variáveis anticomutantes, utilizada posteriormente na base dos estados coerentes para férmions, e conhecida como álgebra de Grassmann. Finalmente, é feita a descrição do formalismo das integrais de caminho fermiônicas, bem como o procedimento tomado para o cálculo da função de partição, dentro da mecânica estatística, com hamiltonianos que possuem operadores que anticomutam. Para uma descrição mais completa dos assuntos que são abordados neste capítulo, ver Negele e Orland (1988).

3.2 Segunda Quantização

Para sistemas de muitas partículas idênticas, é útil definir operadores que criam (a_α^\dagger) ou destroem (a_α) partículas em um estado específico. Estes operadores geram o espaço de Hilbert completo pela sua ação sobre um único estado de referência, assegurando também

uma base para a álgebra dos operadores dentro deste espaço.

Para cada estado de partícula única $|\lambda\rangle$ do espaço de partícula única H , é definido um operador criação de bóson ou férmions a_λ^\dagger pela sua ação sobre qualquer estado $|\lambda_1 \dots \lambda_N\rangle$, que é simetrizado ou antisimetrizado no espaço de bósons ou de férmions, respectivamente

$$a_\lambda^\dagger |\lambda_1 \dots \lambda_N\rangle = |\lambda \lambda_1 \dots \lambda_N\rangle. \quad (3.1)$$

Em uma base ortonormalizada, a_λ^\dagger atuando sobre um estado resulta

$$a_\lambda^\dagger |\lambda_1 \dots \lambda_N\rangle = \sqrt{n_\lambda + 1} |\lambda \lambda_1 \dots \lambda_N\rangle. \quad (3.2)$$

sendo n_λ o número de ocupação do estado $|\lambda\rangle$. Fisicamente, o operador a_λ^\dagger adiciona uma partícula sobre o estado em que opera, neste caso, o estado $|\lambda\rangle$ e simetriza ou antisimetriza o novo estado. Devido ao princípio de exclusão de Pauli, em que é permitido apenas um férmion por estado, a equação (3.1) toma a seguinte forma

$$a_\lambda^\dagger |\lambda_1 \dots \lambda_N\rangle = \begin{cases} |\lambda \lambda_1 \dots \lambda_N\rangle & \text{se } |\lambda\rangle \in |\lambda_1 \dots \lambda_N\rangle \\ 0 & \text{se } |\lambda\rangle \notin |\lambda_1 \dots \lambda_N\rangle \end{cases} \quad (3.3)$$

Em sistemas de muitas partículas, é importante definir o estado vácuo, denotado por $|0\rangle$, que representa um estado sem partículas. Um operador a_λ^\dagger , agindo sobre o vácuo, cria uma partícula no estado $|\lambda\rangle$

$$a_\lambda^\dagger |0\rangle = |\lambda\rangle \quad (3.4)$$

Como consequência, os operadores de criação geram um espaço de Fock completo através da repetida ação sobre o vácuo.

Bases convenientes para o espaço de Fock utilizam tanto estados normalizados como, por exemplo, $\{|0\rangle, |\lambda_1\rangle, |\lambda_1 \lambda_2\rangle, |\lambda_1 \lambda_2 \dots \lambda_N\rangle, \dots\}$, quanto estados não normalizados, tais como $\{|0\rangle, |\lambda_1\rangle, |\lambda_1 \lambda_2\rangle, |\lambda_1 \lambda_2 \dots \lambda_N\rangle, \dots\}$. Com isso, a relação de completeza no espaço de Fock, válida tanto para estados normalizados quanto para não normalizados, é definida por

$$\begin{aligned} 1 &= |0\rangle\langle 0| + \sum_{N=1}^{\infty} \frac{1}{N!} \sum_{\lambda_1 \dots \lambda_N} |\lambda_1 \dots \lambda_N\rangle \langle \lambda_1 \dots \lambda_N| \\ &= |0\rangle\langle 0| + \sum_{N=1}^{\infty} \frac{1}{N!} \sum_{\lambda_1 \dots \lambda_N} \left(\prod_{\lambda} n_\lambda! \right) |\lambda_1 \dots \lambda_N\rangle \langle \lambda_1 \dots \lambda_N| \end{aligned} \quad (3.5)$$

Através das propriedades de simetria ou antisimetria dos estados de muitas partículas, são

impostas relações de comutação ou anticomutação entre os *operadores de criação*. Para qualquer estado $|\lambda_1 \dots \lambda_N\rangle$ e qualquer estado de partícula única $|\lambda\rangle$ e $|\mu\rangle$, estas relações são definidas por:

$$\begin{aligned} a_\lambda^\dagger a_\mu^\dagger |\lambda_1 \lambda_2 \dots \lambda_N\rangle &= |\lambda \mu \lambda_1 \dots \lambda_N\rangle \\ &= \zeta |\mu \lambda_1 \dots \lambda_N\rangle \\ &= \zeta a_\lambda^\dagger a_\mu^\dagger |\lambda_1 \lambda_2 \dots \lambda_N\rangle \end{aligned} \quad (3.6)$$

sendo que, através das propriedades de permutação dos estados específicas para bósons e para férmions, ζ assume os valores $+1$ e -1 , respectivamente. A partir da equação (3.6), a seguinte condição é obtida:

$$a_\lambda^\dagger a_\mu^\dagger - \zeta a_\mu^\dagger a_\lambda^\dagger = 0 \quad (3.7)$$

na qual é conveniente introduzir a seguinte notação:

$$[a_\lambda^\dagger, a_\mu^\dagger]_\zeta = a_\lambda^\dagger a_\mu^\dagger - \zeta a_\mu^\dagger a_\lambda^\dagger = 0. \quad (3.8)$$

Os operadores a_λ^\dagger e a_μ^\dagger não são auto-adjuntos. Contudo, os operadores a_λ são adjuntos dos operadores de criação a_λ^\dagger . Com base nesta afirmação, prontamente são obtidas as relações de comutação dos *operadores de destruição*, que seguem a adjunta da equação (3.7)

$$[a_\lambda, a_\mu]_{-\zeta} = a_\lambda a_\mu - \zeta a_\mu a_\lambda = 0. \quad (3.9)$$

Como último passo, são definidas as relações de comutação entre os *operadores de criação e destruição* para estados de muitas partículas. Assim como no cálculo anterior, são introduzidos dois estados $|\lambda\rangle$ e $|\mu\rangle$ pertencentes à base ortogonal $\{|\alpha\rangle\}$. Logo,

$$\begin{aligned} a_\lambda a_\mu^\dagger |\alpha_1 \dots \alpha_n\rangle &= a_\lambda |\mu \alpha_1 \dots \alpha_n\rangle \\ &= \delta_{\lambda\mu} |\alpha_1 \dots \alpha_n\rangle + \sum_{i=1}^n \zeta^i \delta_{\lambda\alpha_i} |\mu \alpha_1 \dots \hat{\alpha}_i \dots \alpha_n\rangle \end{aligned} \quad (3.10)$$

$$a_\mu^\dagger a_\lambda |\alpha_1 \dots \alpha_n\rangle = \sum_{i=1}^n \zeta^{i-1} \delta_{\lambda\alpha_i} |\mu \alpha_1 \dots \hat{\alpha}_i \dots \alpha_n\rangle \quad (3.11)$$

substituindo a equação (3.11) em (3.10), a seguinte relação é obtida:

$$a_\lambda^\dagger a_\mu |\alpha_1 \dots \alpha_n\rangle = (\delta_{\lambda\mu} + \zeta a_\mu a_\lambda^\dagger) |\mu \alpha_1 \dots \alpha_n\rangle. \quad (3.12)$$

Logo, para qualquer estado $|\alpha_1 \dots \alpha_n\rangle$, os operadores de criação e destruição satisfazem

as equações dos operadores

$$[a_\lambda, a_\mu^\dagger]_{-\zeta} = a_\lambda a_\mu^\dagger - \zeta a_\mu^\dagger a_\lambda = \delta_{\lambda\mu}. \quad (3.13)$$

Assim, bósons satisfazem as relações de comutação

$$[a_\lambda, a_\mu^\dagger]_{-} = a_\lambda a_\mu^\dagger + a_\mu^\dagger a_\lambda = \delta_{\lambda\mu} \quad (3.14)$$

e férmions satisfazem as relações de anticomutação

$$[a_\lambda, a_\mu^\dagger]_{+} = a_\lambda a_\mu^\dagger - a_\mu^\dagger a_\lambda = \delta_{\lambda\mu}. \quad (3.15)$$

3.2.1 Estados Coerentes

A base dos estados coerentes é análoga à base dos auto-estados de posição na mecânica quântica. Embora esta base não seja ortonormal, ela cobre todo o espaço de Fock. Tal como os estados de posição $|\vec{r}\rangle$ são definidos como auto-estados do operador \hat{r} , os estados coerentes são definidos como auto-estados dos operadores de destruição. Para entender esta afirmação, considere um vetor geral $|\phi\rangle$ do espaço de Fock, que pode ser expandido como

$$|\phi\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{\alpha_1 \dots \alpha_n} \phi_1 \dots \phi_n |\alpha_1 \dots \alpha_n\rangle \quad (3.16)$$

sendo que $|\phi\rangle$ tem componentes com um número mínimo de partículas. Aplicando qualquer operador de criação em $|\phi\rangle$, observa-se que o número mínimo de partículas em $|\phi\rangle$ aumenta em um. A partir deste acréscimo em $|\phi\rangle$, é possível que o estado resultante não seja proporcional ao estado original. Se esta situação de fato ocorrer, o operador de criação não pode ter um auto-estado no espaço de Fock. Por outro lado, aplicando um operador de destruição em $|\phi\rangle$, o número de partículas no estado $|\phi\rangle$ decresce por um. Desde que $|\phi\rangle$ pode conter um número máximo de partículas, nada proíbe que uma partícula seja destruída, o que permite que $|\phi\rangle$ tenha auto-estados.

Quando um operador de destruição age sobre um estado coerente, surge uma diferença significativa entre bósons e férmions. As relações de comutação e anticomutação implicam na ocorrência da seguinte relação dos comutadores

$$[\phi_\alpha, \phi_\beta]_{-\zeta} = 0 \quad (3.17)$$

Para férmions, os autovalores não comutam e, para acomodar esta característica não

usual, é necessário introduzir variáveis anticomutantes chamadas variáveis de Grassmann. Para bósons, contudo, os autovalores comutam. Como o presente trabalho é apresentado em uma formulação fermiônica, a álgebra dos estados coerentes para bósons não é apresentada. No entanto, a seção seguinte devotará atenção especial à álgebra das variáveis anticomutantes, conhecida como álgebra de Grassmann. Logo após, é introduzida uma seção contendo as propriedades dos estados coerentes para férmions.

3.2.2 Álgebra de Grassmann

Quando são utilizados operadores para descrever algum sistema, é necessário definir uma base. Para a representação de sistemas fermiônicos, é escolhida a base dos estados coerentes que são auto-estados dos operadores de destruição. Entretanto, em sistemas fermiônicos, os correspondentes operadores de criação e destruição anticomutam. De forma a acomodar esta idéia não usual, é preciso introduzir variáveis anticomutantes chamadas variáveis de Grassmann. A álgebra de Grassmann é definida por um conjunto de geradores, que são denotados por $\{\xi_\alpha\}$, $\alpha = 1, \dots, n$. Estes geradores anticomutam:

$$\xi_\alpha \xi_\beta + \xi_\beta \xi_\alpha = 0 \quad (3.18)$$

tal que, em particular,

$$\xi_\alpha^2 = 0. \quad (3.19)$$

A base da álgebra de Grassmann é feita pelo produto distinto de todos os geradores. Assim, um número na álgebra de Grassmann é uma combinação linear com coeficientes complexos dos números $\{1, \xi_{\alpha_1}, \xi_{\alpha_1} \xi_{\alpha_2}, \dots, \xi_{\alpha_1} \xi_{\alpha_2} \dots \xi_{\alpha_n}\}$. As seguintes propriedades definem a conjugação em uma álgebra de Grassmann:

$$(\xi_\alpha)^* = \xi_\alpha^* \quad (3.20)$$

$$(\xi_\alpha^*)^* = \xi_\alpha \quad (3.21)$$

Se λ é um número complexo

$$(\lambda \xi_\alpha)^* = \lambda^* \xi_\alpha^* \quad (3.22)$$

e é válida também para qualquer produto de geradores

$$(\xi_{\alpha_1} \dots \xi_{\alpha_n})^* = \xi_{\alpha_n}^* \xi_{\alpha_{n-1}}^* \dots \xi_{\alpha_1}^*. \quad (3.23)$$

Devido à propriedade (3.19), qualquer função analítica nesta álgebra é uma função

linear

$$f(\xi) = f_0 + f_1\xi \quad (3.24)$$

e esta é a forma obtida para representação dos estados coerentes de uma função de onda. Similarmente, a representação dos estados coerentes de um operador na álgebra de Grassmann será uma função de ξ^* e ξ e deve ter a forma

$$A(\xi^*, \xi) = a_0 + a_1\xi + \bar{a}_1\xi + a_{12}\xi^*\xi. \quad (3.25)$$

Assim como em funções complexas ordinárias, a derivada pode ser definida para funções com variáveis de Grassmann. As derivadas de funções com variáveis de Grassmann possuem as mesmas propriedades das derivadas de funções complexas, exceto pelo fato de que, quando o operador derivativo $\frac{\partial}{\partial \xi}$ age sobre ξ , a variável ξ tem necessariamente que ser anticomutada até estar adjacente a $\frac{\partial}{\partial \xi}$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \xi}(\xi^*\xi) &= \frac{\partial}{\partial \xi}(-\xi\xi^*) \\ &= -\xi^*. \end{aligned} \quad (3.26)$$

Uma vez definida a derivação para variáveis de Grassmann, as seguintes condições são prontamente obtidas:

$$\frac{\partial}{\partial \xi}A(\xi^*, \xi) = a_1 - a_{12}\xi^* \quad (3.27)$$

$$\frac{\partial}{\partial \xi^*}A(\xi^*, \xi) = \bar{a}_1 + a_{12}\xi \quad (3.28)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \xi} \frac{\partial}{\partial \xi^*}A(\xi^*, \xi) &= -a_{12} \\ &= -\frac{\partial}{\partial \xi^*} \frac{\partial}{\partial \xi}A(\xi^*, \xi) \end{aligned} \quad (3.29)$$

a partir da equação (3.29), observa-se que os operadores $\frac{\partial}{\partial \xi^*}$ e $\frac{\partial}{\partial \xi}$ anticomutam.

A integração sobre as variáveis de Grassmann é definida como um mapeamento linear que possui as propriedades fundamentais das integrais ordinárias sobre funções em que a integral de uma forma diferencial exata é zero. Esta exigência implica que a integral sobre 1 seja 0, desde que 1 é o derivativo de ξ . A integração sobre ξ é a única não nula, desde que ξ não seja derivativo. Logo,

$$\begin{aligned} \int d\xi 1 &= 0 \\ \int d\xi \xi &= 1. \end{aligned} \quad (3.30)$$

É natural definir a integração para variáveis conjugadas da mesma forma

$$\begin{aligned}\int d\xi^* 1 &= 0 \\ \int d\xi^* \xi^* &= 1.\end{aligned}\tag{3.31}$$

3.2.3 Estados Coerentes Para Férmions

Quando são construídos estados coerentes para férmions, primeiramente se define uma álgebra de Grassmann G através da associação de um gerador ξ_α em cada operador de destruição a_α , e um gerador ξ_α^* em cada operador de criação a_α^\dagger . Desta forma, constrói-se um espaço de Fock generalizado como um conjunto de combinações lineares dos estados do espaço de Fock F com coeficientes na álgebra de Grassmann G . Qualquer vetor $|\psi\rangle$ dentro do espaço de Fock generalizado pode ser expandido através da seguinte equação:

$$|\psi\rangle = \sum_\alpha \chi_\alpha |\phi_\alpha\rangle\tag{3.32}$$

sendo χ_α variáveis de Grassmann e $|\phi_\alpha\rangle$ vetores do espaço de Fock. Para tratar com expressões contendo combinações de variáveis de Grassmann e operadores de criação e destruição, é necessário melhorar a definição das variáveis de Grassmann para especificar as relações de comutação entre ξ e o operador de destruição a e as adjuntas destas expressões com ambos os parâmetros. As relações de comutação para férmions obedecem às seguintes equações:

$$[\tilde{\xi}, \tilde{a}]_+ = 0\tag{3.33}$$

e

$$(\tilde{\xi}, \tilde{a})^\dagger = \tilde{a}^\dagger \xi^*\tag{3.34}$$

sendo $\tilde{\xi}$ denota qualquer variável de Grassmann em $\{\xi_\alpha, \xi_\alpha^*\}$ e \tilde{a} é qualquer operador em $\{a_\alpha, a_\alpha^*\}$. Definimos aqui os estados coerentes para férmions por

$$\begin{aligned}|\xi\rangle &= e^{-\sum_\alpha \xi_\alpha a_\alpha^\dagger} |0\rangle \\ &= \prod_\alpha (1 - \xi_\alpha a_\alpha^\dagger) |0\rangle.\end{aligned}\tag{3.35}$$

A combinação $\xi_\alpha a_\alpha^\dagger$ comuta com $\xi_\beta a_\beta^\dagger$ tal que a equação (3.34) reproduz termos não nulos na expansão da exponencial. Apesar dos estados coerentes pertencerem ao estado generalizado do espaço de Fock e não ao espaço dos férmions, o ponto crucial é que qualquer estado físico do espaço dos férmions pode ser escrito em termos dos estados

coerentes. Para um estado único α , relações de anticomutação entre $a_\alpha, a_\alpha^\dagger$ e ξ_α produzem a relação

$$\begin{aligned} a_\alpha (1 - \xi_\alpha a_\alpha^\dagger) |0\rangle &= +\xi_\alpha |0\rangle \\ &= \prod_{\alpha} (1 - \xi_\alpha a_\alpha^\dagger) |0\rangle. \end{aligned} \quad (3.36)$$

Com uso da equação (3.35) e considerando o fato de que a_α e ξ comutam com a combinação $\xi_\beta a_\beta^\dagger$ para $\beta \neq \alpha$, obtêm-se as condições desejadas para os autovalores.

$$\begin{aligned} a_\alpha |\xi\rangle &= a_\alpha \prod_{\beta} (1 - \xi_\beta a_\beta^\dagger) |0\rangle \\ &= \prod_{\alpha \neq \beta} (1 - \xi_\beta a_\beta^\dagger) a_\alpha (1 - \xi_\alpha a_\alpha^\dagger) |0\rangle \\ &= \prod_{\alpha \neq \beta} (1 - \xi_\beta a_\beta^\dagger) \xi_\alpha (1 - \xi_\alpha a_\alpha^\dagger) |0\rangle \\ &= \xi_\alpha \prod_{\alpha \neq \beta} (1 - \xi_\beta a_\beta^\dagger) |0\rangle \\ &= \xi_\alpha |\xi\rangle. \end{aligned} \quad (3.37)$$

De forma semelhante, a adjunta do estado coerente é

$$\langle \xi | = \langle 0 | e^{-\sum_{\alpha} a_{\alpha} \xi_{\alpha}^*} = \langle 0 | e^{\sum_{\alpha} \xi_{\alpha}^* a_{\alpha}} \quad (3.38)$$

e a_α^\dagger atuando no auto-estado $\langle \xi |$ resulta em

$$\langle \xi | a_\alpha^\dagger = \langle \xi | \xi_\alpha^*. \quad (3.39)$$

A relação de completeza na base dos estados coerentes para férmions é definida pela seguinte equação

$$\int \prod_{\alpha} d\xi_{\alpha}^* d\xi_{\alpha} e^{-\sum_{\alpha} \xi_{\alpha}^* \xi_{\alpha}} |\xi\rangle \langle \xi| = 1. \quad (3.40)$$

Se os estados $\langle \psi_i | \xi \rangle$ e $\langle \xi | \psi_i \rangle$ contêm variáveis de Grassmann, suas relações de comutação seguem a seguinte equação:

$$\langle \psi_i | \xi \rangle \langle \xi | \psi_j \rangle = \langle -\xi | \psi_i \rangle \langle \psi_j | \xi \rangle. \quad (3.41)$$

As relações de completeza providenciam uma expressão útil para o traço de qualquer operador, sendo que $\{|n\rangle\}$ define um conjunto completo de estados

$$\begin{aligned}
T_r A &= \sum_n \langle n|A|n\rangle \\
&= \int \prod_\alpha d\xi_\alpha^* d\xi_\alpha e^{-\sum_\alpha \xi_\alpha^* \xi_\alpha} \sum_n \langle n|\xi\rangle \langle \xi|A|n\rangle \\
&= \int \prod_\alpha d\xi_\alpha^* d\xi_\alpha e^{-\sum_\alpha \xi_\alpha^* \xi_\alpha} \langle -\xi|A \sum_n |n\rangle \langle n|\xi\rangle \\
&= \int \prod_\alpha d\xi_\alpha^* d\xi_\alpha e^{-\sum_\alpha \xi_\alpha^* \xi_\alpha} \langle -\xi|A|\xi\rangle.
\end{aligned} \tag{3.42}$$

3.3 Formulação de Integrais Funcionais

Dentro da mecânica estatística quântica, é conveniente introduzir o formalismo fermiônico, ideal na representação de sistemas de muitos corpos. Para tal, algumas definições foram necessárias. No decorrer deste capítulo, procurou-se demonstrar que é possível construir uma base de estados coerentes, que são auto-estados dos operadores de destruição, especificamente para férmions. Dada a não comutatividade dos autovalores na representação fermiônica, se fez necessário a introdução da álgebra de Grassmann, que permite o manuseio com variáveis que anticomutam. Além disso, também se definiu o traço de qualquer operador físico dentro desta base.

Porém, como calcular a função de partição de um hamiltoniano que é formado por operadores que não comutam? Uma forma para tratar com a não comutatividade dos operadores que formam o hamiltoniano é utilizar a formulação das integrais de caminho de Feynman na base dos estados de posição e momento. Para o tratamento com sistemas fermiônicos, contudo, é conveniente introduzir a formulação de integrais funcionais dentro da base dos estados coerentes, em que os operadores do hamiltoniano são expressos em termos dos operadores de criação e destruição. Neste caso, leva-se em consideração o fato de que, como se tratam de férmions, é preciso substituir operadores de criação e destruição por variáveis de Grassmann para tratar com a não comutatividade dos operadores. A seção seguinte tem como objetivo apresentar uma pequena revisão sobre esta formulação.

3.3.1 Integrais de Caminho Fermiônicas

Considere primeiramente a função de partição no ensemble grande canônico

$$Z = T_r e^{-\beta(\hat{H}-\mu\hat{N})} \quad (3.43)$$

sendo $\hat{H} = \hat{H}(a_\alpha^\dagger, a_\alpha)$ um hamiltoniano descrito em segunda quantização, μ o potencial químico e \hat{N} o número de ocupação, definido por $\hat{N} = \sum_\alpha a_\alpha^\dagger a_\alpha$. Utilizando o conceito introduzido na equação (3.42), é possível escrever a função de partição em um formato apropriado no tratamento de muitos corpos

$$Z = \int \prod_\alpha d\phi_\alpha^* d\phi_\alpha e^{-\sum_\alpha \phi_\alpha^* \phi_\alpha} \langle -\phi_\alpha | e^{-\beta(\bar{H}-\mu\bar{N})} | \phi_\alpha \rangle \quad (3.44)$$

onde o sinal de menos no bra $\langle -\phi |$ surge através da regra de anticomutação definida em 3.41.

Agora, são apresentados os passos chave para cálculo da função de partição do hamiltoniano \hat{H} em termos dos operadores que não comutam. Para tanto, é preciso escrever a exponencial da função de partição na forma normal ordenada, o que dentro do formalismo de segunda quantização significa que todos os operadores de criação estão à esquerda dos operadores de destruição

$$\begin{aligned} e^{\frac{i}{\hbar}\epsilon H(a^\dagger, a)} &= : e^{\frac{i}{\hbar}\epsilon H(a^\dagger, a)} : + \sum_{n=0} \left(\frac{-i\epsilon}{\hbar} \right)^{n+2} \frac{H(a^\dagger, a)^{n+2}}{(n+2)!} - \sum_{n=0} \left(\frac{-i\epsilon}{\hbar} \right)^{n+2} \frac{:[H(a^\dagger, a)]^{n+2}:}{(n+2)!} \\ &= : e^{\frac{i}{\hbar}\epsilon H(a^\dagger, a)} : - \left(\frac{\epsilon}{\hbar} \right)^2 \sum_{n=0} \frac{\left(\frac{-i\epsilon}{\hbar} \right)^n}{(n+2)!} [H(a^\dagger, a)^{n+2} - :[H(a^\dagger, a)]^{n+2}:] \\ &= : e^{\frac{i}{\hbar}\epsilon H(a^\dagger, a)} : + O(\epsilon^2) \end{aligned} \quad (3.45)$$

sendo um operador $O(a^\dagger, a)$ definido na forma normal por $:O(a^\dagger, a):$.

Em seguida, o elemento de matriz $\langle -\phi_\alpha | e^{-\beta(\bar{H}-\mu\bar{N})} | \phi_\alpha \rangle$ da equação 3.44 pode ser pensado como um operador evolução temporal, de tal forma que

$$U(\phi_{\alpha,f} T_f; \phi_{\alpha,i} T_i) = \lim_{M \rightarrow 0} \left\langle -\phi_{\alpha,f} \left| e^{-\frac{\epsilon}{\hbar}(\hat{H}-\mu\hat{N})^M} \right| \phi_{\alpha,i} \right\rangle \quad (3.46)$$

a notação abaixo define as extremidades do operador evolução

$$\begin{aligned} \phi_{\alpha,0} &= \phi_{\alpha,i} \\ \phi_{\alpha,M}^* &= \phi_{\alpha,f}^* \end{aligned} \quad (3.47)$$

Como os elementos desse operador evolução não podem ser calculados em intervalos de tempo finitos, foi preciso separar o intervalo de tempo $\tau_f - \tau_i$ do operador evolução da equação 3.46 em M partes infinitesimais de tamanho ϵ através das seguintes condições:

$$\epsilon = \frac{\tau_f - \tau_i}{M} \quad ; \quad \beta = \tau_f - \tau_i. \quad (3.48)$$

Na equação 3.46, o elemento de matriz do operador evolução é calculado entre o estado coerente inicial $|\phi_i\rangle$ tendo a componente $\phi_{\alpha,i}$ e um estado final $\langle\phi_f|$ com componentes $\phi_{\alpha,f}^*$. Sobre o operador evolução temporal, é introduzida $M-1$ vezes a relação de completude definida por

$$1 = \prod_{\alpha} d\phi_{\alpha,k}^* d\phi_{\alpha,k} e^{-\sum_{\alpha} \phi_{\alpha,k}^* \phi_{\alpha,k}} |\phi_{\alpha,k}\rangle \langle\phi_{\alpha,k}|. \quad (3.49)$$

Assim como na equação 3.45, o hamiltoniano $H(a_{\alpha}^{\dagger}, a_{\alpha})$ da equação 3.46 também é escrito na forma normal ordenada:

$$e^{\epsilon H(a^{\dagger}a)} =: e^{\epsilon H(a^{\dagger}a)} : + O(\epsilon^2). \quad (3.50)$$

Com isso, a utilização da forma normal ordenada sobre um operador evolução temporal infinitesimal produz um erro que é da ordem ϵ^2 vezes um número finito, quando os operadores atuam sobre uma função de onda diferenciável e normalizada, tal que no limite de $\epsilon \rightarrow 0$

$$: e^{\epsilon H(a^{\dagger}a)} : + O(\epsilon^2) \simeq: e^{\epsilon H(a^{\dagger}a)} :. \quad (3.51)$$

O próximo passo é calcular os elementos de matriz das exponenciais na forma normal ordenada

$$\begin{aligned} U(\phi_{\alpha,f}^* t_f; \phi_{\alpha,i} t_i) &= \lim_{M \rightarrow \infty} \langle\phi_{\alpha,f}| e^{-\frac{\epsilon}{\hbar}(\hat{H} - \mu\hat{N})^M} |\phi_{\alpha,i}\rangle \quad (3.52) \\ &= \lim_{M \rightarrow \infty} \int \prod_{k=1}^{M-1} \prod_{\alpha} d\phi_{\alpha,k}^* d\phi_{\alpha,k} e^{-\sum_{k=1}^{M-1} \sum_{\alpha} \phi_{\alpha,k}^* \phi_{\alpha,k}} \\ &\times \langle\phi_k| : e^{-\frac{i\epsilon}{\hbar} H(a_{\alpha}^{\dagger}, a_{\alpha})} : + O(\epsilon^2) |\phi_{k-1}\rangle \\ &\simeq \lim_{M \rightarrow \infty} \int \prod_{k=1}^{M-1} \prod_{\alpha} d\phi_{\alpha,k}^* d\phi_{\alpha,k} e^{-\sum_{k=1}^{M-1} \sum_{\alpha} \phi_{\alpha,k}^* \phi_{\alpha,k}} \\ &\times e^{\sum_{k=1}^{M-1} (\sum_{\alpha} \phi_{\alpha,k}^* \phi_{\alpha,k-1} - \frac{i\epsilon}{\hbar} H(\phi_{\alpha,k}^* \phi_{\alpha,k-1}))}. \end{aligned}$$

Em integrais funcionais, é conveniente introduzir uma trajetória $\phi_{\alpha}(t)$ para representar o

conjunto $\{\phi_{\alpha,1}\phi_{\alpha,2}\dots\phi_{\alpha,M}\}$. Assim, é possível introduzir a seguinte notação

$$\phi_{\alpha,k}^* \frac{\phi_{\alpha,k} - \phi_{\alpha,k-1}}{\epsilon} = \phi_{\alpha}^*(t) \frac{\partial}{\partial t} \phi_{\alpha}(t) \quad (3.53)$$

e

$$H(\phi_{\alpha}^k, \phi_{\alpha,k-1}) = H(\phi_{\alpha}^*(t), \phi_{\alpha}(t)) \quad (3.54)$$

esta notação de trajetória e derivada é puramente simbólica. Dentro desta notação, operador pode ser escrito como

$$\begin{aligned} U(\phi_{\alpha,f}^* t_f; \phi_{\alpha,i} t_i) &= \int_{\phi_{\alpha}(t_i)}^{\phi_{\alpha}^*(t_f)} D[\phi_{\alpha}^*(t) \phi_{\alpha}(t)] e^{\sum_{\alpha} \phi_{\alpha}^*(t_f) \phi_{\alpha}(t_f)} \\ &\times e^{\frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} dt [\sum_{\alpha} i \hbar \phi_{\alpha}^*(t) \frac{\partial \phi_{\alpha}}{\partial t}(t) - H(\phi_{\alpha}^*(t), \phi_{\alpha}(t))]} \end{aligned} \quad (3.55)$$

sendo

$$\int_{\phi_{\alpha}(t_i)}^{\phi_{\alpha}^*(t_f)} D[\phi_{\alpha}^*(t) \phi_{\alpha}(t)] = \lim_{M \rightarrow \infty} \int \prod_{k=1}^{M-1} \prod_{\alpha} d\phi_{\alpha,k}^* d\phi_{\alpha,k}. \quad (3.56)$$

Observa-se, na expressão (3.55), que as condições de contorno especificam $\phi_{\alpha,0}$ e $\phi_{\alpha,M}^*$, que não há variáveis $\phi_{\alpha,0}^*$ ou $\phi_{\alpha,M}$, e que todas as variáveis internas conjugadas $\phi_{\alpha,k}^*$ e $\phi_{\alpha,k}$ com índices variando de $k = 1$ até $M - 1$ são integradas. Na notação de trajetória, $\phi_{\alpha}^*(t)$ e $\phi_{\alpha}(t)$ são associados com variáveis deslocadas $\phi_{\alpha,k}^*$ e $\phi_{\alpha,k-1}$, respectivamente, tal que $\phi_{\alpha}^*(t_f)$ e $\phi_{\alpha}(t_i)$ são especificados pelas condições de contorno, mas $\phi_{\alpha}(t_f)$ e $\phi_{\alpha}^*(t_i)$ correspondem a variáveis internas de integração não sujeitas a condições de contorno.

A equivalência do estado coerente interior e exterior nas integrais de caminho é enfatizada rotulando $\phi_{\alpha} = -\phi_{\alpha,M}$. Finalmente, substituindo a equação (3.56) em (3.44), a função de partição resultante é

$$Z = \lim_{M \rightarrow 0} \int \prod_{k=1}^M \prod_{\alpha} d\phi_{\alpha,k}^* d\phi_{\alpha,k} e^{-S(\phi^*, \phi)} \quad (3.57)$$

sendo $S(\phi^*, \phi)$ a ação

$$\begin{aligned} S(\phi^*, \phi) &= \epsilon \sum_{k=2}^M \left[\sum_{\alpha} \phi_{\alpha k}^* \left\{ \frac{\phi_{\alpha,k}^* - \phi_{\alpha,k-1}}{\epsilon} - \mu \phi_{\alpha,k-1} \right\} + H(\phi_{\alpha,k}^*, \phi_{\alpha,k-1}) \right] \\ &+ \epsilon \left[\sum_{\alpha} \phi_{\alpha 1}^* \left\{ \frac{\phi_{\alpha,1}^* - \zeta \phi_{\alpha,M}}{\epsilon} - \mu \zeta \phi_{\alpha,M} \right\} + H(\phi_{\alpha,1}^*, \zeta \phi_{\alpha,M}) \right]. \end{aligned} \quad (3.58)$$

Usando a notação de trajetória, a ação S pode ser reescrita

$$\begin{aligned}
 Z &= \int_{\phi_\alpha(\tau_i)}^{\phi_\alpha^*(\tau_f)} D[\phi_\alpha^*(t)\phi_\alpha(t)] \\
 &\times e^{-\int_0^\beta d\tau [\sum_\alpha \phi_\alpha^*(\tau)(\frac{\partial}{\partial t} - \mu)\phi_\alpha(\tau) + H(\phi_\alpha^*(\tau), \phi_\alpha(\tau))]} .
 \end{aligned} \tag{3.59}$$

Observa-se que a integração sobre variáveis de Grassmann satisfaz condições de contorno antiperiódicas para férmions. A partir desta análise relacionada às integrais de caminho, é possível utilizar este formalismo no cálculo da função de partição para sistemas fermiônicos. Na próxima seção, a aproximação de integrais funcionais é utilizada para tratar com a não comutatividade dos operadores de criação e destruição em sistemas vidro de spin com uma representação fermiônica para as variáveis de spin Ising.

4 *Modelo*

4.1 Introdução

Nesta seção, é introduzida a formulação fermiônica no modelo vidro de spin Ising de alcance infinito, sendo que os operadores de spins são representados pela combinação bilinear de operadores fermiônicos. Além disso, um campo magnético perpendicular aos operadores de spin no eixo z , conhecido como campo transverso, é acrescentado ao modelo. O campo transverso é um mecanismo que “flipa” os spins, permitindo o acesso a transições de fase em $T = 0$, em que ocorrem somente flutuações quânticas. Na formulação fermiônica, os operadores de spin atuam em um espaço com quatro auto-estados por sítio; um ocupado com spin para cima, outro ocupado com spin para baixo, e dois estados não magnéticos, um deles não ocupado e o outro duplamente ocupado. Com base nesta descrição, dois modelos podem ser apresentados nesta formulação. O primeiro, conhecido como modelo $2S$, ou de dois estados, tem um vínculo que descarta os estados não magnéticos, possibilitando a utilização de uma formulação fermiônica para o problema vidro de spin $1/2$, o que permite a comparação com resultados prévios de Theumann, Schmidt e Magalhães (2002). Já no modelo fermiônico $4S$, ou de quatro estados, não há restrição quanto ao número de estados por sítio, e a introdução de um potencial químico, naturalmente descrito em sistemas grande canônicos, permite flutuações de carga no sistema e possibilita observar comportamentos interessantes nas transições de fase. Este capítulo é distribuído da seguinte maneira: na seção seguinte, são apresentados os cálculos analíticos para os modelos $2S$ e $4S$. Na última seção, uma discussão dos resultados e do comportamento das transições de fase são o objeto de estudo.

4.2 Vidro de Spin Fermiônico com Campo Transverso

O modelo de Sherrington e Kirkpatrick (1978) (SK), por possuir uma solução analítica exata, foi largamente utilizado para descrever sistemas vidro de spin. Neste modelo, as variáveis de spin Ising são clássicas, isto é, $S_i = \pm 1$. Por outro lado, a representação fermiônica do modelo SK, além de permitir estudar o problema vidro de spin em presença de flutuações quânticas e de carga, permite também estudar a competição entre o estado vidro de spin e outros acoplamentos entre férmions como, por exemplo, supercondutividade. Nesta formulação, os operadores de spins são escritos como uma combinação bilinear de operadores fermiônicos. Este tipo de formalismo tem como vantagem introduzir uma representação conveniente para estados de muitos corpos. Nessa representação, tem-se o seguinte hamiltoniano:

$$\hat{H} = - \sum_{ij} J_{ij} \hat{S}_i^z \hat{S}_j^z - 2\Gamma \sum_i \hat{S}_i^x. \quad (4.1)$$

Neste caso, \hat{S} é um operador de spin escrito como uma função bilinear de operadores de criação e destruição. Os operadores de spin da equação (4.1) são definidos como:

$$\hat{S}_i^z = \frac{1}{2}[\hat{n}_{i\uparrow} - \hat{n}_{i\downarrow}] \quad ; \quad \hat{S}_i^x = \frac{1}{2}[c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow} + c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\uparrow}] \quad (4.2)$$

sendo $\hat{n}_i = c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}$ o operador número de ocupação, $c_{i\sigma}^\dagger$ ($c_{i\sigma}$) os operadores de criação (destruição), com $\sigma = \uparrow$ ou \downarrow indicando as projeções dos spins e J_{ij} uma variável aleatória com a seguinte distribuição de probabilidade gaussiana:

$$P(J_{ij}) = (N/32\pi J^2)^{1/2} \exp(-N J_{ij}^2/32J^2). \quad (4.3)$$

Na formulação fermiônica, Theumann, Schmidt e Magalhães (2002) apresentaram dois modelos fermiônicos; o modelo conhecido como $4S$, com quatro auto-estados por sítio, e o modelo $2S$, com dois auto-estados por sítio. No modelo de quatro auto-estados, dois deles são não magnéticos. Porém, no modelo conhecido como $2S$, estes auto-estados não magnéticos são descartados com a introdução de um vínculo que fixa o número de ocupação $n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow} = 1$, através de uma integral de vínculo em cada sítio. Nesta seção, os dois modelos são apresentados, mas somente os resultados para o modelo $4S$ são discutidos. Resultados para o modelo $2S$ sem campo transverso são utilizados somente para comparação com resultados clássicos conhecidos. A formulação das integrais de caminho com variáveis de Grassmann, comumente utilizada para descrever sistemas fermiônicos, é

aplicada na solução deste problema. A função de partição no ensemble grande canônico, descrita para o modelo de quatro estados, é definida por

$$Z_{4S} = T_r e^{-\beta(\bar{H} - \mu \bar{N})}. \quad (4.4)$$

Enquanto que o modelo de estados, ou $2S$, por sua vez, tem a seguinte restrição inclusa à função de partição para garantir um número de ocupação médio igual a um por sítio (THEUMANN; SCHMIDT; MAGALHÃES, 2002):

$$Z_{2S} = T_r \left[e^{-\beta \bar{H}} \prod_j \delta(n_{j\uparrow} + n_{j\downarrow} - 1) \right]. \quad (4.5)$$

O vínculo para o modelo $2S$ tem a seguinte representação na forma integral

$$\delta(n_{j\uparrow} + n_{j\downarrow} - 1) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} dx_j e^{ix_j[n_{j\uparrow} + n_{j\downarrow} - 1]}. \quad (4.6)$$

É possível escrever uma função de partição generalizada, escrita na forma de uma integral de caminho fermiônica e que descreve ambos os modelos.

$$Z \{ \mu \} = \int D(\phi * \phi) e^{(\frac{s-2}{2})N\beta\mu} \prod_j \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} dx_j e^{-y_j} e^{A\{\mu\}} \quad (4.7)$$

sendo $A \{ \mu \}$ definido pela seguinte equação:

$$A \{ \mu \} = \int_0^\beta d\tau \left[\sum_{j\sigma} \phi_{j\sigma}^*(\tau) \left(-\frac{\partial}{\partial \tau} + \frac{y_j}{\beta} \right) \phi_{j\sigma}(\tau) - H(\phi_{j\sigma}^*(\tau), \phi_{j\sigma}(\tau)) \right]. \quad (4.8)$$

As variáveis s e y_i foram introduzidas nas equações (4.8) e (4.7) para representar a função de partição generalizada. Para a função de partição no modelo $4S$, que tem dois estados magnéticos ($|\uparrow 0\rangle, |\downarrow 0\rangle$) e dois estados não magnéticos ($|00\rangle, |\downarrow\uparrow\rangle$), escolhe-se $s = 4$ e $y_i = \beta\mu$ de tal forma que o termo $e^{(\frac{s-2}{2})N\beta\mu}$ se cancela com a exponencial do vínculo, reduzindo a função de partição a

$$Z_{4S} \{ \mu \} = \int D(\phi^* \phi) e^{A_{4S}\{\mu\}} \quad (4.9)$$

com

$$A_{4S} \{ \mu \} = \int_0^\beta d\tau \left[\sum_{j\sigma} \phi_{j\sigma}^*(\tau) \left(-\frac{\partial}{\partial \tau} + \mu \right) \phi_{j\sigma}(\tau) - H(\phi_{j\sigma}^*(\tau), \phi_{j\sigma}(\tau)) \right]. \quad (4.10)$$

Na representação do modelo $2S$, que tem dois estados magnéticos ($|\uparrow 0\rangle, |\downarrow 0\rangle$), escolhe-se $s = 2$ e $y_j = ix_j$. Assim, o termo $e^{(\frac{s-2}{2})N\beta\mu}$ se reduz a um, e a função de partição toma

o seguinte formato

$$Z_{2S} \{\mu\} = \int D(\phi * \phi) \prod_j \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} dx_j e^{-x_j} e^{A_{2S}\{\mu\}} \quad (4.11)$$

sendo $A_{2S} \{\mu\}$ definido pela seguinte equação:

$$A_{2S} \{\mu\} = \int_0^\beta d\tau \left[\sum_{j\sigma} \phi_{j\sigma}^*(\tau) \left(-\frac{\partial}{\partial \tau} + \frac{ix_j}{\beta} \right) \phi_{j\sigma}(\tau) - H(\phi_{j\sigma}^*(\tau), \phi_{j\sigma}(\tau)) \right]. \quad (4.12)$$

Na equação (4.8), $H(\phi_{i\sigma}^*(\tau), \phi_{i\sigma}(\tau))$ é definido por

$$H(\phi_{i\sigma}^*(\tau), \phi_{i\sigma}(\tau)) = -\frac{1}{4} \sum_{ij} J_{ij} \sum_{\sigma\sigma'} \sigma\sigma' \phi_{i\sigma}^*(\tau) \phi_{i\sigma}(\tau) \phi_{j\sigma'}^*(\tau) \phi_{j\sigma'}(\tau) - \sum_{j\sigma} \Gamma \phi_{j\sigma}^*(\tau) \phi_{j-\sigma}(\tau). \quad (4.13)$$

A equação (4.8) pode ser separada em duas partes

$$A \{\mu\} = A_\Gamma + A_{SG} \quad (4.14)$$

em que A_Γ representa a componente que contém o termo y_i , o campo transversal e um termo livre

$$A_\Gamma = \int_0^\beta d\tau \sum_{j\sigma} \left[\phi_{j\sigma}^*(\tau) \left(-\frac{\partial}{\partial \tau} + \frac{y_j}{\beta} \right) \phi_{j\sigma}(\tau) + \Gamma \phi_{j\sigma}^*(\tau) \phi_{j-\sigma}(\tau) \right] \quad (4.15)$$

e A_{SG} é a componente responsável pelo surgimento da fase vidro de spin

$$A_{SG} = \frac{1}{4} \sum_{ij} J_{ij} \sum_{\sigma\sigma'} \sigma\sigma' \phi_{i\sigma}^*(\tau) \phi_{i\sigma}(\tau) \phi_{j\sigma'}^*(\tau) \phi_{j\sigma'}(\tau). \quad (4.16)$$

Para problemas que são homogêneos no tempo ou que têm uma função temporal periódica em um intervalo que vai de 0 a β , é conveniente utilizar a transformada de Fourier do espaço τ para o espaço das frequências

$$\phi_{j\sigma}^*(\tau) = \sum_{\omega_n} e^{\frac{i\omega_n \tau}{\beta}} \phi_{j\sigma}(\omega_n) \quad ; \quad \phi_{j\sigma}(\tau) = \sum_{\omega_m} e^{-\frac{i\omega_m \tau}{\beta}} \phi_{j\sigma}(\omega_m). \quad (4.17)$$

Utilizando a transformada de Fourier primeiramente na equação (4.15), A_Γ é reescrito em função das frequências de Matsubara

$$\begin{aligned} A_\Gamma &= \sum_{m,n} \int_0^\beta d\tau \exp \left(\frac{i\omega_m \tau}{\beta} - \frac{i\omega_n \tau}{\beta} \right) \\ &\times \frac{1}{\beta} \sum_{j\sigma} \left[\phi_{j\sigma}^*(\omega_m) (i\omega_n + y_j) \phi_{j\sigma}(\omega_n) + \beta \Gamma \phi_{j\sigma}^*(\omega_m) \phi_{j-\sigma}(\omega_n) \right]. \end{aligned}$$

Da mesma maneira, reescreve-se também A_{SG} em função das frequências de Matsubara

$$A_{SG} = \sum_{pq,rs} \int_0^\beta d\tau \exp\left(\frac{i(\omega_p - \omega_q)\tau}{\beta} - \frac{i(\omega_r - \omega_s)\tau}{\beta}\right) \times \left\{ \frac{1}{4} \sum_{ij} J_{ij} \sum_{\sigma\sigma'} \sigma\sigma' \phi_{i\sigma}^*(\omega_p) \phi_{i\sigma}(\omega_q) \phi_{j\sigma'}^*(\omega_s) \phi_{j\sigma'}(\omega_r) \right\}. \quad (4.18)$$

As frequências de Matsubara são convenientemente reescritas através das seguintes condições:

$$\Omega_\gamma = \omega_p - \omega_q \quad ; \quad \Omega_\nu = \omega_r - \omega_s \quad (4.19)$$

de tal forma que a seguinte expressão é obtida:

$$A_{SG} = \sum_{\gamma q, \nu r} \int_0^\beta d\tau \exp\left(\frac{i\omega_\gamma\tau}{\beta} - \frac{i\omega_\nu\tau}{\beta}\right) \times \left\{ \frac{1}{4} \sum_{ij} J_{ij} \sum_{\sigma\sigma'} \sigma\sigma' \phi_{i\sigma}^*(\Omega_\gamma + \omega_q) \phi_{i\sigma}(\omega_q) \phi_{j\sigma'}^*(\omega_r - \Omega_\nu) \phi_{j\sigma'}(\omega_r) \right\}. \quad (4.20)$$

Com isso, as integrais que surgem nas equações (4.18) e (4.20) são prontamente calculadas com a utilização da seguinte identidade:

$$\int_{-L}^L \exp\left(\frac{n\pi x}{L} - \frac{m\pi x}{L}\right) dx = \begin{cases} 0 & \text{se } m \neq n \\ 2L & \text{se } m = n \end{cases} \quad (4.21)$$

A expressão resultante após a utilização da identidade (4.21) em A_Γ é definida pela equação

$$A_\Gamma = \sum_{j\sigma} \sum_n [\phi_{j\sigma}^*(\omega_n) (i\omega_n + y_j) \phi_{j\sigma}(\omega_n) + \phi_{j\sigma}^*(\omega_n) \beta\Gamma \phi_{j-\sigma}(\omega_n)] \quad (4.22)$$

Finalmente, a expressão (4.22) pode ser escrita em uma representação matricial

$$A_\Gamma = \sum_j \sum_n \begin{bmatrix} \phi_{j\uparrow}^*(\omega_n) & \phi_{j\downarrow}^*(\omega_n) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} i\omega_n + y_j & \beta\Gamma \\ \beta\Gamma & i\omega_n + y_j \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \phi_{j\uparrow}(\omega_n) \\ \phi_{j\downarrow}(\omega_n) \end{bmatrix} \quad (4.23)$$

As matrizes da expressão (4.23) são conhecidas como espinores, e definidas da seguinte forma:

$$\Psi_j^\dagger(\omega_n) = \begin{bmatrix} \phi_{j\uparrow}^*(\omega_n) & \phi_{j\downarrow}^*(\omega_n) \end{bmatrix} \quad ; \quad \Psi_j(\omega_n) = \begin{bmatrix} \phi_{j\uparrow}(\omega_n) \\ \phi_{j\downarrow}(\omega_n) \end{bmatrix} \quad (4.24)$$

Com isso, A_Γ pode ser expressa na seguinte forma compacta:

$$A_\Gamma = \sum_j \sum_n \Psi_j^\dagger(\omega_n) \gamma_j^{-1} \Psi_j(\omega_n) \quad (4.25)$$

As matrizes de Pauli são utilizadas para representar γ_j^{-1} e A_{SG}

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} ; \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} ; \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (4.26)$$

sendo γ_j^{-1} definido por um termo potencial mais uma parte complexa, em que I é a matriz identidade, e uma componente do campo transverso:

$$\gamma_j^{-1} = (i\omega_n + y_j) I + \beta\Gamma\sigma_x \quad (4.27)$$

Da mesma maneira, a expressão para A_{SG} após a integração toma a seguinte forma:

$$A_{SG} = \sum_{ij} \beta J_{ij} \sum_\gamma \frac{1}{2} \sum_{\sigma q} \sigma \phi_{i\sigma}^*(\Omega_\gamma + \omega_q) \phi_{i\sigma}(\omega_q) \frac{1}{2} \sum_{\sigma' r} \sigma' \phi_{j\sigma'}^*(\omega_r - \Omega_\gamma) \phi_{j\sigma'}(\omega_r) \quad (4.28)$$

Introduzindo a seguinte notação para representar a equação (4.28)

$$S_i^z(\Omega_\gamma) = \frac{1}{2} \sum_{\sigma q} \sigma \phi_{i\sigma}^*(\Omega_\gamma + \omega_q) \phi_{i\sigma}(\omega_q) \quad ; \quad S_j^z(-\Omega_\gamma) = \frac{1}{2} \sum_{\sigma' r} \sigma' \phi_{j\sigma'}^*(\omega_r - \Omega_\gamma) \phi_{j\sigma'}(\omega_r) \quad (4.29)$$

A_{SG} assume o seguinte formato, sendo que σ indica a projeção dos spin, $\sigma = \uparrow$ ou \downarrow

$$A_{SG} = \sum_\gamma \sum_{ij} \beta J_{ij} S_i^z(\Omega_\gamma) S_j^z(-\Omega_\gamma) \quad (4.30)$$

As variáveis $S_i^z(\Omega_\gamma)$ e $S_j^z(-\Omega_\gamma)$ também podem ser escritas na forma matricial

$$S_i^z(\Omega_\gamma) = \begin{bmatrix} \phi_{i\uparrow}^*(\Omega_\gamma + \omega_q) & \phi_{i\downarrow}^*(\Omega_\gamma + \omega_q) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \phi_{i\uparrow}(\omega_q) \\ \phi_{i\downarrow}(\omega_q) \end{bmatrix} \quad (4.31)$$

e

$$S_j^z(-\Omega_\gamma) = \begin{bmatrix} \phi_{j\uparrow}^*(\omega_r - \Omega_\gamma) & \phi_{j\downarrow}^*(\omega_r - \Omega_\gamma) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \phi_{j\uparrow}(\omega_r) \\ \phi_{j\downarrow}(\omega_r) \end{bmatrix} \quad (4.32)$$

Com uso da definição de espinores e das matrizes de Pauli, $S_i^z(\Omega_\gamma)$ e $S_j^z(-\Omega_\gamma)$ são escritos na seguinte forma compacta:

$$S_i^z(\Omega) = \frac{1}{2} \sum_q \Psi_i^\dagger(\omega_q + \Omega_\gamma) \sigma_z \Psi_i(\omega_q) \quad S_j^z(-\Omega) = \frac{1}{2} \sum_r \Psi_j^\dagger(\omega_r - \Omega_\gamma) \sigma_z \Psi_j(\omega_r) \quad (4.33)$$

sendo ω e Ω funções periódicas e antiperiódicas definidas por $\omega_m = (2m)\pi$ e $\Omega_n = (2n+1)\pi$, respectivamente. Na aproximação estática, as flutuações no tempo das correlações spin-

spin são desprezadas. Neste caso, o termo Ω_γ é tomado nulo na equação (4.30), o que resulta na obtenção da componente estática da parte vidro de spin

$$A_{SG}^{st} = \sum_{ij} \beta J_{ij} S_i^z(0) S_j^z(0) \quad (4.34)$$

com

$$S_i^z(0) = \frac{1}{2} \sum_q \Psi_i^\dagger(\omega_q) \sigma^z \Psi_i(\omega_q) \quad S_j^z(0) = \frac{1}{2} \sum_r \Psi_j^\dagger(\omega_r) \sigma^z \Psi_j(\omega_r). \quad (4.35)$$

Assim, através do formalismo das variáveis de Grassmann, e utilizando a transformada de Fourier do espaço do tempo imaginário para as frequências, a ação total assume o seguinte formato:

$$A\{\mu\} = \sum_j \sum_n \Psi_j^\dagger(\omega_n) \gamma_j^{-1} \Psi_j(\omega_n) + \sum_{ij} \beta J_{ij} S_i^z(0) S_j^z(0) \quad (4.36)$$

A partir daqui, é possível prosseguir com o procedimento padrão para obtenção da média configuracional da energia livre por sítio usando o formalismo das réplicas.

$$F = -\frac{1}{\beta N} \lim_{n \rightarrow 0} \frac{Z^n - 1}{n} \quad (4.37)$$

De acordo com o formalismo das réplicas, toma-se a média configuracional da n-ésima potência da função de partição

$$Z(n) = \int \prod_{ij} P(J_{ij}) dJ_{ij} \int \prod_\alpha D(\phi_\alpha^\dagger \phi_\alpha) e^{(\frac{s-2}{2})N\beta\mu_\alpha} \prod_j \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} dx_{j\alpha} e^{-y_{j\alpha}} e^{A_\alpha\{\mu\}} \quad (4.38)$$

com

$$A_\alpha\{\mu\} = \sum_{\alpha j} \sum_n \Psi_{\alpha j}^\dagger(\omega_n) \gamma_j^{-1} \Psi_{\alpha j}(\omega_n) + \sum_\alpha \sum_{ij} \beta J_{ij} S_{\alpha i}^z(0) S_{\alpha j}^z(0) \quad (4.39)$$

sendo $\alpha = 1 \dots n$ o índice de réplicas. A integral sobre J_{ij} pode ser calculada independentemente para cada par (ij) utilizando a distribuição de probabilidade na equação (4.3), e resulta em

$$\begin{aligned} Z(n) &= \int \prod_\alpha D(\phi_\alpha^\dagger \phi_\alpha) e^{(\frac{s-2}{2})N\beta\mu_\alpha} \prod_j \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} dx_{j\alpha} e^{-y_{j\alpha}} \\ &\times \exp \left[\sum_{\alpha j} \sum_n \Psi_{\alpha j}^\dagger(\omega_n) \gamma_j^{-1} \Psi_{\alpha j}(\omega_n) + \frac{8\beta^2 J^2}{N} \sum_{(ij)} \left(\sum_\alpha S_{i\alpha}^z S_{j\alpha}^z \right)^2 \right] \end{aligned} \quad (4.40)$$

em que se configura $S_{j\alpha}^z(0) = S_{j\alpha}^z$ para forma de simplicidade. São explicitados os termos $\alpha = \beta$ e $\alpha \neq \beta$ do termo quadrático do expoente

$$\sum_{(ij)} \left(\sum_\alpha S_{i\alpha}^z S_{j\alpha}^z \right)^2 = \sum_\alpha \sum_{(ij)} (S_{i\alpha}^z)^2 (S_{j\alpha}^z)^2 + 2 \sum_{(\alpha\beta)} \sum_{(ij)} S_{i\alpha}^z S_{i\beta}^z S_{j\alpha}^z S_{j\beta}^z \quad (4.41)$$

Os índices (ij) e $(\alpha\beta)$ indicam as somas com $i \neq j$ e $\alpha \neq \beta$, respectivamente. Com o intuito de facilitar a resolução do problema, as somas sobre (ij) são reescritas, o que resulta na redução da soma sobre dois sítios para a soma sobre apenas um sítio

$$\begin{aligned} \sum_{(ij)} (S_{i\alpha}^z)^2 (S_{j\alpha}^z)^2 &= \left[\left(\sum_j (S_{j\alpha}^z)^2 \right)^2 - \sum_j ((S_{j\alpha}^z)^2)^2 \right] \\ \sum_{(ij)} S_{i\alpha}^z S_{j\beta}^z S_{i\alpha}^z S_{j\beta}^z &= \left[\left(\sum_j S_{j\alpha}^z S_{j\beta}^z \right)^2 - \sum_j (S_{j\alpha}^z S_{j\beta}^z)^2 \right] \end{aligned} \quad (4.42)$$

sendo que os termos quadráticos $\left(\sum_j (S_{j\alpha}^z)^2 \right)^2$ e $\left(\sum_j S_{j\alpha}^z S_{j\beta}^z \right)^2$ dominam no limite de $N \rightarrow \infty$. Dessa forma, pode-se desprezar os termos lineares em N tal que

$$\sum_{(ij)} (S_{i\alpha}^z)^2 (S_{j\alpha}^z)^2 \simeq \left[\left(\sum_j (S_{j\alpha}^z)^2 \right)^2 \right] ; \quad \sum_{(ij)} S_{i\alpha}^z S_{j\beta}^z S_{i\alpha}^z S_{j\beta}^z \simeq \left[\left(\sum_j S_{j\alpha}^z S_{j\beta}^z \right)^2 \right] \quad (4.43)$$

A função de partição toma a seguinte forma

$$\begin{aligned} Z(n) &= \int \prod_{\alpha} D(\phi_{\alpha}^{\dagger} \phi_{\alpha}) e^{(\frac{s-2}{2})N\beta\mu_{\alpha}} \prod_j \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} dx_{j\alpha} e^{-y_{j\alpha}} \\ &\times \exp \left[\sum_{\alpha j} A_{\alpha j}^0 + \frac{8\beta^2 J^2}{N} \sum_{\alpha} \left(\sum_j (S_{j\alpha}^z)^2 \right)^2 + \frac{16\beta^2 J^2}{N} \sum_{(\alpha\beta)} \left(\sum_j S_{j\alpha}^z S_{j\beta}^z \right)^2 \right] \end{aligned} \quad (4.44)$$

com

$$A_{\alpha j}^0 = \sum_n \Psi_{j\alpha}^{\dagger}(\omega_n) \gamma_j^{-1} \Psi_{j\alpha}(\omega_n). \quad (4.45)$$

A redução da soma sobre dois sítios para a soma sobre um sítio na equação (4.44) trouxe como consequência a introdução de termos quadráticos à função de partição. Para resolver este problema, é utilizada a transformação de Hubbard-Stratonovich,

$$\exp \left(\frac{a^2}{2} \right) = \sqrt{\frac{1}{2\pi}} \int dx \exp \left[-\frac{x^2}{2} + xa \right] \quad (4.46)$$

Utilizando a identidade (4.46) para reescrever os termos quadráticos da função de partição da equação (4.44), as seguintes expressões são obtidas:

$$e^{\frac{8(\beta J)^2}{N} \sum_{\alpha} (\sum_j (S_{j\alpha}^z)^2)^2} = \sqrt{\frac{N(\beta J)^2}{2\pi}} \int \prod_{\alpha} dq_{\alpha} e^{[-\frac{N(\beta J)^2}{2} \sum_{\alpha} q_{\alpha}^2 + 4(\beta J)^2 \sum_{j\alpha} q_{\alpha} (S_{j\alpha}^z)^2]} \quad (4.47)$$

e

$$e^{\frac{16(\beta J)^2}{N} \sum_{\alpha\beta} (\sum_j S_{j\alpha}^z S_{j\beta}^z)^2} = \sqrt{\frac{N(\beta J)^2/2}{2\pi}} \int \prod_{(\alpha\beta)} dq_{\alpha\beta} e^{[-N(\beta J)^2 \sum_{(\alpha\beta)} q_{\alpha\beta}^2 + 8(\beta J)^2 \sum_{j\alpha\beta} q_{\alpha\beta} S_{j\alpha}^z S_{j\beta}^z]}. \quad (4.48)$$

A partir da identidade (4.46), os campos auxiliares q_α e $q_{\alpha\beta}$ são introduzidos, e a função de partição toma a seguinte forma:

$$Z(n) = (\beta J)^2 \frac{N/\sqrt{2}}{2\pi} \int \prod_\alpha dq_\alpha \int \prod_{(\alpha\beta)} dq_{\alpha\beta} \times \exp \left\{ N \left[-(\beta J)^2 \left(\sum_{(\alpha\beta)} q_{\alpha\beta}^2 + \frac{1}{2} \sum_\alpha q_\alpha^2 \right) + \ln \Lambda_\alpha \right] \right\} \quad (4.49)$$

com

$$\Lambda_\alpha = \int \prod_\alpha D(\phi_\alpha^\dagger \phi_\alpha) e^{(\frac{s-2}{2})\beta\mu_\alpha} \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} dx_\alpha e^{-y_\alpha} \times \exp \left\{ \sum_\alpha A_\alpha^0 + 4(\beta J)^2 \left(\sum_\alpha q_\alpha (S_\alpha^z)^2 + 2 \sum_{(\alpha\beta)} q_{\alpha\beta} S_\alpha^z S_\beta^z \right) \right\}. \quad (4.50)$$

sendo as somas sobre j explicitadas. O surgimento do parâmetro q_α levanta uma importante questão. No modelo de Sherrington e Kirkpatrick (1978), $S^2 = 1$, de tal forma que elementos diagonais da matriz das réplicas são unitários. Todavia, no modelo fermiônico, o surgimento de um novo parâmetro se deve justamente ao fato de que os termos que compõem essa diagonal agora são escritos em termos de operadores.

As integrais em (4.49) podem ser avaliadas pelo método “steepest descent”, de maneira que os parâmetros q_α e $q_{\alpha\beta}$ são escolhidos de forma a extremizar o argumento da exponencial em Λ_α na equação (4.49). Logo,

$$q_\alpha = \frac{1}{(\beta J)^2} \frac{\partial}{\partial q_\alpha} \ln \Lambda_\alpha = 4 \langle (S_\alpha^z)^2 \rangle \quad ; \quad q_{\alpha\beta} = \frac{1}{2(\beta J)^2} \frac{\partial}{\partial q_{\alpha\beta}} \ln \Lambda_\alpha = 4 \langle S_\alpha^z S_\beta^z \rangle \quad (4.51)$$

Assumindo a solução com simetria de réplicas

$$q_\alpha = 4 \langle (S_\alpha^z)^2 \rangle = \bar{q} \quad (4.52)$$

$$q_{\alpha\beta} = 4 \langle S_\alpha^z S_\beta^z \rangle = q$$

sobre as somas α e $(\alpha\beta)$, e considerando que a soma $(\alpha\beta)$ na equação (4.50) pode ser reduzida para uma soma sobre uma única réplica

$$\sum_{\alpha\beta} q_{\alpha\beta} S_\alpha^z S_\beta^z = \frac{1}{2} q \left[(\sum_\alpha S_\alpha^z)^2 - \sum_\alpha (S_\alpha^z)^2 \right] \quad ; \quad \sum_\alpha q_\alpha (S_\alpha^z)^2 = \bar{q} \sum_\alpha (S_\alpha^z)^2 \quad (4.53)$$

é obtida a seguinte forma para Λ_α :

$$\begin{aligned} \Lambda_\alpha &= \int \prod_\alpha D(\phi_\alpha^\dagger \phi_\alpha) e^{(\frac{s-2}{2})\beta\mu_\alpha} \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} dx_\alpha e^{-y_\alpha} \\ &\times \exp \left\{ \sum_\alpha A_\alpha^0 + 4(\beta J)^2(\bar{q} - q) \sum_\alpha (S_\alpha^z)^2 + 4(\beta J)^2 q \left(\sum_\alpha S_\alpha^z \right)^2 \right\}. \end{aligned} \quad (4.54)$$

Após este procedimento, ainda persistem termos quadráticos em (4.50). Novamente, o auxílio da identidade de Hubbard-Stratonovich é requerida. As somas sobre α com a linearização resultam em

$$e^{4(\beta J)^2(\bar{q}-q) \sum_\alpha (S_\alpha^z)^2} = \sqrt{\frac{1}{2\pi}} \int \prod_\alpha d\xi_\alpha e^{\sum_\alpha \left[-\frac{\xi_\alpha^2}{2} + 2\beta J \sqrt{2(\bar{q}-q)} \xi_\alpha S_\alpha^z \right]} \quad (4.55)$$

$$e^{4(\beta J)^2 q (\sum_\alpha S_\alpha^z)^2} = \sqrt{\frac{1}{2\pi}} \int dz e^{\left[-\frac{z^2}{2} + 2\beta J \sqrt{2q} z \sum_\alpha S_\alpha^z \right]} \quad (4.56)$$

o que resulta na seguinte equação para Λ_α :

$$\begin{aligned} \Lambda_\alpha &= e^{(\frac{s-2}{2})\beta\mu_\alpha} \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} dx_\alpha e^{-y_\alpha} \int \frac{dz}{2\pi} e^{-\frac{z^2}{2}} \prod_\alpha \int \frac{d\xi_\alpha}{2\pi} e^{-\frac{\xi_\alpha^2}{2}} \int D(\phi_\alpha^\dagger \phi_\alpha) \\ &\times \exp \left\{ \sum_\alpha \left[A_\alpha^0 + 2\beta J \sqrt{2(\bar{q}-q)} \xi_\alpha (S_\alpha^z) + 2\beta J \sqrt{2q} z S_\alpha^z \right] \right\}. \end{aligned} \quad (4.57)$$

Introduzindo uma notação compacta para as integrais

$$\int \frac{dz}{2\pi} e^{-\frac{z^2}{2}} = \int Dz \quad ; \quad \int \frac{d\xi_\alpha}{2\pi} e^{-\frac{\xi_\alpha^2}{2}} = \int D\xi_\alpha. \quad (4.58)$$

Lembrando que S_α^z é definido na equação (4.35), Λ_α toma a seguinte forma:

$$\Lambda_\alpha = \int Dz \int D\xi_\alpha \prod_\alpha e^{(\frac{s-2}{2})\beta\mu_\alpha} \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} dx_\alpha e^{-y_\alpha} I_\alpha(z, \xi_\alpha, q, \bar{q}) \quad (4.59)$$

sendo

$$I_\alpha(z, \xi_\alpha, q, \bar{q}) = \int D(\phi_\alpha^\dagger \phi_\alpha) \exp \left\{ \sum_\alpha \sum_n \Psi_\alpha^\dagger(\omega_n) G_{n\alpha}^{-1} \Psi_\alpha(\omega_n) \right\} \quad (4.60)$$

$G_{n\alpha}^{-1}$ é o elemento de matriz definido por

$$G_{n\alpha}^{-1} = \gamma_n^{-1} + (\beta J \sqrt{2q} z + \beta J \sqrt{2(\bar{q}-q)} \xi_\alpha) \sigma^z \quad (4.61)$$

e

$$\gamma_n^{-1} = (i\omega_n + y) I + \beta \Gamma \sigma^x. \quad (4.62)$$

A simetria de réplicas assegura que

$$\Lambda_\alpha = \int Dz \left\{ \int D\xi e^{(\frac{s-2}{2})\beta\mu} \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} dx e^{-y} I(z, \xi, q, \bar{q}) \right\}^n \quad (4.63)$$

de tal forma que as somas sobre α são realizadas.

Com uso das propriedades da álgebra de Grassmann, é possível reescrever a equação (4.63) com auxílio da seguinte identidade:

$$\int \sum_{i=1}^n d\xi_i^* d\xi_i e^{-\sum_i g_i \xi_i^* \xi_i} = \det G \quad (4.64)$$

logo,

$$I(z, \xi, q, \bar{q}) = \int D(\phi^\dagger \phi) \exp \left\{ \sum_n \Psi^\dagger(\omega_n) G_n^{-1} \Psi(\omega_n) \right\} = \prod_n \det(\gamma_n^{-1} + h(z, \xi, q, \bar{q}) \sigma^z) \quad (4.65)$$

com $h(z, \xi, q, \bar{q})$ definido por

$$h(z, \xi, q, \bar{q}) = \beta J \sqrt{2qz} + \beta J \sqrt{2(\bar{q} - q)} \xi. \quad (4.66)$$

A função $I(z, \xi, q, \bar{q})$ pode ser reescrita

$$I(z, \xi, q, \bar{q}) = \prod_{n=-\infty}^{\infty} \left[i\omega_n + y + \sqrt{\Delta} \right] \left[i\omega_n + y - \sqrt{\Delta} \right] \quad (4.67)$$

sendo Δ

$$\Delta = h^2(z, \xi, q, \bar{q}) + (\beta\Gamma)^2. \quad (4.68)$$

A soma sobre as frequências de Matsubara na equação (4.67) é feita no apêndice 3. Com isso, $I(z, \xi, q, \bar{q})$ se reduz a

$$I(z, \xi, q, \bar{q}) = 2e^y \left[\cosh(y) + \cosh(\sqrt{\Delta(z, \xi, q, \bar{q})}) \right] \quad (4.69)$$

onde $\Delta(z, \xi, q, \bar{q})$ é definido por

$$\Delta(z, \xi, q, \bar{q}) = h^2 + (\beta\Gamma)^2 \quad (4.70)$$

com h definido por

$$h = \beta J \sqrt{2qz} + \beta J \sqrt{2(\bar{q} - q)} \xi. \quad (4.71)$$

Substituindo a equação (4.69) em (4.63), Λ_α assume a seguinte forma:

$$\Lambda_\alpha = \int Dz \left\{ \int D\xi 2e^{\frac{s-2}{2}\beta\mu} \left[\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} dx \cosh(y) + \cosh \sqrt{\Delta(z, \xi, q, \bar{q})} \right] \right\}^n \quad (4.72)$$

em que

$$\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} dx \cosh(y) = \begin{cases} 0 & \text{se } y = ix \\ \cosh(\beta\mu) & \text{se } y = \beta\mu \end{cases} \quad (4.73)$$

Assim, ao tomar o limite das réplicas $n \rightarrow 0$, é obtida a equação (4.74). Lembrando que, ao assumir $s = 2$, o modelo de dois estados é representado. Quando $s = 4$ é escolhido, o modelo de quatro estados é representado. Desta forma, o grande potencial termodinâmico generalizado pode ser escrito por

$$\begin{aligned} \Omega &= \frac{\beta J^2}{2} [\bar{q}^2 - q^2] + \frac{(s-2)}{2} \mu - \frac{1}{\beta} \ln 2 \\ &- \frac{1}{\beta} \int Dz \ln \left[\frac{(s-2)}{2} \cosh(\beta\mu) + \int D\xi \cosh(\sqrt{\Delta(z, \xi, q, \bar{q})}) \right]. \end{aligned} \quad (4.74)$$

Os parâmetros de ordem são obtidos através da condição de extremização do potencial termodinâmico. Logo, as equações ponto de sela resultam em

$$q = \int Dz \left[\frac{\int D\xi \sinh(\sqrt{\Delta(z, \xi, q, \bar{q})})}{\frac{(s-2)}{2} \cosh(\beta\mu) + \int D\xi \cosh(\sqrt{\Delta(z, \xi, q, \bar{q})})} \right]^2 \quad (4.75)$$

e

$$\bar{q} = \int Dz \left[\frac{\int D\xi \cosh(\sqrt{\Delta(z, \xi, q, \bar{q})})}{\frac{(s-2)}{2} \cosh(\beta\mu) + \int D\xi \cosh(\sqrt{\Delta(z, \xi, q, \bar{q})})} \right] \quad (4.76)$$

sendo

$$\int Dz = \int \frac{dz}{\sqrt{2\pi}} e^{-z^2/2} \quad ; \quad \int D\xi = \int \frac{d\xi}{\sqrt{2\pi}} e^{-\xi^2/2}. \quad (4.77)$$

A partir da equação $S/K = \beta^2 \frac{\partial \Omega}{\partial \beta}$, a entropia também é derivada. Já observada em modelos clássicos (SHERRINGTON; KIRKPATRICK, 1978), a entropia na solução com simetria de réplicas do modelo fermiônico também apresenta valores negativos para baixas temperaturas, indicando um problema sério no uso desta aproximação. Porém, questões relacionadas à solução com simetria de réplicas não são discutidas aqui, pois são o tema principal do capítulo seguinte que trata da estabilidade da solução com simetria de réplicas.

$$\begin{aligned} \frac{S}{k} &= -\frac{3}{2}\beta^2 J^2 (\bar{q}^2 - q^2) - \beta \int Dz \frac{\sinh(\beta\mu)}{K(z, \xi, q, \bar{q})} \mu \\ &- (\beta\Gamma)^2 \int Dz \frac{1}{K(z, \xi, q, \bar{q})} \int D\xi \frac{\sinh \sqrt{\Delta(z, \xi, q, \bar{q})}}{\sqrt{\Delta(z, \xi, q, \bar{q})}} + \int \ln [2K(z, \xi, q, \bar{q})] \end{aligned} \quad (4.78)$$

sendo $K(z, \xi, q, \bar{q})$ definido por

$$K(z, \xi, q, \bar{q}) = \frac{(s-2)}{2} \cosh(\beta\mu) + \int D\xi \cosh(\sqrt{\Delta(z, \xi, q, \bar{q})}). \quad (4.79)$$

4.3 Resultados

A seção anterior serviu de ponto de partida para a introdução de dois modelos fermiônicos que descrevem a competição entre as fases paramagnética e vidro de spin. Enquanto que o modelo $2S$ possui uma restrição quanto ao número de ocupação por sítio, o modelo $4S$ possibilita a introdução de flutuações de carga através do potencial químico. Em ambos os casos, porém, a presença de um campo magnético transversal é responsável pela introdução de flutuações de natureza quântica. É importante salientar que, em altas temperaturas, os momentos magnéticos são predominantemente governados através de flutuações térmicas, e flutuações de natureza quântica podem ser desprezadas. Entretanto, próximo a $T = 0$, flutuações quânticas passam a ser relevantes. Dentro deste contexto, o campo transversal desempenha o papel de mecanismo de “flipagem” dos spins a baixas temperaturas. Eventualmente pode levar a temperatura de transição T_f a um ponto crítico quântico, em que a transição de fase se dá à temperatura nula.

A partir da condição de extremização do potencial termodinâmico, são obtidas as equações para os parâmetros de ordem q e \bar{q} . Em seguida, com o uso de métodos numéricos, as soluções destas equações são encontradas, tornando possível descrever, através de diagramas de fase, a competição entre as fases paramagnética e vidro de spin. Como o objetivo principal é estudar o comportamento das transições de fase com a introdução de flutuações quânticas e de carga, somente são apresentados os resultados para o modelo $4S$, já que a utilização do modelo $2S$ sem campo transversal, neste caso, serve apenas como base de comparação com resultados clássicos já conhecidos.

4.3.1 Resultados com Potencial Químico Fixo

Nesta seção, são apresentados os diagramas de fase T/J versus Γ/J , sendo T a temperatura, Γ o campo transverso e J^2 a variância da variável J_{ij} , para um determinado valor de potencial químico μ/J fixo. Além disso, é apresentado também em detalhes o comportamento do parâmetro de ordem q como função do campo transverso Γ .

Resultados conhecidos e demonstrados por Theumann, Schmidt e Magalhães (2002) mostram que, à medida que Γ/J aumenta, a temperatura de transição, denotada por T_f , diminui, demonstrando a existência de um ponto conhecido como ponto crítico quântico, que pode ser determinado analiticamente resultando no valor crítico $\Gamma_c = 2\sqrt{2}J$ (ver Theumann, Schmidt e Magalhães (2002)), a partir do qual as transições de fase são governadas somente por efeitos quânticos.

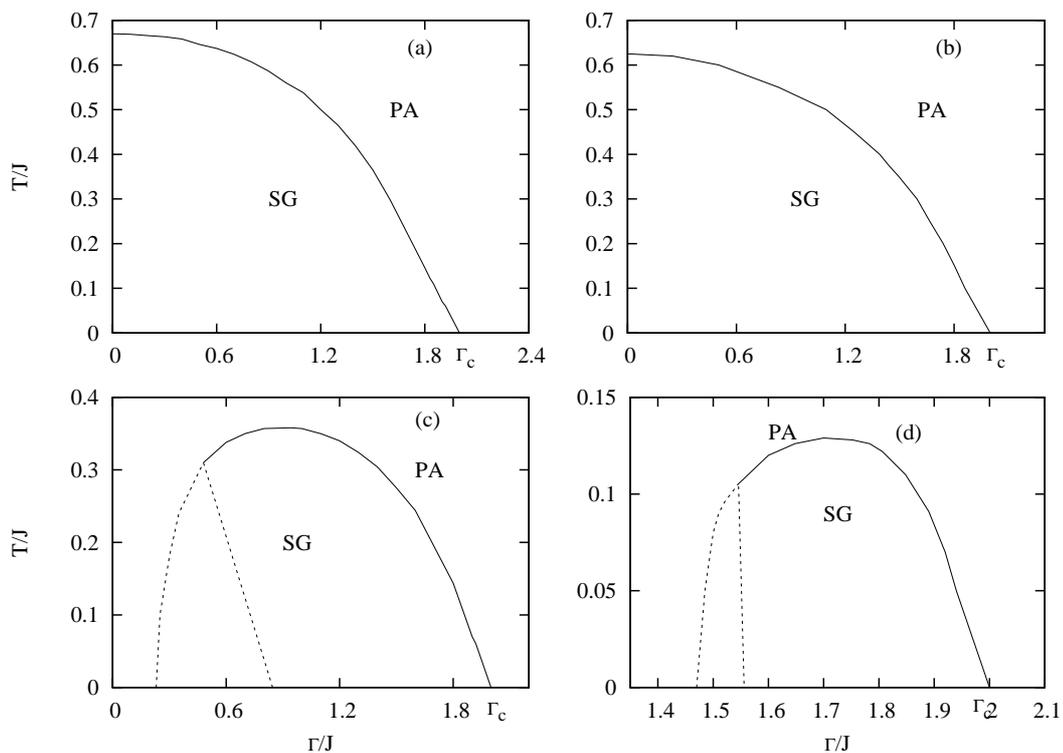


Figura 8: Diagrama de fase Γ/J x T/J para diversos valores de potencial químico: (a) $\mu/J = 0$, (b) $\mu/J = 0.5$, (c) $\mu/J = 1.0$ e (d) $\mu/J = 1.5$. A linha de transição próxima a $\Gamma_c/J = 0$ é extrapolada. Para $q = 0$, a fase é paramagnética e para $q \neq 0$ a fase é vidro de spin. O parâmetro \bar{q} pode ser não nulo em ambas as fases. As figuras (a) e (b) indicam uma transição de segunda ordem entre as fases paramagnética e vidro de spin. As figuras (c) e (d) indicam transições de primeira ordem (definidas pelas linhas pontilhadas) em baixas temperaturas.

Os diagramas de fase T/J versus Γ/J para diversos valores de μ/J fixo são apresentados na figura 8. É importante salientar que, em todos resultados numéricos, assume-se

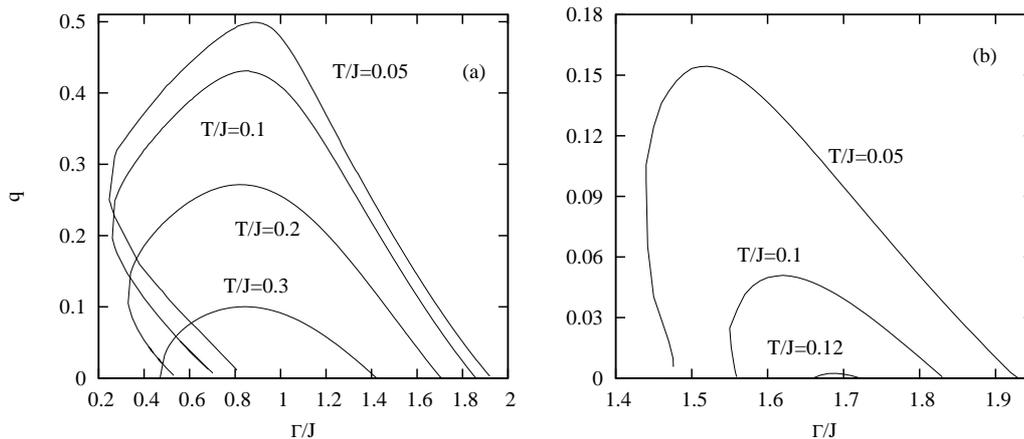


Figura 9: Parâmetro de ordem q versus Γ/J para diversos valores de potencial químico e temperatura: (a) $\mu/J = 1.0$ e (b) $\mu/J = 1.5$. Observa-se nas figuras (a) e (b) que para um determinado intervalo de Γ/J , ocorrem múltiplas soluções vidro de spin em algumas temperaturas específicas. Neste intervalo, um determinado valor de Γ/J apresenta duas soluções vidro de spin distintas.

que $J = 1/\sqrt{2}$, o que garante a comparação, com ajuda do mapeamento da equação (2.36), dos resultados obtidos no modelo $4S$ sem campo transverso, e aqueles apresentados por Costa, Yokoi e Salinas (1994). Na figura 8(a), para $\mu/J = 0$, a linha sólida indica uma transição de segunda ordem separando as fases paramagnética e vidro de spin. Observa-se que, conforme o campo transverso aumenta, a correspondente temperatura de transição de fase T_f diminui, resultado que concorda com o trabalho prévio de Theumann, Schmidt e Magalhães (2002), desde que o mecanismo de “flipagem” é desfavorável ao ordenamento dos spins. Além disso, os resultados obtidos para o ponto crítico quântico Γ_c correspondem ao valor $\Gamma_c = 2\sqrt{2}J$ definido anteriormente. Na figura 8(b), para $\mu/J = 0.5$, observa-se também a dependência da temperatura crítica com o potencial químico, já que $(T_f)_{\mu/J \neq 0} < (T_f)_{\mu/J = 0}$ em $\Gamma/J = 0$. Porém, mesmo com $\mu/J \neq 0$, o valor do ponto crítico quântico (PCQ) permanece inalterado. Contudo, como é observado nas figuras 8(c), para $\mu/J = 1$ e 8(d), para $\mu/J = 1.5$, além das usuais transições de segunda ordem, o aumento do potencial químico demonstra a existência de uma região de primeira ordem, caracterizada pela presença de múltiplas soluções dos parâmetros de ordem na região entre as duas linhas pontilhadas.

As múltiplas soluções podem ser observadas em mais detalhe na figura 9, em que o parâmetro q é mostrado em função de Γ/J para dois valores fixos de μ/J . Para $\mu/J = 1$, as temperaturas escolhidas mostram claramente a existência de mais de uma solução do parâmetro q em um determinado intervalo de Γ/J . Para $T > 0.3$, somente existe uma única solução para q . Para $\mu/J = 1.5$, a temperatura na qual um determinado intervalo

de Γ/J começa a apresentar mais de uma solução para parâmetro q diminui em relação a $\mu/J = 1$, assumindo um valor em torno de $T/J \simeq 0.11$.

As regiões de primeira ordem nos diagramas 8(c) e 8(d) foram demarcadas, sem precisão, através da solução numérica encontrada para os parâmetros de ordem. No entanto, a utilização somente deste procedimento não garante a exata localização do ponto que separa as transições de primeira e segunda ordem. As regiões de primeira ordem e a localização do ponto que separa as regiões de primeira e segunda ordem foram primeiramente demonstradas para modelo fermiônico no ensemble grande canônico por Rosenow e Oppermann (1996). No presente trabalho, a localização exata deste ponto devotará atenção especial do próximo capítulo.

4.3.2 Resultados para um Campo Transverso Fixo

Nesta seção, são discutidos o comportamento dos parâmetro de ordem q , o grande potencial termodinâmico Ω e a entropia S como uma função de μ/J para diversos valores de Γ/J e T/J fixos. Em seguida, os diagramas de fase T/J versus μ/J para diversos valores de Γ/J fixo definindo as linhas de transição entre a fase vidro de spin e paramagnética serão analisados, em especial na região de primeira ordem.

Já observado anteriormente na figura 8, transições de primeira ordem apresentam a seguinte característica: o surgimento de múltiplas soluções dos parâmetros de ordem. Uma das dificuldades envolvidas durante o cálculo numérico das equações dos parâmetros de ordem em regiões de primeira ordem é a possível perda de alguma solução importante, o que nos leva a alguns comentários acerca desta afirmação. Costa, Yokoi e Salinas (1994), quando estudaram o modelo clássico de Ghatak e Sherrington, que também apresenta regiões de primeira ordem, contornaram o problema da obtenção das múltiplas soluções através do uso de um parâmetro auxiliar x^* , como mostram as equações (2.27) e (2.28) do capítulo dois. Neste modelo, as equações para os parâmetros de ordem q e p foram reescritas em termos da variável x^* . Este processo reduziu o problema de duas equações não lineares acopladas

$$\begin{aligned} q &= q(T, p) \\ p &= p(T, q) \end{aligned} \tag{4.80}$$

ao problema de uma equação, já que a equação para o parâmetro de ordem q não possui mais dependência em p

$$q = q(T, x^*) \tag{4.81}$$

como este é um problema de uma variável, neste caso q , não é difícil assegurar que há uma

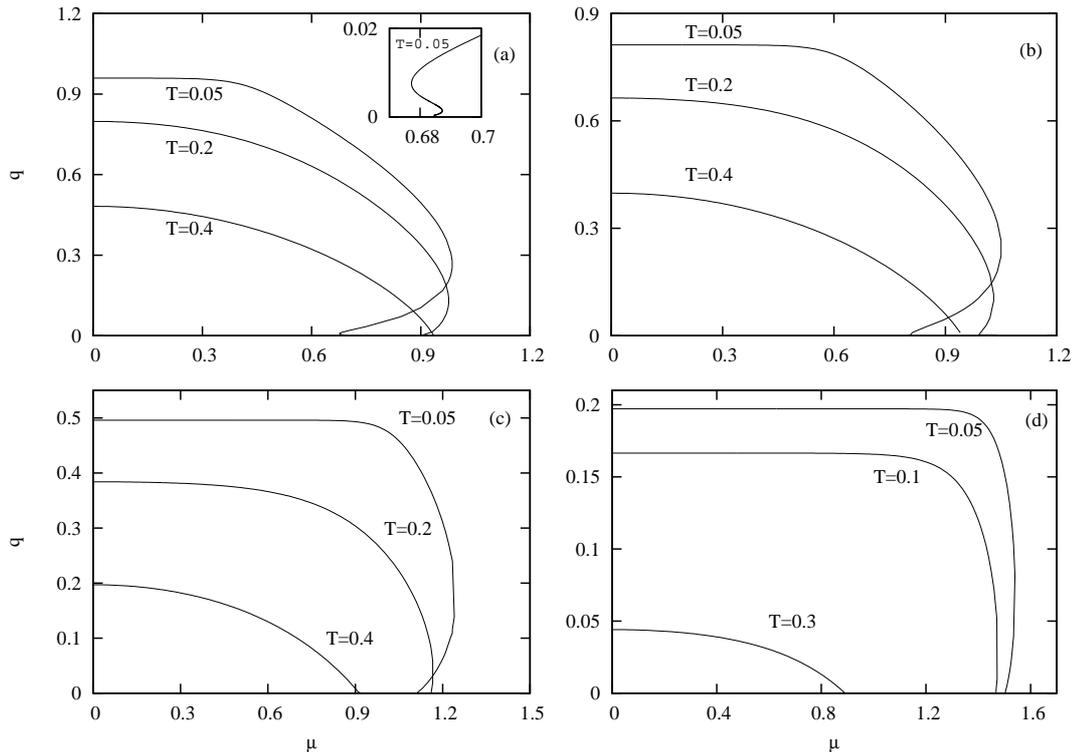


Figura 10: Parâmetro de ordem q pelo potencial químico para diversos valores de temperatura e Γ/J : (a) $\Gamma/J = 0$, (b) $\Gamma/J = 0.5$, (c) $\Gamma/J = 1.0$ e (d) $\Gamma/J = 1.5$. Para um determinado intervalo de μ/J , surgem múltiplas soluções vidro de spin em algumas temperaturas específicas. Este levantamento de múltiplas soluções é útil na escolha da solução estável. O detalhe em (a) representa um aumento na região de múltiplas soluções com $\Gamma/J = 0$.

única raiz positiva para um dado T e x^* . Substituindo o resultado obtido do parâmetro q na equação do parâmetro de ordem p , o valor do parâmetro p é determinado

$$p = p(T, x^*). \quad (4.82)$$

Este procedimento leva à obtenção de todas as soluções para ambos os parâmetros q e p , sendo que as múltiplas soluções para o parâmetro q são mostradas na figura 6(a) do capítulo dois.

No modelo fermiônico com campo transverso, a situação é mais complicada. A utilização do método introduzido por Costa, Yokoi e Salinas (1994) para o levantamento de todas as soluções disponíveis é incompatível com introdução do campo transverso na fase vidro de spin, já que sua introdução não possibilita a resolução analítica de uma das duas integrais apresentadas nas equações para os parâmetros q e \bar{q} , sendo \bar{q} equivalente ao p do modelo GS, no lugar de uma única integral encontrada nas equações para os parâmetros q e p do modelo clássico de Ghatak e Sherrington (1977) (GS), o que impossibilita escrever

uma variável x^* que reduza o problema a uma única equação.

Diante da impossibilidade da utilização do método de levantamento de múltiplas soluções introduzido por Costa, Yokoi e Salinas (1994) para o modelo fermiônico com campo transverso na fase vidro spin, uma outra alternativa foi utilizada. O levantamento das múltiplas soluções das equações dos extremos (4.75) e (4.76) neste presente trabalho em regiões de primeira ordem é feito através das etapas descritas a seguir. Como procedimento inicial, as equações para os parâmetros de ordem q e \bar{q} são resolvidas numericamente através do método de Newton. Dentro do método de Newton, é feita uma escolha de solução inicial para ambos os parâmetros q e \bar{q} , já que estas são equações acopladas, como observa-se na equação (4.80). Em uma região de segunda ordem, o método converge para uma única solução final dos parâmetros q e \bar{q} , independente da solução inicial escolhida. Em regiões de primeira ordem, todavia, a escolha da solução inicial no método numérico utilizado afeta diretamente o valor da solução final dos parâmetros q e \bar{q} , de tal forma que soluções iniciais distintas convergem para duas ou mais soluções finais. Com base nesta consideração, o levantamento de todas as soluções finais dos parâmetros q e \bar{q} é feito através do cálculo numérico destes parâmetros com todas as possíveis configurações de solução inicial existentes, que são alteradas através de um pequeno passo, possibilitando assim a obtenção das soluções vidro de spin, que foram vistas na figura 9 e novamente observadas na figura 10, em que o parâmetro de ordem vidro de spin q é mostrado como uma função de μ/J para diferentes valores de temperatura.

De acordo com a figura 10(a), o parâmetro de ordem q para temperatura $T/J > 1/3$ tem solução única para cada valor de μ/J . Para temperaturas entre $T/J < 1/3$ e $T/J > 0.06$, há um intervalo no potencial químico onde ocorrem duas soluções. Finalmente, para $T/J < 0.06$, há um pequeno intervalo onde ocorrem quatro soluções vidro de spin que é detalhada no aumento da figura 10(a). Na figura 10(b), com $T/J > 0.31$, a solução vidro de spin em função de μ/J tem um valor único. Abaixo desta temperatura, ocorre o surgimento de mais soluções vidro de spin para este valor de Γ/J . Na figura 10(c) quando $\Gamma/J = 1$, o surgimento de múltiplas soluções somente ocorre em $T/J < 0.24$. Para este valor de Γ/J , ocorre uma diminuição do intervalo da região onde μ/J tem mais de uma solução para q . Finalmente, para $\Gamma/J = 1.5$, na figura 10(d), somente em $T/J < 0.13$ ocorrem múltiplas soluções. Além disso, o intervalo de μ/J em que surge a transição de primeira ordem diminui ainda mais.

O potencial termodinâmico Ω em função de μ/J para diversos valores de Γ/J e T/J também é mostrado na figura 11. Na figura 11(a), a linha que representa o potencial

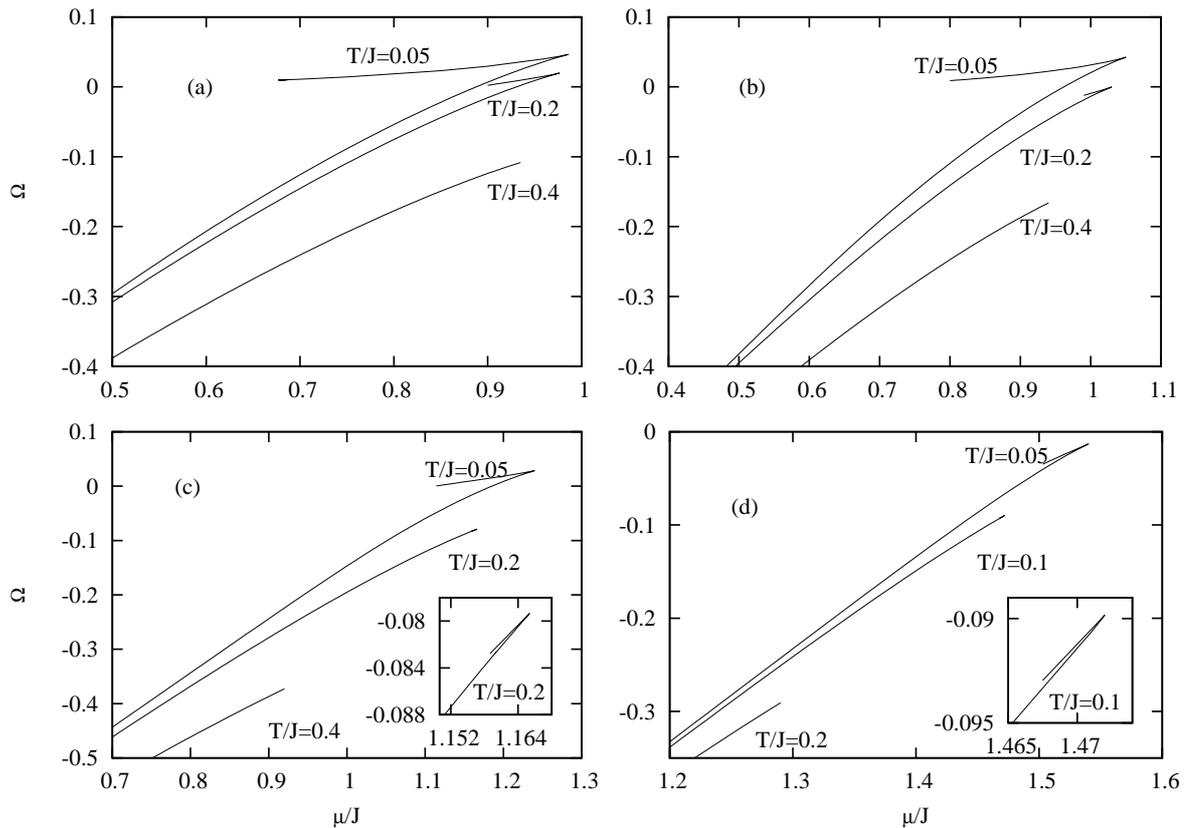


Figura 11: Potencial termodinâmico em função do potencial químico para vários valores de temperatura e Γ/J : (a) $\Gamma/J = 0$, (b) $\Gamma/J = 0.5$, (c) $\Gamma/J = 1.0$ e (d) $\Gamma/J = 1.5$. Os detalhes em (c) e (d) representam um aumento na região de primeira ordem. Em um determinado intervalo de μ/J , o potencial termodinâmico apresenta dois ramos distintos. Utilizando um critério de continuidade, o potencial termodinâmico fisicamente aceitável corresponde ao menor valor de Ω (ramo inferior) e corresponde a um maior valor para q .

termodinâmico se bifurca em dois ramos, indicando uma transição de primeira ordem. Geralmente, condições de estabilidade são utilizadas para descartar soluções não físicas. No entanto, as condições de estabilidade derivadas do modelo Ghatak e Sherrington (1977) não se mostraram válidas na escolha da solução fisicamente aceitável em regiões de múltiplas soluções vidro de spin apresentadas por este modelo. Contudo, Costa, Yokoi e Salinas (1994), que observaram este problema em sua análise do modelo GS, voltaram suas atenções para o potencial termodinâmico e propuseram o seguinte critério: o potencial termodinâmico fisicamente aceitável seria aquele no qual o ramo de Ω , posicionado na região de uma única solução, se encontraria continuamente com o ramo de Ω na região de múltiplas soluções. Neste caso, o ramo inferior, correspondente ao menor valor para Ω e a um maior valor para q , é aquele que deve ser selecionado. O ramo superior indica todas as soluções metaestáveis e portanto deverá ser descartado. Devido ao mapeamento da equação (2.36), este critério pode ser utilizado com segurança no modelo fermiônico com $\mu/J \neq 0$. No

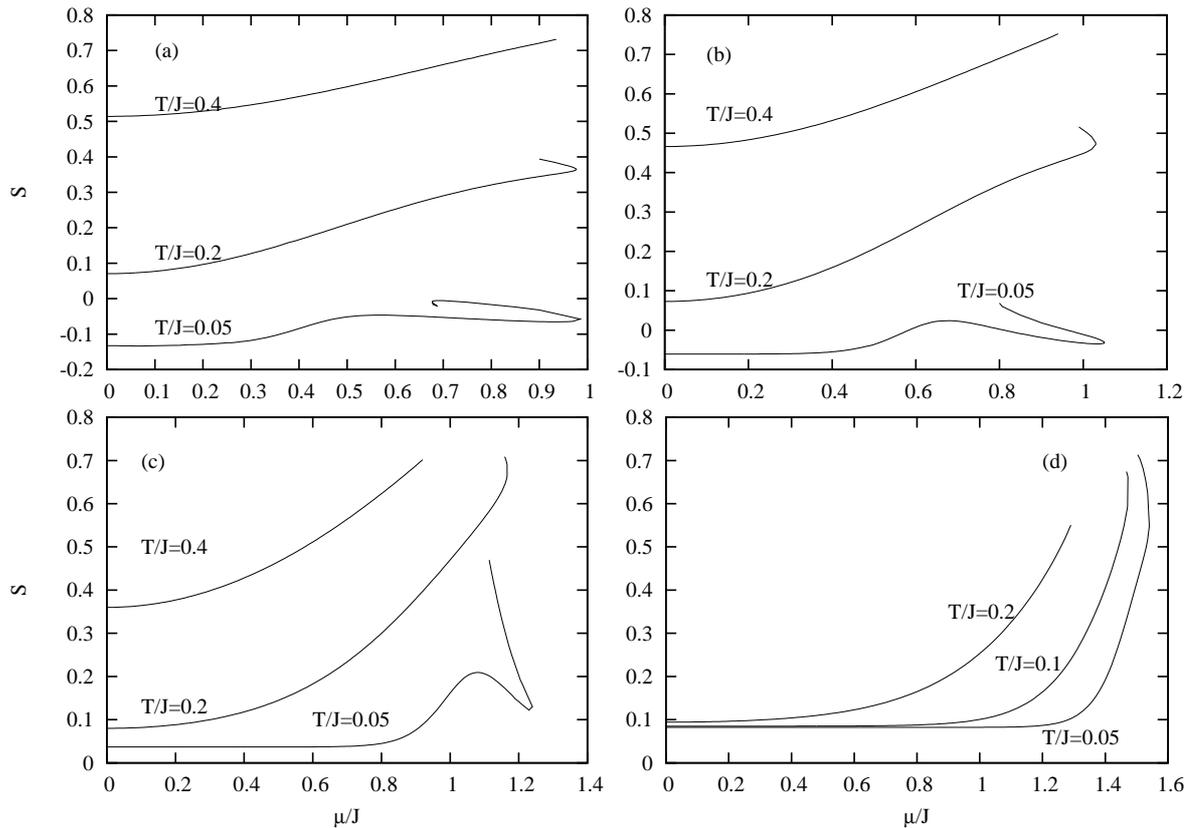


Figura 12: A entropia pelo potencial químico para diversos valores de temperatura e Γ/J : $\Gamma/J = 0$, (b) $\Gamma/J = 0.5$, (c) $\Gamma/J = 1.0$ e (d) $\Gamma/J = 1.5$. Devido a utilização do “ansatz” de simetria de réplicas, a entropia se torna negativa à baixas temperaturas. Também são observadas ramificações na entropia, indicando uma região de múltiplas soluções. Da mesma forma, o critério de continuidade utilizado na escolha do ramo estável do potencial termodinâmico pode também ser utilizado na escolha do ramo estável da entropia.

presente trabalho, a utilização deste critério é estendida para $\mu \neq 0$ e $\Gamma \neq 0$.

A entropia da solução vidro de spin como uma função de μ/J para diferentes valores de Γ/J e T/J é apresentada na figura 12. Quando $\Gamma/J = 0$ e $T/J = 0.05$, a entropia se torna negativa para pequenos valores de μ/J . Com $\Gamma/J = 0.5$ e $T/J = 0.05$, a entropia ainda assume valores negativos. Porém, ao assumir os valores $\Gamma/J = 1.0$ e $\Gamma/J = 1.5$, a entropia deixa de ser negativa e passa a ter valores positivos, independentemente da temperatura. Enquanto que a causa para uma entropia negativa em $\Gamma/J = 0$ e $\Gamma/J = 0.5$ pode ser justificada pela utilização do “ansatz” de simetria de réplicas, os valores positivos da entropia em qualquer temperatura quando $\Gamma/J = 1$ e $\Gamma/J = 1.5$ podem ser descritos como efeitos da utilização da aproximação estática.

Na figura 13 são apresentados os diagramas de fase μ/J versus T/J para diversos valores de Γ/J fixo. Para $\Gamma/J = 0$, a figura 13(a) mostra que o aumento de μ/J diminui

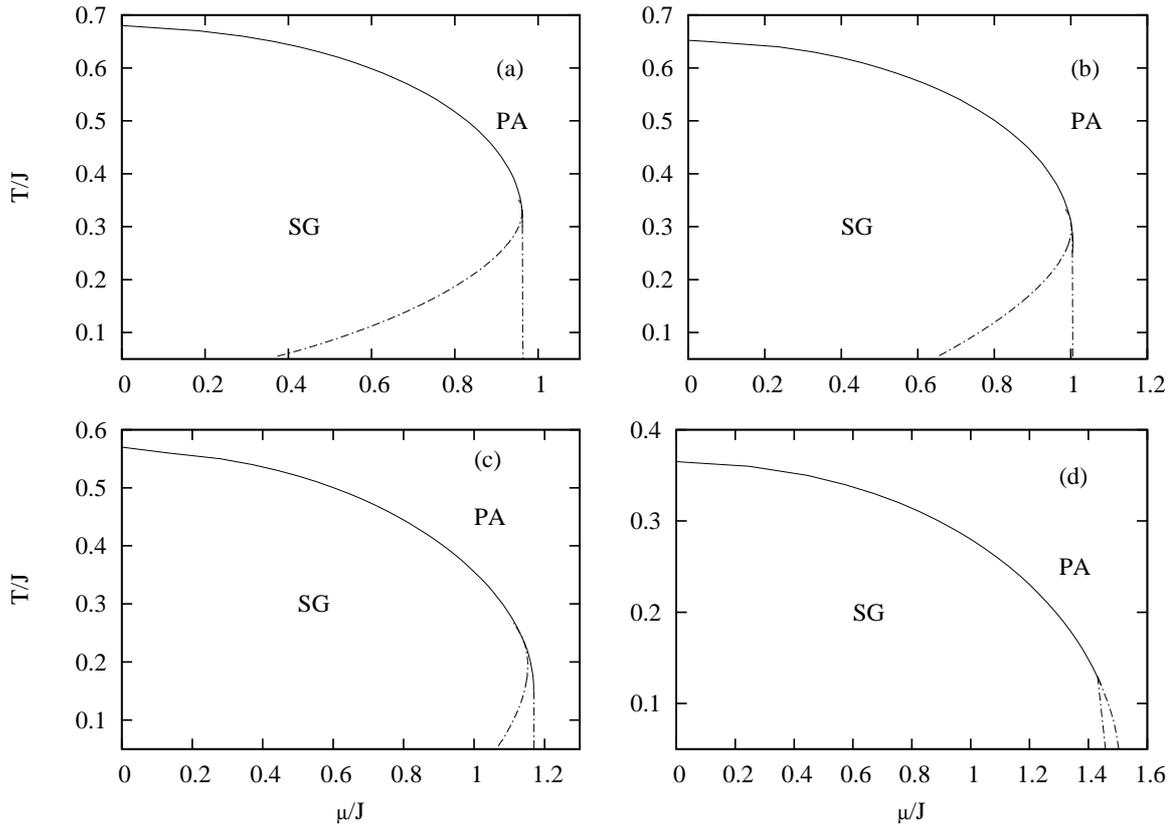


Figura 13: Diagrama de T/J x μ/J para diversos valores de Γ/J :(a) $\Gamma/J = 0$,(b) $\Gamma/J = 0.5$,(c) $\Gamma/J = 1.0$ e (d) $\Gamma/J = 1.5$. Em todos os valores de Γ/J apresentados a linha pontilhada interior (correspondente a curva com μ/J menor em $T/J = 0.05$) define ao limite de validade da solução paramagnética. A linha pontilhada exterior (correspondente a curva com μ/J maior em $T/J = 0.05$) define o limite de validade da solução vidro de spin. Observa-se também a dependência da região de múltiplas soluções e do ponto tricrítico com Γ/J .

a temperatura de transição. A linha sólida indica uma transição de segunda ordem, e a região de primeira ordem é indicada pelas linhas pontilhadas. A partir da solução numérica dos parâmetros de ordem, foi possível demarcar, sem precisão, a região onde ocorrem as múltiplas soluções para os diferentes valores de Γ/J . No entanto, a localização exata do ponto que separa as transições de primeira e segunda ordem e da linha de transição de primeira ordem será deixada para o próximo capítulo, em que são introduzidas as condições de estabilidade da solução com simetria de réplicas.

Observadas na figura 13(a), as duas linhas pontilhadas demarcam a região com múltiplas soluções do parâmetro q , vistas na figura 10. Na figura 13(b), para $\Gamma/J = 0.5$, a dependência da temperatura crítica pelo campo transversal é observada já que $(T_f)_{\Gamma/J=1.5} < (T_f)_{\Gamma/J=1} < (T_f)_{\Gamma/J=0.5} < (T_f)_{\Gamma/J=0}$ em $\mu/J = 0$. A temperatura que separa as transições de primeira e segunda ordem, que será denominada T_{tc} , e potencial químico equivalente a

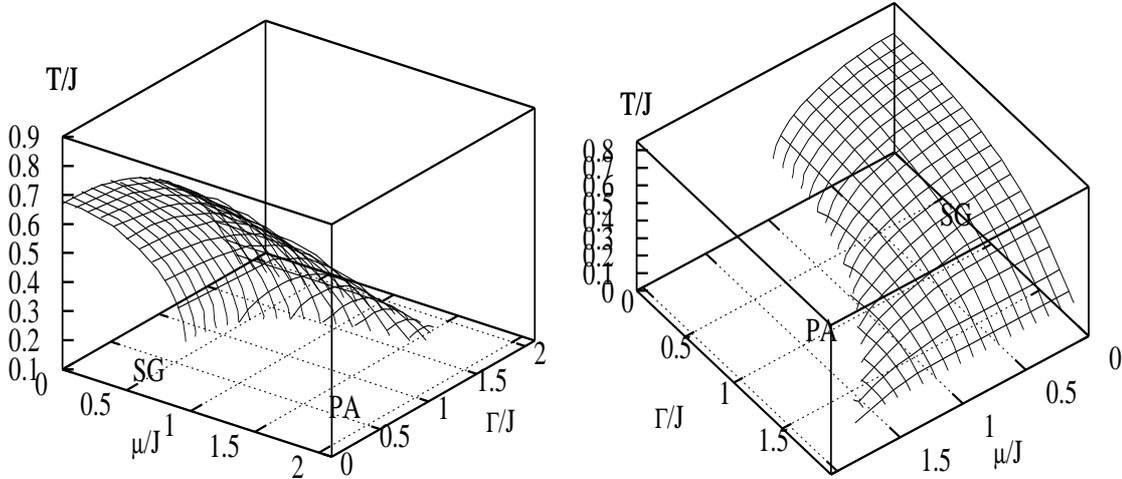


Figura 14: Diagrama de Fase 3D em dois ângulos indicando o contorno de segunda ordem que separa as fases vidro de spin e paramagnética. Neste diagrama não é definida a exata linha de transição de primeira e nem o ponto tricrítico. No entanto, mostra uma idéia geral da competição PA e SG com Γ/J e μ/J combinados.

T_{tc} , denominado μ_{tc} , também mostram sua dependência para $\Gamma/J \neq 0$: Observa-se que, enquanto $(T_{tf})_{\Gamma/J=1.5} < (T_{tf})_{\Gamma/J=1} < (T_{tf})_{\Gamma/J=0.5} < (T_{tf})_{\Gamma/J=0}$, μ_{tc} segue a dependência com Γ/J de tal forma que $(\mu_{tc})_{\Gamma/J=1.5} > (\mu_{tc})_{\Gamma/J=1} > (\mu_{tc})_{\Gamma/J=0.5} > (\mu_{tc})_{\Gamma/J=0}$. Além disso, a região de múltiplas diminui a cada aumento de Γ/J .

Isoladamente, os efeitos do campo transversal e do potencial químico são distintos. O campo transversal tem como principal objetivo introduzir flutuações quânticas, através de um mecanismo de “flipagem” dos spins, tornando possível observar transições de fase em $T/J = 0$. O potencial químico, por sua vez, através das flutuações de carga, muda o número médio de ocupação e, conseqüentemente, conduz o sistema a regiões de primeira ordem. Atuando em conjunto, é possível observar as seguintes características sobre o diagrama de fases: dependência do par (T_{tc}, μ_{tc}) com Γ/J e dependência de T_f com μ/J e Γ/J . Há também o surgimento de regiões de primeira ordem somente para valores altos de μ/J , com $([\mu/J \simeq 0.96]_{\Gamma/J=0}, [\mu/J \simeq 1.01]_{\Gamma/J=0.5}, [\mu/J \simeq 1.13]_{\Gamma/J=1}, [\mu/J \simeq 1.41]_{\Gamma/J=1.5})$. Observa-se também que o valor do PCQ independe do potencial químico, e que há um decréscimo da região de múltiplas soluções com aumento de Γ/J .

Com isso, para um melhor entendimento do efeito do potencial químico e do campo transversal na competição entre as fases vidro de spin e paramagnética, um diagrama de

fases em três dimensões foi construído e mostrado na figura 13. No diagrama, não está demarcada a localização exata do ponto que separa as regiões de primeira e segunda ordem e a linha de transição de primeira ordem, porém, mostra uma idéia geral da competição entre as fases paramagnética e vidro de spin com Γ/J e μ/J combinados.

5 *Estabilidade da Solução no Modelo Fermiônico*

5.1 Introdução

No capítulo precedente, os efeitos que flutuações quânticas e de carga tinham sobre o comportamento das transições de fase foram largamente discutidos. No entanto, algumas questões permaneceram em aberto. Enquanto que foram observadas múltiplas soluções para os parâmetros de ordem, indicando regiões que apresentavam transições de primeira ordem, o exato ponto de separação entre transições de primeira e segunda ordem, conhecido como ponto tricrítico, ainda não havia sido localizado. Abaixo deste ponto, na região de primeira ordem, a exata linha de transição de primeira ordem não foi demarcada, bem como a escolha das soluções estáveis não foram claramente discutidas. Este capítulo tem por objetivo elucidar estas questões e também analisar alguns problemas que são inseridos no modelo através da utilização da solução com simetria de réplicas. Na seção seguinte, são introduzidas as condições de estabilidade da solução com simetria de réplicas, que utilizam perturbações para observar a validade deste tipo de solução. Em seguida, o limite da validade das condições de estabilidade e da solução paramagnética sem campo transversal são investigados, e seus resultados comparados com trabalhos prévios. Finalmente, quando Γ/J é introduzido, o limite da validade das condições de estabilidade da solução com simetria de réplicas na solução paramagnética é tomado para diferentes valores de Γ/J . A partir do limite da validade das condições de estabilidade da solução paramagnética, e utilizando conceitos introduzidos em trabalhos prévios, o ponto tricrítico e a linha de transição de primeira ordem são localizados.

5.2 Estabilidade da Simetria de Réplicas

A solução com simetria de réplicas produz bons resultados nas transições de fase em altas temperaturas. No entanto, sua utilização apresenta certos problemas: esta apro-

ximação demonstra uma falha que é, por exemplo, manifestada pelo valor negativo da entropia a baixas temperaturas. Algumas suspeitas para o surgimento deste problema recaiam na utilização do método “steepest descent”, em que o limite $N \rightarrow \infty$ é tomado primeiro, ainda que a ordem correta seja $n \rightarrow 0$ e somente depois $N \rightarrow \infty$. Contudo, foi estabelecido que a suposição da simetria de réplicas $q_{\alpha\beta}$ ($\forall(\alpha\beta); \alpha \neq \beta$) é a real fonte do problema.

Como a energia livre derivada sob o “ansatz” de simetria de réplicas tem o problema da entropia negativa a baixas temperaturas (SHERRINGTON; KIRKPATRICK, 1978), é natural investigar a possibilidade de que o parâmetro de ordem $q_{\alpha\beta}$ pode assumir vários valores dependendo dos índices de réplica α e β . A teoria para estudar a estabilidade da solução com simetria de réplicas surgiu como um esforço matemático para analisar a validade da solução com simetria. Observa-se, entretanto, que este estudo tem implicações físicas muito interessantes, demonstrando a existência de uma grande variedade de estados estáveis no espaço de fase. Uma condição necessária para a confiabilidade da solução com simetria de réplicas é que a energia livre tem que ser estável para desvios infinitesimais em torno da solução. Para analisar esta estabilidade, a exponencial que surge no cálculo da função de partição é expandida em pequenos desvios até segunda ordem, em torno da solução com simetria de réplicas

$$\int \prod_{\alpha} dq_{\alpha} \int \prod_{(\alpha\beta)} dq_{\alpha\beta} \exp [-\beta N \{f_{RS} + O^2(\epsilon_{\alpha}; \eta_{\alpha\beta})\}] \quad (5.1)$$

sendo f_{RS} o termo resultante da solução com simetria de réplicas e o termo de segunda ordem é a perturbação.

5.3 Cálculo da Matriz Hessiana

Nesta seção, são derivadas as condições de estabilidade que devem ser satisfeitas pela solução de simetria de réplicas gerada pelo vidro de spin fermiônico com potencial químico não nulo e campo transversal, descrito no ensemble grande canônico pelo hamiltoniano

$$H = - \sum_{ij} J_{ij} \hat{S}_i^z \hat{S}_j^z - 2\Gamma \sum_i \hat{S}_i^x \quad (5.2)$$

sendo o termo μ responsável pelas flutuações de carga e Γ responsável pelas flutuações de natureza quântica. Este modelo fermiônico tem como característica o surgimento de mais um parâmetro de ordem, já que a componente diagonal da matriz das réplicas não

é mais unitária. O modelo em questão apresenta tanto transições contínuas quanto de primeira ordem. De fato, como visto nos capítulos anteriores, são as flutuações de carga as responsáveis pela origem do surgimento de transições de primeira ordem. As condições aqui obtidas são utilizadas para a análise da estabilidade deste modelo vidro de spin Ising fermiônico no ensemble grande canônico com a introdução do campo transversal. O grande potencial termodinâmico no ensemble grande canônico para este modelo toma a seguinte forma:

$$\frac{-\beta\Omega}{N} = \lim_{n \rightarrow 0} \left[-\frac{\beta^2 J^2}{2} \sum_{\alpha} q_{\alpha}^2 - \beta^2 J^2 \sum_{(\alpha\beta)} q_{\alpha\beta}^2 + \ln \Lambda_{\alpha} \right] / n \quad (5.3)$$

sendo

$$\Lambda_{\alpha} = \int \prod_{\alpha\beta} D(\phi^* \phi) e^{[\sum_{\alpha} A_{\Gamma}^{\alpha} + \sum_{\alpha} 4\beta^2 J^2 q_{\alpha}(S_{\alpha})^2 + \sum_{(\alpha\beta)} 8\beta^2 J^2 q_{\alpha\beta} S_{\alpha} S_{\beta}]}. \quad (5.4)$$

Com intuito de observar se o grande potencial termodinâmico com simetria de réplicas é um máximo, condição essa exigida pela utilização do método “steepest descent”, introduzimos pequenas perturbações nos parâmetros $y_{\alpha\beta}$ e x_{α} . Estes parâmetros foram reescritos de acordo com as equações

$$q_{\alpha\beta} = \frac{y_{\alpha\beta}}{2\beta^2 J^2} \quad ; \quad q_{\alpha} = \frac{x_{\alpha}}{\beta^2 J^2} \quad (5.5)$$

tal que a energia livre reescalada tenha a seguinte forma:

$$\frac{-\beta\Omega}{N} = \lim_{n \rightarrow 0} \left[-\frac{1}{2\beta^2 J^2} \sum_{\alpha} x_{\alpha}^2 - \frac{1}{4\beta^2 J^2} \sum_{(\alpha\beta)} y_{\alpha\beta}^2 + \ln \Lambda_{\alpha} \right] / n \quad (5.6)$$

sendo

$$\Lambda_{\alpha} = \int \prod_{\alpha\beta} D(\phi^* \phi) e^{[\sum_{\alpha} A_{\Gamma}^{\alpha} + \sum_{\alpha} 4(x_{\alpha})(S_{\alpha})^2 + \sum_{(\alpha\beta)} 4y_{\alpha\beta} S_{\alpha} S_{\beta}]}. \quad (5.7)$$

Introduzindo pequenos desvios em torno da solução com simetria de réplicas

$$x_{\alpha} = x + \epsilon_{\alpha} \quad ; \quad y_{\alpha\beta} = y + \eta_{\alpha\beta} \quad (5.8)$$

o termo $\ln \Lambda_{\alpha}$ pode ser escrito como

$$\ln \int \prod_{\alpha\beta} D(\phi^* \phi) e^{L_{\alpha}} = \ln \int \prod_{\alpha\beta} D(\phi^* \phi) e^{L_{RS} + \sum_{\alpha} 4\epsilon_{\alpha}(S_{\alpha})^2 + \sum_{\alpha\beta} 4\eta_{\alpha\beta} S_{\alpha} S_{\beta}} \quad (5.9)$$

com a notação $L_{RS} = \sum_{\alpha} A_{\Gamma}^{\alpha} + 4 \sum_{\alpha} x(S_{\alpha})^2 + 4 \sum_{(\alpha\beta)} y S_{\alpha} S_{\beta}$ definindo à parte referente a solução com simetria de réplicas.

Primeiramente, expande-se a equação (5.9) em torno de ϵ_{α} e $\eta_{\alpha\beta}$ com ajuda de série de Taylor para função de duas variáveis. Em seguida, usando o fato de que a solução com

simetria de réplicas é aquela que extremiza o grande potencial termodinâmico, observa-se que os termos lineares em ϵ_α e $\eta_{\alpha\beta}$ são nulos. Com isso, a expressão resultante é

$$-\frac{\beta\Omega}{N} = \lim_{n \rightarrow 0} [\Omega_{RS} + O_{pert}] / n \quad (5.10)$$

sendo

$$\Omega_{RS} = -\sum_\alpha \frac{x^2}{2\beta^2 J^2} - \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} \frac{y^2}{4\beta^2 J^2} + \ln \int \prod_{\alpha\beta} D(\phi^* \phi) e^{L_{RS}} \quad ; \quad O_{pert} = -\frac{1}{2} \Delta. \quad (5.11)$$

A equação (5.10) é separada em duas partes; a solução com simetria de réplicas e O_{pert} , que é o termo perturbativo em que estão associados todos os termos de segunda ordem de Ω com respeito a ϵ_α e $\eta_{\alpha\beta}$. A função Δ é definida por

$$\begin{aligned} \Delta &= \sum_{\alpha\beta} \left(\frac{\delta_{\alpha\beta}}{\beta^2 J^2} - 16 [\langle S_\alpha^2 S_\beta^2 \rangle - \langle S_\alpha^2 \rangle \langle S_\beta^2 \rangle] \right) \epsilon_\alpha \epsilon_\beta \\ &- 2 \sum_{\delta, \alpha\beta} (16 [\langle S_\delta \rangle^2 S_\alpha S_\beta] - \langle (S_\delta)^2 \rangle \langle S_\alpha S_\beta \rangle) \epsilon_\delta \eta_{\alpha\beta} \\ &+ \sum_{\alpha\beta, \delta} \left(\frac{\delta_{\alpha\beta, \delta\gamma}}{2\beta^2 J^2} - 16 [\langle S_\alpha S_\beta S_\gamma S_\delta \rangle - \langle S_\alpha S_\beta \rangle \langle S_\gamma S_\delta \rangle] \right) \eta_{\alpha\beta} \eta_{\delta\gamma}. \end{aligned} \quad (5.12)$$

A matriz dos coeficientes desta forma quadrática em ϵ_α e $\eta_{\alpha\beta}$ é definida por \bar{G} e conhecida como matriz *Hessiana*. A estabilidade da solução com simetria de réplicas exige que todos os autovalores desta matriz sejam positivos. Para derivar os autovalores, é necessário listar todos os elementos da matriz \bar{G} . Os coeficientes dos termos de segunda ordem em ϵ têm apenas dois tipos de valores:

$$G_{\alpha\alpha} = \frac{1}{(\beta J)^2} - 16 [\langle (S_\alpha)^4 \rangle - \langle (S_\alpha)^2 \rangle^2] = A \quad (5.13)$$

$$G_{\alpha\beta} = -16 [\langle (S_\alpha S_\beta)^2 \rangle - \langle (S_\alpha)^2 \rangle \langle (S_\beta)^2 \rangle] = B \quad (5.14)$$

Há ainda duas espécies de elementos de matriz provenientes dos termos cruzados

$$G_{\alpha, \alpha\beta} = 16 \langle (S_\alpha)^2 \rangle \langle S_\alpha S_\beta \rangle - 16 \langle (S_\alpha)^2 S_\alpha S_\beta \rangle = C \quad (5.15)$$

$$G_{\delta, \alpha\beta} = 16 \langle (S_\delta)^2 \rangle \langle S_\alpha S_\beta \rangle - 16 \langle (S_\delta)^2 S_\alpha S_\beta \rangle = D \quad (5.16)$$

Os coeficientes dos termos de segunda ordem em η têm três tipos de valores diferentes. Além dos elementos da diagonal, há ainda dois outros tipos de elementos fora da diagonal. Enquanto que alguns elementos fora da diagonal possuem apenas um dos índices de réplica

em comum, o restante possui todos os índices de réplicas diferentes:

$$G_{(\alpha\beta)(\alpha\beta)} = \frac{1}{2(\beta J)^2} - 16 [\langle (S_\alpha S_\beta^2) \rangle - \langle S_\alpha S_\beta \rangle^2] = P \quad (5.17)$$

$$G_{(\alpha\beta)(\alpha\delta)} = -16 [\langle (S_\alpha)^2 S_\beta S_\delta \rangle - \langle S_\alpha S_\beta \rangle^2] = Q \quad (5.18)$$

$$G_{(\alpha\beta)(\gamma\delta)} = -16 [\langle S_\alpha S_\beta S_\gamma S_\delta \rangle - \langle S_\alpha S_\beta \rangle^2] = R \quad (5.19)$$

Todos os sete elementos listados acima compõem a matriz \bar{G} . A segunda igualdade define as quantidades A, B, C, D, P, Q e R em termos das correlações de spin. Devido à simetria da matriz sob permutação dos índices, um conjunto completo de autovetores pode ser encontrado para valores gerais de n . Primeiramente, a matriz completa tem o seguinte formato:

$$\bar{G} = \begin{pmatrix} G_{11} & \dots & G_{1,n} & G_{1,12} & \dots & G_{1,n(n-1)/2} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ G_{n,1} & \dots & G_{n,n} & G_{n,12} & \dots & G_{n,n(n-1)/2} \\ G_{12,1} & \dots & G_{12,n} & G_{12,12} & \dots & G_{12,n(n-1)/2} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ G_{n(n-1)/2,1} & \dots & G_{n(n-1)/2,n} & G_{n(n-1)/2,12} & \dots & G_{n(n-1)/2,n(n-1)/2} \end{pmatrix} \quad (5.20)$$

A dimensionalidade da matriz \bar{G} é igual à soma das dimensões espaciais de ϵ_α e $\eta_{\alpha\beta}$, em que cada elemento é definido por uma função de correlação. O próximo passo é investigar as condições de estabilidade das soluções encontradas, comprovando a positividade de todos os autovalores. Estes são obtidos utilizando a equação dos autovalores

$$\bar{G}\vartheta = \lambda\vartheta, \quad \vartheta = \begin{pmatrix} \{\epsilon_\alpha\} \\ \{\eta_{\alpha\beta}\} \end{pmatrix} \quad (5.21)$$

Os autovalores são encontrados no apêndice A e serão apenas mencionados aqui. O primeiro tipo de autovetor ϑ_1 tem $\epsilon_\alpha = a$ e $\eta_{\alpha\beta} = b$ e é uniforme em ambas as partes. Este autovalor, no limite de $n \rightarrow 0$, igual a

$$\lambda_\pm = \frac{1}{2} \left\{ (A - B) + (P - 4Q + 3R) \pm \sqrt{[(A - B) - (P - 4Q + 3R)]^2 - 8(C - D)^2} \right\} \quad (5.22)$$

O segundo tipo de autovetor ϑ_2 tem $\epsilon_\theta = a$ para uma réplica específica e $\epsilon_\alpha = b$ no caso contrário, e $\eta_{\alpha\beta} = c$ quando α ou β é igual a θ e $\eta_{\alpha\beta}$ no caso contrário. O autovalor deste autovetor se torna degenerado com λ_1 no limite de $n \rightarrow 0$. Na realidade, o primeiro

tipo de autovalor é apenas um caso especial, já que ele pode ser encontrado através da combinação linear de diferentes vetores do segundo tipo. O terceiro e último tipo de autovetor ϑ_3 tem $\epsilon_\theta = a$, $e_\nu = b$ (para duas réplicas específicas θ, ν) e $\epsilon_\alpha = c$ para α diferente de θ ou ν , e $\eta_{\theta\nu} = c$, $\eta_{\theta\alpha} = \eta_{\nu\alpha} = d$. Caso contrário $\eta_{\alpha\beta} = e$. O autovalor obtido é

$$\lambda_{at} = P - 2Q + R \quad (5.23)$$

As condições de estabilidade local exigem que todos os autovalores sejam positivos. Porém, o autovalor λ_{at} , também conhecido como replicon, sempre é negativo na solução vidro de spin. Portanto, a simetria de réplicas não consegue satisfazer a positividade de todos os seus autovalores na fase vidro de spin. Quando a análise da estabilidade da solução com simetria de réplicas foi introduzida por Almeida e Thouless (1978) no modelo clássico de spin 1/2 de Sherrington e Kirkpatrick (1978), os resultados obtidos apresentaram somente autovalores positivos e negativos. No entanto, dentro da formulação fermiônica, a presença do novo parâmetro de ordem q_α introduz inclusive autovalores complexos, que são observados nos diagramas de fases da figura 20.

5.4 A Solução Paramagnética

Na solução paramagnética, todos os autovalores são positivos ou, no mínimo, não nulos, de tal forma que esta solução sempre seja estável para flutuações do “ansatz” de simetria de réplicas. Somente há autovalores negativos na solução vidro de spin, resultado que é observado, por exemplo, no modelo clássico de Sherrington e Kirkpatrick. Assim, é razoável a utilização das condições de estabilidade local para obtenção dos contornos que limitam a solução paramagnética, como será visto a seguir.

O primeiro passo é impor que necessariamente os autovalores sejam positivos, desde que o objeto de investigação nesta seção é a própria solução paramagnética

$$\lambda_{\pm} = \frac{1}{2} \left\{ (A - B) + (P - 4Q + 3R) \pm \sqrt{[(A - B) - (P - 4Q + 3R)]^2 - 8(C - D)^2} \right\} \geq 0 \quad (5.24)$$

$$\lambda_{at} = P - 2Q + R \geq 0 \quad (5.25)$$

em que

$$A - B = \frac{1}{(\beta J)^2} - 16 [\langle (S_\alpha)^4 \rangle - \langle (S_\alpha S_\beta)^2 \rangle] \quad (5.26)$$

$$P - 4Q + 3R = \frac{1}{2(\beta J)^2} - 16 [\langle (S_\alpha S_\beta)^2 \rangle - 4\langle (S_\alpha)^2 S_\beta S_\delta \rangle + 3\langle S_\alpha S_\beta S_\gamma S_\delta \rangle] \quad (5.27)$$

$$P - 2Q + R = \frac{1}{2(\beta J)^2} - 16 [\langle (S_\alpha S_\beta)^2 \rangle - 2\langle (S_\alpha)^2 S_\beta S_\delta \rangle + \langle S_\alpha S_\beta S_\gamma S_\delta \rangle] \quad (5.28)$$

sendo as médias dos spins as correlações, que são calculadas no apêndice B. O termo $(C - D)$ da equação dos autovalores λ_\pm é nulo na fase paramagnética.

A introdução das condições de estabilidade local demonstram, contudo, adicionar importantes informações, que serão vistas no decorrer deste capítulo. Para identificar o contorno da solução paramagnética, algumas questões são postas em prática: na fase paramagnética, o parâmetro de ordem q , responsável pelo surgimento da fase vidro de spin, é nulo. O limite da validade da solução paramagnética é dada quando as condições de estabilidade local são exatamente nulas, de tal forma que

$$\lambda_\pm = \frac{1}{2} \left\{ (A - B) + (P - 4Q + 3R) \pm \sqrt{[(A - B) - (P - 4Q + 3R)]^2} \right\} = 0 \quad (5.29)$$

$$\lambda_{at} = P - 2Q + R = 0 \quad (5.30)$$

sendo as componentes dos autovalores λ_\pm e λ_{at} definidas pelas seguintes equações $\Gamma = 0$

$$A - B = \frac{1}{(\beta J)^2} - \int Dz \phi_2(z) [1 - \phi_2(z)] \quad (5.31)$$

$$P - 4Q + 3R = \frac{1}{2(\beta J)^2} - \int Dz [\phi_2^2(z) - 4\phi_2(z)\phi_1(z) + 3\phi_1^4(z)] \quad (5.32)$$

$$P - 2Q + R = \frac{1}{2(\beta J)^2} - \int Dz [\phi_2(z) - \phi_1(z)]^2 \quad (5.33)$$

em que

$$\phi_2(z) = \frac{\cosh(\beta J \sqrt{2q}z)}{e^{-(\bar{q}-q)(\beta J)^2} \cosh(\beta\mu) + \cosh(\beta J \sqrt{2q}z)} \quad (5.34)$$

$$\phi_1(z) = \frac{\sinh(\beta J \sqrt{2q}z)}{e^{-(\bar{q}-q)(\beta J)^2} \cosh(\beta\mu) + \cosh(\beta J \sqrt{2q}z)}. \quad (5.35)$$

Para $q = 0$, $\phi_1(z) = 0$ e $\phi_2(z)$ se reduz a \bar{q} . Na solução paramagnética, a partir da equação (4.76), em que é assumido $q = 0$, o parâmetro de ordem \bar{q} toma a seguinte forma:

$$\bar{q} = \frac{1}{e^{-(\beta J)^2 \bar{q}} \cosh(\beta\mu) + 1}. \quad (5.36)$$

Da mesma maneira, a condição de estabilidade local do autovalor $\lambda_{at} = P - 2Q + R$ na

solução paramagnética se reduz a

$$\lambda_{at} = \frac{1}{2(\beta J)^2} - \bar{q}^2 \geq 0. \quad (5.37)$$

No limite da validade da estabilidade local, $\lambda_{at} = 0$. Assim, a seguinte condição é extraída, considerando que somente termos positivos são relevantes

$$\bar{q} = \frac{1}{\sqrt{2}\beta J} \quad (5.38)$$

substituindo (5.38) em (5.36), é obtida uma relação entre μ e T/J que define o limite da estabilidade da solução paramagnética

$$\mu_{at} = \frac{1}{\beta} \cosh^{-1} \left[\left(\sqrt{2}\beta J - 1 \right) e^{\frac{1}{\sqrt{2}}\beta J} \right]. \quad (5.39)$$

Para o autovalor λ_{\pm} , quando $q = 0$, a seguinte expressão é obtida:

$$\lambda_{\pm} = \bar{q}^2 - \bar{q} + 1/(\beta J)^2 \geq 0. \quad (5.40)$$

Novamente, no limite da estabilidade da solução paramagnética, $\lambda_{\pm} = 0$. A partir deste procedimento, é obtida a seguinte solução da equação (5.40):

$$\bar{q} = \frac{1 \pm \sqrt{1 - 4/(\beta J)^2}}{2} \quad (5.41)$$

substituindo (5.41) em (5.36), a seguinte condição é extraída:

$$\mu_{\pm} = \frac{1}{\beta} \cosh^{-1} \left[\frac{(1 \pm \sqrt{1 - 4/(\beta J)^2})^2}{4/(\beta J)^2} e^{\frac{4J^2}{1 \pm \sqrt{1 - 4/(\beta J)^2}}} \right]. \quad (5.42)$$

Primeiramente, observam-se as seguintes condições: quando o limite das réplicas $n \rightarrow 0$ é tomado, o parâmetro q se torna negativo. Como consequência, há uma inversão na extremização do potencial termodinâmico Ω , de tal forma que o parâmetro q aparentemente maximiza Ω . Por outro lado, o parâmetro \bar{q} permanece positivo no limite de $n \rightarrow 0$, tal que nenhuma inversão ocorra na extremização de Ω em relação a \bar{q} . Logo, enquanto Ω é maximizado com respeito a q , ele é minimizado com respeito a \bar{q} .

Agora, é necessário observar com atenção a figura 15, que apresenta um diagrama de fases obtido através das equações (5.39) e (5.42). Para $q = 0$, há três possíveis soluções para o parâmetro \bar{q} na região entre as linhas RD e DO (*região B*), onde as linhas são obtidas através das equações μ_+ e μ_- respectivamente, e definidas em (5.42). Fora desta região, todavia, a solução para o parâmetro \bar{q} é única (*região A*). Porém, na região B, duas das três soluções encontradas são instáveis, desde que somente a menor solução para \bar{q} ,

devido aos critérios de estabilidade e também à condição de extremização de Ω , é estável. A partir daqui também é introduzida a linha KF , definida pela equação μ_{at} da equação 5.39, juntamente com um ponto de encontro, chamado T_{tc} , entre as linhas μ_- e μ_{at} . É observado que dentro da curva $KT_{tc}O$ a solução paramagnética é instável, incluindo a região dDT_{tc} , já que todos os autovalores λ_{at} e λ_{\pm} são negativos nesta região. Finalmente, considera-se as soluções restantes: sobre a linha RD , o valor de parâmetro \bar{q} na *região B* é idêntico ao valor do parâmetro \bar{q} na *região A*. Acima de T_{tc} , o parâmetro \bar{q} da fase paramagnética se encontra continuamente com o parâmetro \bar{q} da fase vidro de spin. Abaixo de T_{tc} , todavia, o parâmetro \bar{q} da fase paramagnética não se encontra continuamente com o parâmetro \bar{q} da solução vidro de spin, indicando uma descontinuidade. Dessa forma,

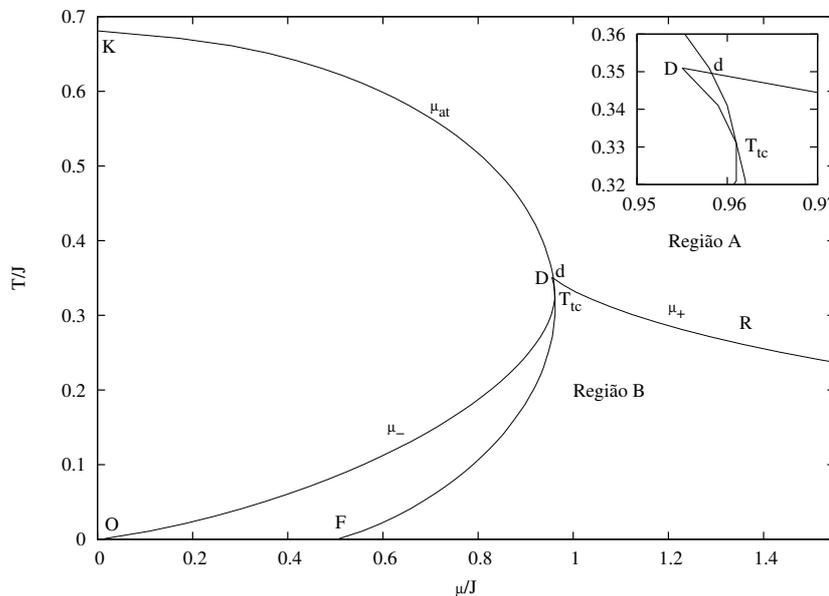


Figura 15: Região de estabilidade paramagnética: dentro da curva KT_cO a solução paramagnética é instável. Acima do ponto T_{tc} , o parâmetro \bar{q} da solução paramagnética se encontra continuamente com o parâmetro \bar{q} da solução vidro de spin. Abaixo de T_{tc} , no entanto, o parâmetro \bar{q} da solução paramagnética não se encontra continuamente com o parâmetro \bar{q} da solução vidro de spin.

abaixo do ponto T_{tc} , o sistema entra em uma região de primeira ordem, sendo que o valor que o parâmetro \bar{q} assume, no limite da validade da solução paramagnética, acima e abaixo de T_{tc} , é determinado pelas seguintes condições:

$$\begin{aligned} \bar{q} &< \frac{1}{\sqrt{2\beta J}} && \text{para } T/J > T_{tc}/J \\ \bar{q} &> \frac{1 - \sqrt{1 - 4/(\beta J)^2}}{2} && \text{para } T/J < T_{tc}/J. \end{aligned} \quad (5.43)$$

Desta forma, o limite da estabilidade da fase paramagnética é determinada pelas equações

$$\begin{aligned}\mu_{at} &= \frac{1}{\beta} \cosh^{-1} \left[(\sqrt{2}\beta J - 1) e^{\frac{1}{\sqrt{2}}\beta J} \right] \\ \mu_- &= \frac{1}{\beta} \cosh^{-1} \left[\frac{(1 - \sqrt{1 - 4/(\beta J)^2})^2}{4/(\beta J)^2} e^{\frac{4J^2}{1 - \sqrt{1 - 4/(\beta J)^2}}} \right]\end{aligned}\quad (5.44)$$

o que implica que não há solução paramagnética estável quando

$$\begin{aligned}\mu < \mu_{at} &\quad \text{para } T/J > T_{tc}/J \\ \mu > \mu_- &\quad \text{para } T/J < T_{tc}/J.\end{aligned}\quad (5.45)$$

no limite da estabilidade, as soluções para \bar{q} são idênticas, de tal forma que

$$\frac{1}{\sqrt{2}\beta J} = \frac{1 - \sqrt{1 - 4/(\beta J)^2}}{2}\quad (5.46)$$

a qual gera uma equação quadrática que resulta em

$$T_{tc}/J = \frac{1}{3}\sqrt{2}.\quad (5.47)$$

A locação do ponto tricrítico é dada através da substituição da temperatura crítica encontrada em (5.39), tal que

$$\mu_{at}/J \simeq 0.96\sqrt{2}.\quad (5.48)$$

Estas linhas se encontram no ponto $T_{tc}/J = 1/3\sqrt{2}$ e $\mu_{at}/J \simeq 0.96\sqrt{2}$, onde todos os autovalores são nulos.

Como é visto nesta seção, as idéias introduzidas no capítulo dois relacionadas à utilização das técnicas introduzidas por Lage e Almeida (1982) na localização do ponto tricrítico e Costa, Yokoi e Salinas (1994) para obtenção da linha de transição de primeira ordem no modelo GS são utilizadas para obtenção do valor do ponto tricrítico e da linha de transição de primeira ordem no modelo fermiônico ISGf com campo transversal nulo. O procedimento seguinte é, dentro do formalismo estudado até agora, observar o efeito das flutuações quânticas sobre as condições de estabilidade da solução com simetria de réplicas, a partir da introdução do campo transversal.

5.5 Condições de Estabilidade com a Introdução do Campo Transverso

Na seção anterior, os critérios de estabilidade foram analisados no modelo fermiônico, e, assim, foram obtidas as equações que definem o limite de estabilidade da solução para-

magnética para campo transversal nulo. Os critérios para localização da linha de segunda ordem e do ponto tricrítico neste modelo fermiônico utilizaram as mesmas idéias introduzidas por Lage e Almeida (1982), e esta utilização é justificada através do mapeamento proposto por Feldmann e Oppermann (1999). Dessa forma, as condições de estabilidade foram generalizadas para incluir flutuações quânticas com a introdução do campo transversal. De fato, os termos que compõem os autovalores λ_{\pm} e λ_{at} para $\Gamma \neq 0$ agora podem ser escritos por:

$$\begin{aligned}
A - B = & \frac{1}{\beta^2 J^2} - \int Dz \left[\frac{\int D\xi \frac{1}{\Delta^2} \left(h^4 + 3\beta^2 \Gamma^2 \left(1 - \frac{5h^2}{\Delta} \right) \cosh \sqrt{\Delta} \right)}{K(q, \xi)} \right] \\
& - \int Dz \left[\frac{\int D\xi \frac{1}{\Delta^{3/2}} \left(2h^2 - 1 + \frac{5h^2}{\Delta} \right) \sinh \sqrt{\Delta}}{K(q, \xi)} \right] \\
& + \int Dz \left[\frac{\int D\xi \left(\frac{h^2 \cosh \sqrt{\Delta}}{\Delta} + \frac{(\beta\Gamma)^2 \sinh \sqrt{\Delta}}{\Delta^{3/2}} \right)}{K(q, \xi)} \right]^2
\end{aligned} \tag{5.49}$$

$$\begin{aligned}
P - 4Q + 3R = & \frac{1}{2\beta^2 J^2} - \int Dz \left[\frac{\int D\xi \left(\frac{h^2 \cosh \sqrt{\Delta}}{\Delta} + \frac{(\beta\Gamma)^2 \sinh \sqrt{\Delta}}{\Delta^{3/2}} \right)}{K(q, \xi)} \right]^2 \\
& + 4 \int Dz \left[\frac{\int D\xi \left(\frac{h^2 \cosh \sqrt{\Delta}}{\Delta} + \frac{(\beta\Gamma)^2 \sinh \sqrt{\Delta}}{\Delta^{3/2}} \right)}{K(q, \xi)} \right] \left[\frac{\int D\xi \frac{h \sinh \sqrt{\Delta}}{\sqrt{\Delta}}}{K(q, \xi)} \right]^2 \\
& - 3 \int Dz \left[\frac{\int D\xi \frac{h \sinh \sqrt{\Delta}}{\sqrt{\Delta}}}{K(q, \xi)} \right]^4
\end{aligned} \tag{5.50}$$

$$P - 2Q + R = \frac{1}{2\beta^2 J^2} - \int Dz \left[\left[\frac{\int D\xi \left(\frac{h^2 \cosh \sqrt{\Delta}}{\Delta} + \frac{(\beta\Gamma)^2 \sinh \sqrt{\Delta}}{\Delta^{3/2}} \right)}{K(q, \xi)} \right] - \left[\frac{\int D\xi \frac{h \sinh \sqrt{\Delta}}{\sqrt{\Delta}}}{K(q, \xi)} \right]^2 \right] \tag{5.51}$$

sendo novamente o termo $C - D$ nulo na fase paramagnética. Com base nas condições de estabilidade obtidas, e lembrando que na fase paramagnética o parâmetro q responsável pela fase vidro de spin é nulo, é possível obter o limite da validade da solução paramagnética para qualquer valor de Γ . A partir da consideração de que o autovalor

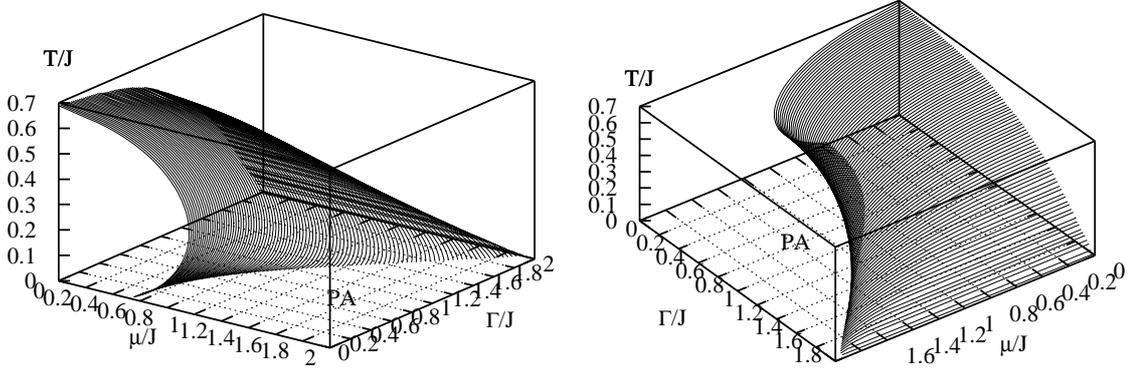


Figura 16: Diagrama 3D T/J x μ/J x Γ/J em dois ângulos, indicando uma região de limite da estabilidade paramagnética. Este resultado pode ser comparado com o diagrama em três dimensões, obtido através dos parâmetros de ordem, do capítulo anterior.

$\lambda_{at} = P - 2Q + R$ é nulo, e considerando que q é nulo, a seguinte condição é extraída:

$$\bar{q} = \frac{1}{\sqrt{2}\beta J} \quad (5.52)$$

Quando configura-se $\Gamma \neq 0$ na solução paramagnética, um novo valor do parâmetro \bar{q} , dependente de Γ , é obtido

$$\bar{q} = \left[\frac{\int D\xi \left(\frac{h_0 \cosh \sqrt{\Delta_0}}{\Delta_0} + \frac{(\beta\Gamma)^2 \sinh \sqrt{\Delta_0}}{\Delta_0^{3/2}} \right)}{K(\xi)} \right] \quad (5.53)$$

com $K(\xi)$ definido por

$$K(\xi) = \cosh(\beta\mu) + \int D\xi \cosh(\sqrt{\Delta_0}) \quad (5.54)$$

sendo

$$\Delta_0 = h_0^2 + (\beta\Gamma)^2 \quad (5.55)$$

com $h_0 = \beta J \sqrt{2\bar{q}}\xi$. Substituindo \bar{q} em (5.53), é obtida uma relação que define o limite da estabilidade da solução paramagnética

$$\mu_{at} = \frac{1}{\beta} \cosh^{-1} \left\{ \int D\xi \left[\left(\sqrt{2}\beta J \frac{h_{at}^2}{\Delta_{at}} - 1 \right) \cosh \sqrt{\Delta_{at}} + \sqrt{2}\beta J \frac{(\beta\Gamma)^2 \sinh \sqrt{\Delta_{at}}}{\Delta_{at}^{3/2}} \right] \right\} \quad (5.56)$$

no qual $h_{at} = \sqrt{\sqrt{2}\beta J}\xi$ e $\Delta_{at} = h_{at}^2 + (\beta\Gamma)^2$. O diagrama de fases da figura 16 é obtido através do μ_{at} da equação (5.56) para diversos valores de Γ . Este diagrama indica

o contorno da linha de segunda ordem que separa a região paramagnética da vidro de spin. A equação (5.56) para $\Gamma = 0$ se reduz à equação (5.39). A segunda condição de estabilidade é obtida através do autovalor λ_{\pm} de tal forma que

$$\bar{q} = \frac{f(\bar{q}, T, \Gamma) \pm \sqrt{f(\bar{q}, T, \Gamma) - 4/(\beta J)^2}}{2} \quad (5.57)$$

na qual $f(\bar{q}, T, \Gamma)$ é definido por

$$f(\bar{q}, T, \Gamma) = \frac{\int D\xi \left[\frac{1}{\Delta_0^2} \left[h_0^4 + 3(\beta\Gamma)^2 \left(1 - \frac{5h_0^2}{\Delta_0} \right) \right] \cosh \sqrt{\Delta_0} + \frac{3(\beta J)^2}{\Delta_0^{5/2}} \left[2h^2 - 1 + \frac{5h^2}{\Delta_0} \right] \sinh \sqrt{\Delta_0} \right]}{\int D\xi \left(\frac{h_0^2 \cosh \sqrt{\Delta_0}}{\Delta_0} + \frac{(\beta\Gamma)^2}{\Delta_0^{3/2}} \right)} \quad (5.58)$$

com $\Delta_0 = h_0^2 + (\beta\Gamma)^2$ e $h_0 = \beta J \sqrt{2\bar{q}\xi}$, sendo \bar{q} agora definido a partir da equação (5.57). Com isso, é possível encontrar as equações que determinam o segundo contorno do limite da estabilidade da solução paramagnética.

$$\mu_{\pm} = \frac{1}{\beta} \cosh^{-1} \left\{ \int D\xi \left[\left(\frac{h_{\pm}^2}{\Delta_{\pm} f(\bar{q}, T, \Gamma)} - 1 \right) \cosh \sqrt{\Delta_{\pm}} + \frac{(\beta\Gamma)^2 \sinh \sqrt{\Delta_{\pm}}}{f(\bar{q}, T, \Gamma) \Delta_{\pm}^{3/2}} \right] \right\} \quad (5.59)$$

sendo

$$h_{\pm} = \beta J \sqrt{f(\bar{q}, T, \Gamma) \pm \sqrt{f(\bar{q}, T, \Gamma) - 4/(\beta J)^2} \xi} \quad (5.60)$$

e $\Delta_{\pm} = h_{\pm}^2 + (\beta\Gamma)^2$.

O ponto de encontro T_{tc} , e os valores assumidos por \bar{q} acima e abaixo deste ponto para $\Gamma/J \neq 0$ resultam em

$$\begin{aligned} \bar{q} &< \frac{1}{\sqrt{2}\beta J} && \text{para } T/J > T_{tc}/J \\ \bar{q} &> \frac{f(T, \Gamma) - \sqrt{f(T, \Gamma) - 4/(\beta J)^2}}{2} && \text{para } T/J < T_{tc}/J \end{aligned} \quad (5.61)$$

para $\Gamma/J \neq 0$ não há solução paramagnética estável quando

$$\begin{aligned} \mu &< \mu_{at} && \text{para } T/J > T_{tc}/J \\ \mu &> \mu_- && \text{para } T/J < T_{tc}/J \end{aligned} \quad (5.62)$$

Finalmente, no limite da condição de estabilidade, em que as equações (5.52) e (5.57) se

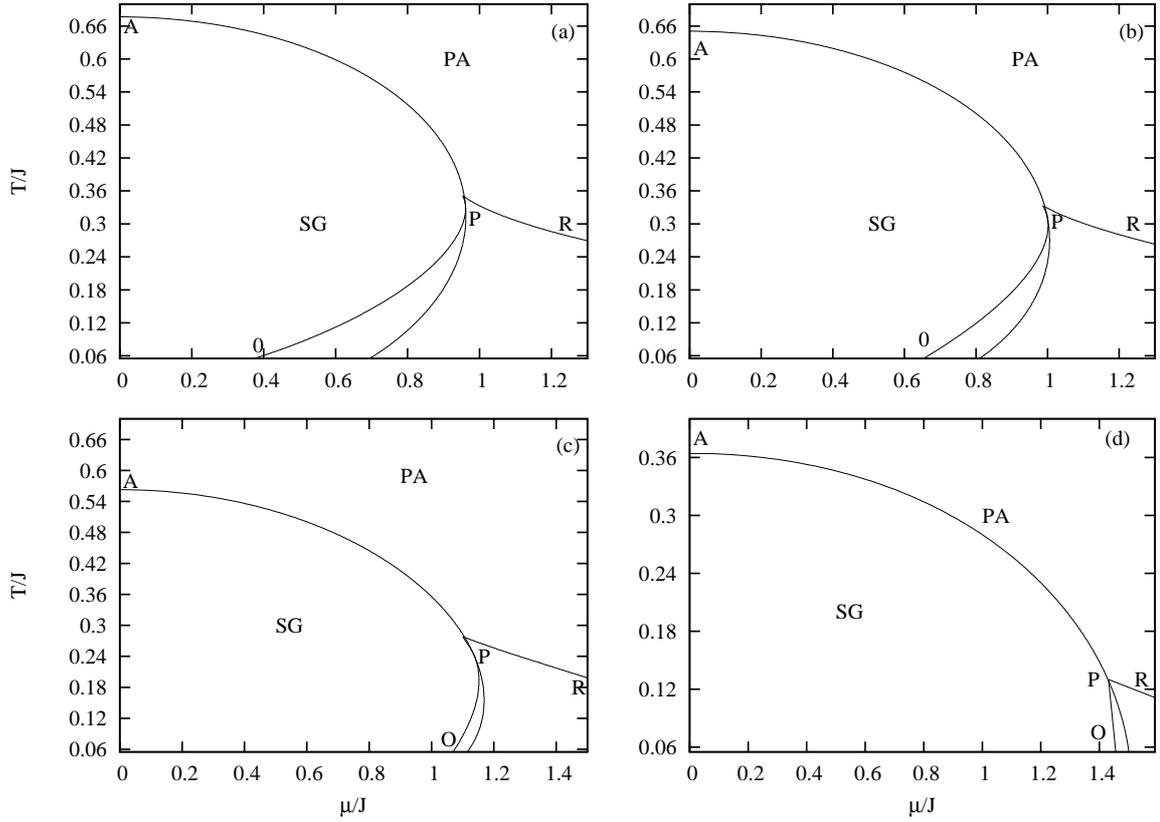


Figura 17: Diagramas de fase μ/J x T/J para diversos valores de Γ/J : $\Gamma/J = 0$, (b) $\Gamma/J = 0.5$, (c) $\Gamma/J = 1.0$ e (d) $\Gamma/J = 1.5$, indicando a região onde a solução paramagnética é instável. A partir destes diagramas define-se o ponto tricrítico para diversos valores de Γ/J .

igualam, o valor para a temperatura crítica com $\Gamma \neq 0$ é definido por:

$$T_{tc}/J = \frac{1}{3}\sqrt{2}f(T, \Gamma) \quad (5.63)$$

no qual $f(t, \Gamma)$ assume a seguinte forma:

$$f(t, \Gamma) = \frac{\int D\xi \left[\frac{1}{\Delta_p^2} \left(h_p^4 + 3(\beta\Gamma)^2 \left(1 - \frac{5h_p^2}{\Delta} \right) \right) \cosh \sqrt{\Delta_p} + \frac{3(\beta J)^2}{\Delta_p^{5/2}} \left(2h_p^2 - 1 + \frac{5h_p^2}{\Delta_p} \right) \sinh \sqrt{\Delta_p} \right]}{\int D\xi \left(\frac{h_p^2 \cosh \sqrt{\Delta_p}}{\Delta_p} + \frac{(\beta\Gamma)^2}{\Delta_p^{3/2}} \right)} \quad (5.64)$$

assumindo que $h_p = \sqrt{\sqrt{2}\beta J}$ e $\Delta_p = h_p^2 + (\beta\Gamma)^2$. A localização do potencial crítico é definido através da substituição da temperatura crítica T_{tc}/J em 5.56. Logo, a partir das equações (5.56) e (5.59), é obtido o contorno que indica a região de instabilidade paramagnética para diferentes valores de Γ .

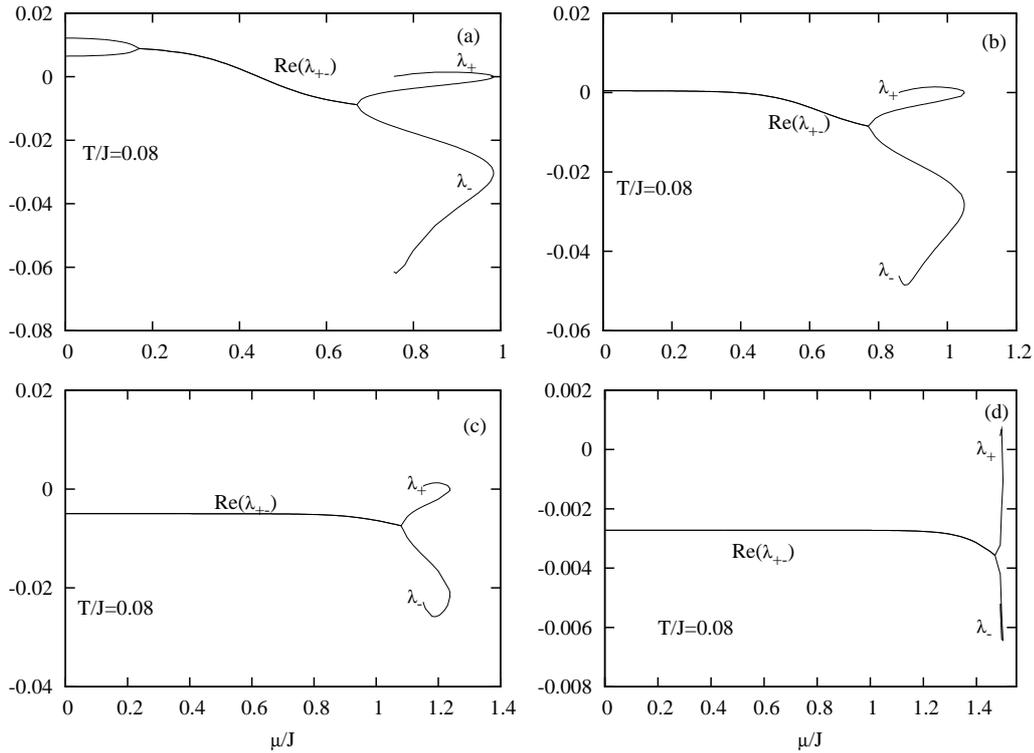


Figura 18: Os autovalores λ_{\pm} como uma função de μ/J para $T/J = 0.08$ com diversos valores de Γ/J : $\Gamma/J = 0$, (b) $\Gamma/J = 0.5$, (c) $\Gamma/J = 1.0$ e (d) $\Gamma/J = 1.5$. Diferentemente do modelo SK, o modelo fermiônico apresenta os autovalores λ_{\pm} negativos e até mesmo complexos na fase vidro de spin.

Na figura 17, são apresentados valores exatos do par P temperatura tricrítica T_{tc} e potencial químico tricrítico μ_{tc} obtidos através das condições de estabilidade na solução paramagnética. Para $\Gamma/J = 0$, abaixo do segmento APO , a solução paramagnética é totalmente instável. O ponto tricrítico para este valor de Γ/J é definido em $T_{tc}/J = 1/3$, com $\mu_c/J \simeq 0.96$ correspondente. Abaixo da linha OPR , surgem as múltiplas soluções. Para $\Gamma/J = 0.5$, diminui o intervalo onde ocorrem múltiplas soluções e, novamente, abaixo do segmento APO , a solução paramagnética é instável. O ponto tricrítico muda seu valor para aproximadamente $T_{tc}/J \simeq 0.309$ e $\mu_c/J \simeq 0.99$. Com $\Gamma/J = 1$, a diminuição do valor da temperatura crítica é acentuada e seu valor fica em torno de $T_{tc}/J \simeq 0.23$ com $\mu_c/J \simeq 1.13$ correspondente. Finalmente, para $\Gamma/J = 1.5$, o valor da temperatura crítica diminui ainda mais, permanecendo em torno de $T_{tc}/J \simeq 0.13$, com $\mu_c/J \simeq 1.42$ correspondente.

Na figura 19, é mostrado o parâmetro \bar{q} como uma função de μ/J para vários valores de Γ/J em uma temperatura na região de primeira ordem. Os resultados indicam a existência de múltiplas soluções também para o parâmetro \bar{q} na solução paramagnética.

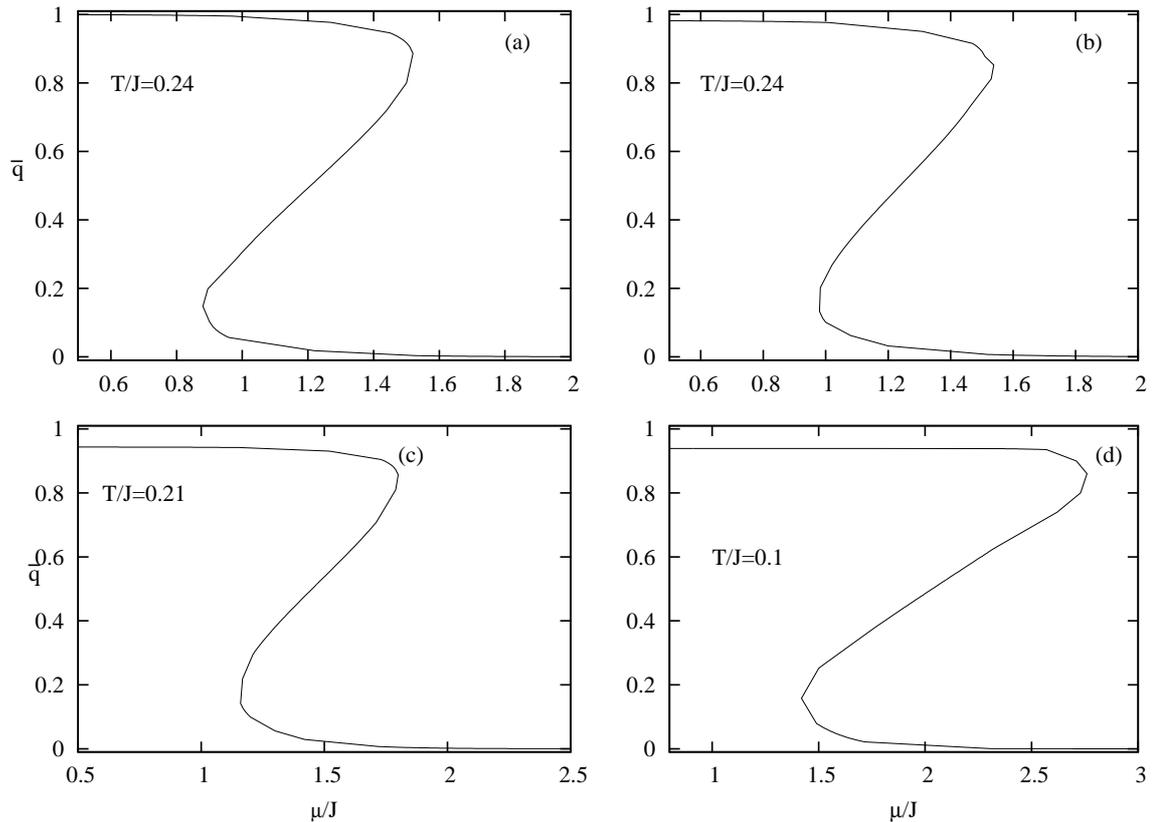


Figura 19: Parâmetro de ordem \bar{q} pelo potencial químico na fase paramagnética ($q = 0$) para vários valores de Γ/J e T/J fixo: (a) $\Gamma/J = 0$, (b) $\Gamma/J = 0.5$, (c) $\Gamma/J = 1.0$ e (d) $\Gamma/J = 1.5$. Para todos os valores de Γ/J somente o ramo inferior de \bar{q} , corresponde ao menor valor, encontra condições de estabilidade dos autovalores e condições termodinâmicas de extremização de potencial termodinâmico.

Há ainda a figura 18, onde as partes reais e complexas dos autovalores λ_{\pm} são plotados em função de μ/J . No intervalo do eixo $y < 0$, os autovalores são complexos e sua parte real também foi plotada. Para $\Gamma/J = 0$, a parte real dos autovalores torna-se negativa para grandes valores de μ/J . Com $\Gamma/J = 0.5$ ainda há uma parte real positiva, contudo, para valores maiores de Γ/J , o intervalo inteiro de μ/J possui autovalores reais negativos.

Nesta seção, como último resultado, são apresentados os diagramas de fase para diferentes valores de campo transversal. A análise da estabilidade proporciona uma visão detalhada da solução como simetria de réplicas. A marcação do ponto tricrítico e da linha de transição de primeira ordem foram feitas utilizando conceitos que foram introduzidos por (LAGE; ALMEIDA, 1982), mas discutidos em mais detalhe por Costa, Yokoi e Salinas e foram introduzidos no capítulo dois. De maneira geral, as linhas de primeira ordem foram demarcadas através da comparação das soluções paramagnética e vidro de spin.

Na figura 20(a), a linha pontilhada indica a exata transição de primeira ordem, em

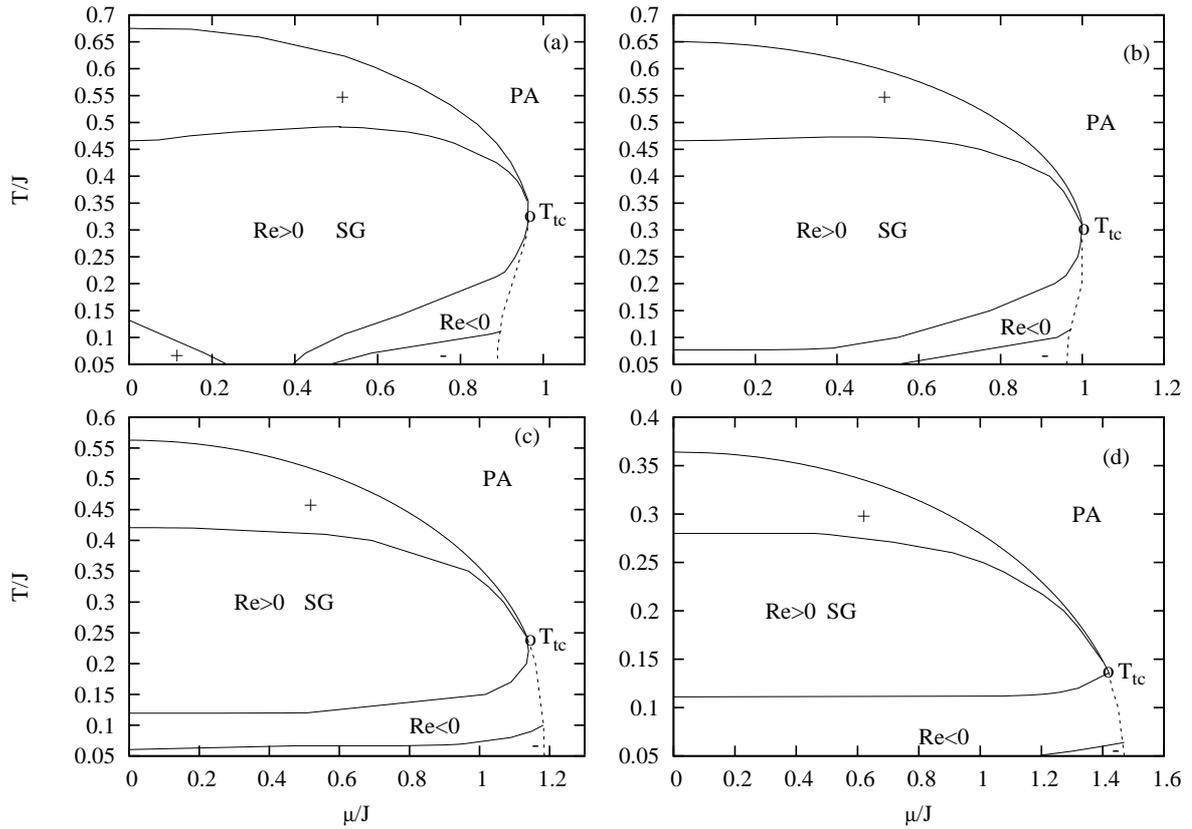


Figura 20: Diagramas de fase $\mu/J \times T/J$ para diversos valores de Γ/J :(a) $\Gamma/J = 0$,(b) $\Gamma/J = 0.5$,(c) $\Gamma/J = 1.0$ e (d) $\Gamma/J = 1.5$. Este diagramas fornecem uma visão detalhada da solução com simetria de réplicas na fase vidro de spin. A linha cheia superior é definida através do autovalor λ_{at} : abaixo desta linha a solução vidro de spin é instável. Na fase vidro de spin, os autovalores λ_{\pm} podem ser negativos e complexos. A linha pontilhada define a transição de primeira ordem e T_{tc} indica o ponto tricrítico.

contrapartida aos diagramas de fase apresentados no capítulo três, em que apenas a região com múltiplas soluções era demonstrada e não havia nenhum rigor em relação à marcação do ponto tricrítico. T indica o ponto tricrítico exato que separa as transições de primeira e segunda ordem, sendo a linha de segunda ordem indicada pela linha sólida superior. Observa-se que o replicon, o autovalor da equação (5.23), sempre é negativo abaixo da linha de transição que separa a fase paramagnética e vidro de spin, de tal forma que a solução vidro de spin sempre é instável mediante a simetria de réplicas. Além disso, na região indicada por +, os autovalores λ_{\pm} são reais e positivos. Por outro lado, em regiões indicadas por Re , os autovalores são complexos, sendo que as regiões rotuladas por $Re>0$ ou $Re<0$ definem se a parte real destes autovalores complexos é positiva ou negativa. Na região indicada por -, os autovalores são reais e negativos. Além disso, a figura 20 mostra algumas características vistas no capítulo anterior, como a dependência da temperatura crítica pelo campo transversal, sendo $(T_f)_{\Gamma/J=1.5} < (T_f)_{\Gamma/J=1} < (T_f)_{\Gamma/J=0.5} < (T_f)_{\Gamma/J=0}$

em $\mu/J = 0$ e a dependência do par temperatura tricrítica T_{tc} e o potencial químico equivalente a T_{tc} , denominado μ_{tc} com Γ/J . Observa-se também instabilidades adicionais dos autovalores λ_{\pm} nas figuras 20(b), 20(c) e 20(d) em relação a 20(a), desde que somente em 20(a) há uma pequena região com autovalores positivos a baixas temperaturas.

6 Conclusão

Este trabalho teve por objetivo analisar o modelo de spin Ising fermiônico na presença de um campo magnético transversal Γ e um potencial químico μ variável. Neste modelo fermiônico, os spins foram escritos como uma combinação bilinear de operadores de criação e destruição fermiônicos. Como estes operadores não comutam, a álgebra de Grassmann foi introduzida especialmente para tratar com esta não comutatividade. O cálculo da função de partição para tratar com a não comutatividade dos operadores no hamiltoniano utilizou o formalismo das integrais de caminho fermiônicas. Questões relacionadas à utilização do “ansatz” de simetria de réplicas neste modelo fermiônico, bem como as falhas manifestadas, por exemplo, no valor negativo para a entropia, foram levantadas.

Com isso, foi introduzido um estudo detalhado acerca da estabilidade da solução com simetria de réplicas no modelo fermiônico. Nesta análise, foram derivados três autovalores: $-\lambda_{at}$, λ_- e λ_+ . Em certas regiões, estes três autovalores se mostraram positivos, de tal forma que a solução encontrada no “ansatz” de simetria de réplicas era estável. No entanto, observou-se que a solução com simetria de réplicas é sempre instável devido ao autovalor negativo λ_{at} , conhecido como replicon, na fase vidro de spin, fato já ocorrido no modelo SK. Porém, além da instabilidade da solução vidro de spin devido ao replicon λ_{at} , foram descobertas instabilidades adicionais dos autovalores λ_{\pm} que não ocorriam no modelo clássico SK, já que agora os autovalores λ_{\pm} podiam ser negativos e até mesmo complexos na fase vidro apresentada pelo modelo ISGf. No entanto, tais instabilidades adicionais dos autovalores λ_{\pm} já haviam sido observadas no modelo clássico de Ghatak e Sherrington (GS). Os modelos ISGf e GS, apesar de utilizarem formalismos tão distintos, mostravam características semelhantes como, por exemplo, linhas de primeira ordem e pontos tricríticos, além do fator de instabilidade adicional citado anteriormente. Em ambos os modelos, observou-se que as estabilidades são afetadas pelo surgimento de um parâmetro de ordem extra. No caso do modelo fermiônico proposto, são as correlações $\langle \hat{S}(\omega) \hat{S}(\omega + \Omega) \rangle$ não unitárias as responsáveis pelo surgimento do parâmetro extra \bar{q} .

Dada a quantidade de características semelhantes entre os modelos ISGf e GS um

mapeamento proposto por Rosenow e Oppermann (1996) foi utilizado entre estes dois modelos. Este mapeamento possibilitou que a técnica utilizada por Lage e Almeida (1982), para localização do ponto tricrítico no modelo GS, pudesse ser introduzida no modelo ISGf. Além disso, também possibilitou a utilização da técnica apresentada por Costa, Yokoi e Salinas (1994) para demarcação da linha de primeira ordem no modelo ISGf. A partir de uma base sólida, foi possível avançar no problema vidro de spin fermiônico. Através da introdução do Γ , foi possível observar os efeitos da introdução de flutuações de natureza quântica em conjunto com as flutuações de carga providenciadas pelo potencial químico no problema vidro de spin.

Com isso, estes efeitos atuando em conjunto foram examinados em uma série de resultados numéricos que, em linhas gerais, demonstraram as seguintes características: surgimento de múltiplas soluções dos parâmetros de ordem e, conseqüentemente, transições de primeira ordem para diversos valores de campo transversal não nulos. Dependência da temperatura tricrítica T_{tc} e potencial químico crítico μ_{tc} com o campo transversal. Dependência da temperatura de transição T_f com o campo transversal juntamente com o potencial químico. Foi visto também que a ordem de grandeza da região de múltiplas soluções depende do campo transversal.

Igualmente, observou-se que para $\Gamma > \Gamma_c$ o sistema é sempre paramagnético, independentemente do potencial químico ou temperatura aplicada.

Além dos resultados relacionados às flutuações quânticas e de carga, foi levantada a questão da estabilidade do “ansatz” de simetria de réplicas. Em tais resultados, foi detectada uma pequena instabilidade adicional proveniente dos autovalores λ_{\pm} na região vidro de spin para diversos valores de Γ .

A partir do limite de validade das condições de estabilidade local na solução paramagnética, foram obtidos os contornos que separam as soluções paramagnéticas e vidro de spin. Também com auxílio das condições de estabilidade local, foi derivada uma relação entre o ponto tricrítico e o campo transversal Γ .

Os resultados obtidos neste trabalho foram comparados com aqueles obtidos em trabalhos prévios. Para $\Gamma = 0$, é recuperado o valor do ponto tricrítico primeiramente obtido por Rosenow e Oppermann (1996) no modelo fermiônico. Para $\mu = 0$, a linha de transição T_f e ponto crítico quântico $\Gamma_c = 2\sqrt{2}J$ obtidos por Theumann, Schmidt e Magalhães (2002) foram recuperados.

Dada a riqueza de detalhes envolvidos no problema Ghatak e Sherrington, é natural

dar continuidade ao estudo deste modelo como possibilidade para trabalhos posteriores. Para tal, o formalismo fermiônico será utilizado, o que possibilitará a introdução de outras competições com a fase vidro de spin, como supercondutividade, por exemplo. Além disso, este novo formalismo possibilitará a introdução de efeitos de natureza quântica ao modelo através do campo transverso. Posteriormente, o caráter anisotrópico e as flutuações de carga serão observados em conjunto sobre o problema vidro de spin. Há também a possibilidade de analisar a competição vidro de spin e antiferromagnetismo no modelo GS com duas sub-redes, trabalho primeiramente proposto por Korenblit e Shender (1985). Finalmente, há como possibilidade utilizar a técnica conhecida como quebra de simetria de réplicas (QSR), que corrige o problema da negatividade da entropia, e é apresentada por Parisi (1980).

APÊNDICE A

Neste apêndice, são derivados os autovalores e autovetores da matriz Hessiana \bar{G} (ver equação (5.20)), que é matriz relacionada as componentes das perturbações introduzidas na solução com simetria de réplicas. A derivação destes autovalores é exigida justamente pela solução com simetria de réplicas. Desde que esta matriz será diagonalizada, todos os autovalores devem ser positivos para garantir a estabilidade da solução do “ansatz” de simetria de réplicas. Logo, o objetivo principal é encontrar todos os autovalores associados aos autovetores e desta forma cobrir todo o espaço gerado pela matriz \bar{G} que tem $n + n(n-1)/2 = n(n+1)/2$ dimensões. Esta tarefa exige a escolha de autovetores apropriados, bem como a dimensionalidade produzida de cada um deles (ALMEIDA; THOULESS, 1978). Para isto, utiliza-se a equação dos autovalores

$$\bar{G}\vartheta = \lambda\vartheta, \quad \vartheta = \begin{pmatrix} \{\epsilon_\alpha\} \\ \{\eta_{\alpha\beta}\} \end{pmatrix} \quad (\text{A.1})$$

em que símbolo $\{\epsilon_\alpha\}$ são os vetores coluna que vão de ϵ_1 até ϵ_n e $\{\eta_{\alpha\beta}\}$ indo de η_{12} até $\eta_{n-1,n}$

A.1 Autovalor 1

Há três tipos de autovalores. O primeiro tratado na presente seção tem a forma $\epsilon_\alpha = a; \eta_{\alpha\beta} = b$. Os elementos da matriz \bar{G} são definidos pelas equações que vão desde (5.13) até (5.19), de tal forma que

$$\bar{G} = \begin{pmatrix} A & B & \dots & B & C & C & \dots & D & \dots & D \\ \vdots & \vdots \\ B & \dots & \dots & A & D & \dots & D & \dots & \dots & C \\ C & C & \dots & D & P & Q & \dots & Q & \dots & D \\ \vdots & \vdots \\ D & \dots & C & \dots & D & R & \dots & R & \dots & P \end{pmatrix} \quad (\text{A.2})$$

a primeira linha da parte superior da matriz \bar{G} associada com o autovetor tem a forma

$$\left(A \ B \ B \ \dots \ B \ C \ \dots \ C \ D \ D \ \dots \ D \right) (\mu_1) = \lambda(\mu_1) \quad (\text{A.3})$$

sendo que ϑ_1 é

$$\vartheta_1^t = \left(a \ \dots \ a \ b \ \dots \ b \right)$$

tal que a primeira linha da equação dos autovalores $\bar{G}\mu_1 = \lambda\mu_1$ seja

$$Aa + (n-1)Ba + (n-1)Cb + \frac{1}{2}(n-1)(n-2)Db = \lambda_1 a. \quad (\text{A.4})$$

Os elementos A e B da primeira linha estão relacionados com a , que tem dimensão n . Como A tem apenas um a associado, o restante, que é $(n-1)$ vezes a , fica relacionado com B . Da mesma forma, os elementos C e D estão vinculados com b , que tem $n(n-1)/2$ dimensões. O elemento C está associado $(n-1)$ vezes com b , restando $1/2(n-2)(n-3)$ vezes b vinculado ao elemento D . A primeira linha da metade inferior da mesma equação dos autovalores, correspondente a $\eta_{\alpha\beta}$, associada com o autovetor tem a forma

$$\left(C \ C \ D \ \dots \ D \ P \ Q \ \dots \ Q \ D \ \dots \ D \right) (\mu_1) = \lambda(\mu_1) \quad (\text{A.5})$$

sendo que ϑ_1 foi definido anteriormente. A parte inferior produz a seguinte relação:

$$2Ca + (n-2)Da + Pb + 2(n-1)Qb + \frac{1}{2}(n-2)(n-3)Rb = \lambda_1 a \quad (\text{A.6})$$

Na relação acima, os elementos C e D estão relacionados com a , sendo que C tem duas vezes a associados e D tem $(n-2)$ vezes a vinculados, completando a dimensão de a , que é n . P tem um b associado e Q tem $2(n-2)$ vezes b vinculados, restando para R $1/2(n-2)(n-3)$ vezes b associados para completar o espaço de b . O autovalor λ_1 pode ser obtido através de um sistema de equações lineares provenientes das equações (A.4) e (A.6), o que resulta em dois autovalores não degenerados:

$$\lambda_1 = \frac{X \pm \sqrt{Y^2 + Z}}{2} \quad (\text{A.7})$$

sendo

$$X = A + (n-1)B + P + 2(n-2)Q + 1/2(n-2)(n-3)R \quad (\text{A.8})$$

$$Y = A + (n - 1)B - P - 2(n - 2)Q - 1/2(n - 2)(n - 3)R \quad (\text{A.9})$$

$$Z = 2(n - 1) \{2C + (n - 2)D\}^2 \quad (\text{A.10})$$

Este autovalor no limite de $n \rightarrow 0$ se reduz a

$$\lambda_1 = \frac{1}{2} \left\{ A - B + P - 4Q \pm \sqrt{(A - B - P + 4Q - 3R)^2 - 8(C - D)^2} \right\} \quad (\text{A.11})$$

A.2 Autovalor 2

A próxima escolha do vetor ϑ_2 tem $\epsilon_\theta = a$ (para uma réplica específica θ) e $\epsilon_\alpha = b$ para $\alpha \neq \theta$, $\eta_{\alpha\beta} = c$ se $\alpha, \beta = \theta$ e $\eta_{\alpha\beta} = d$ para $\alpha, \beta \neq \theta$, no qual este vetor tem a forma $(a, b, \dots, b, c, \dots, c, d, \dots, d)$. Encontrando a equação dos autovalores para a linha superior e inferior e utilizando a condição de ortogonalidade na qual $\vartheta_1 \vartheta_2 = 0$, onde ϑ_1^t tem a forma $(x, x, \dots, x, y, y, \dots, y)$ com x e y não nulos, encontra-se um sistema de equações lineares facilmente calculável

$$(A - B - \lambda)a + (n - 1)(C - D)c = 0 \quad (\text{A.12})$$

$$\frac{n - 2}{n - 1}(C - D)a + [P + (n - 4)Q - (n - 3)R - \lambda]c = 0. \quad (\text{A.13})$$

A condição de a e c são não nulos resulta nos seguintes autovalores

$$\lambda_2 = \frac{X \pm \sqrt{Y^2 + Z}}{2} \quad (\text{A.14})$$

sendo que, neste caso,

$$X = (A - B) + P + (n - 4)Q - (n - 3)R \quad (\text{A.15})$$

$$Y = A - B - P - (n - 4)Q + (n - 3)R \quad (\text{A.16})$$

$$Z = (n - 2)(C - D)^2 \quad (\text{A.17})$$

No limite de $n \rightarrow 0$, este valor se degenera com λ_1 . Há n possíveis escolhas da réplica θ , de tal forma que é possível escolher n diferentes autovetores μ_2 . Dentro do subespaço n ,

nem todos os autovetores ϑ_1 e ϑ_2 podem ser independentes. No entanto, não pode haver mais do que n vetores independentes neste espaço. Portanto, são obtidos até n vetores independentes formados a partir de ϑ_1 e ϑ_2 . Relembrando o fato de que λ_1 e λ_2 são duplamente degenerados, pode-se afirmar que os autovetores ϑ_1 e ϑ_2 formam um espaço dimensional $2n$.

A.3 Autovalor 3

O terceiro tipo de autovetor ϑ_3 tem $\epsilon_\theta = a$, $e_\nu = b$ (para duas réplicas específicas θ, ν) e $\epsilon_\alpha = c$ para α diferente de θ ou ν , e $\eta_{\theta\nu} = c$, $\eta_{\theta\alpha} = \eta_{\nu\alpha} = d$, caso contrário $\eta_{\alpha\beta} = e$. Utilizando as condições de ortogonalização $\vartheta_2\vartheta_3 = 0$, $\vartheta_1\vartheta_2 = 0$ e $\vartheta_1\vartheta_3 = 0$, são alcançadas as condições necessárias para obtenção do valor de λ_3 .

$$Pc + 2(n-2)Qd + \frac{1}{2}(n-2)(n-3)Re = \lambda_3c \quad (\text{A.18})$$

com

$$d = -c/(n-2) \quad e = -2d/(n-3) \quad e = 2c/(n-2)(n-3). \quad (\text{A.19})$$

Logo

$$\lambda_3 = P - 2Q + R \quad (\text{A.20})$$

Como $a = b = 0$, a parte superior da equação dos autovalores corresponde a $\{\epsilon_\alpha\}$ é nula. Portanto, a dimensão dos autovetores para λ_3 corresponde somente aos elementos $\eta_{\alpha\beta}$, que é $n(n-1)/2$. Contudo, n vetores já foram utilizados na relação λ_1, λ_2 e a real degenerescência, ou o número de vetores independentes para este terceiro autovetor, é $n(n-3)/2$. Junto com a degenerescência de λ_1 e λ_2 , completa-se todo o espaço de $n(n+1)/2$ vetores.

APÊNDICE B

B.1 Cálculo das Correlações

Os valores das correlações são as seguintes:

$$16\langle S_\alpha^4 \rangle = \left. \frac{\partial^4 \Lambda_\alpha(q, z)}{\partial H_\alpha^4} \right|_{H_\alpha=0} \quad (\text{B.1})$$

sendo

$$\Lambda_\alpha(q, z) = \int Dz \prod_\alpha \left[e^{\beta\mu_\alpha} \left(\cosh(\beta\mu_\alpha) + \int D\xi_\alpha \cosh(\sqrt{\Delta_\alpha}) \right) \right] \quad (\text{B.2})$$

e Δ_α

$$\Delta_\alpha = h_\alpha^2 + (\beta\Gamma)^2 \quad (\text{B.3})$$

com h_α definido por

$$h_\alpha = \beta J \sqrt{q} z + \beta J \sqrt{\chi} \xi_\alpha \quad (\text{B.4})$$

A equação (B.2) pode ser reescrita da seguinte forma

$$\begin{aligned} \Lambda_\alpha(q, z, H_\alpha) &= \int Dz \prod_{\alpha' \neq \alpha} \left[e^{\beta\mu'_{\alpha'}} \left(\cosh(\beta\mu'_{\alpha'}) + \int D\xi_{\alpha'} \cosh(\sqrt{\Delta_{\alpha'}}) \right) \right] \\ &\times \left[e^{\beta\mu_\alpha} \left(\cosh(\beta\mu_\alpha) + \int D\xi_\alpha \cosh(\sqrt{\Delta_\alpha}) \right) \right] \end{aligned} \quad (\text{B.5})$$

em que $\Delta_{\alpha'}$ é

$$\Delta_{\alpha'} = (\beta J \sqrt{q} z + \beta J \sqrt{\chi} \xi_{\alpha'} + H_{\alpha'})^2 + (\beta\Gamma)^2. \quad (\text{B.6})$$

Substituindo (B.6) em (B.1), derivando em relação a H_α e tomando o limite de $n \rightarrow 0$, chega-se à seguinte expressão:

$$\begin{aligned} 16\langle S_\alpha^4 \rangle &= \int Dz \int D\xi \frac{1}{K(q, \xi)} \\ &\times \left\{ \frac{1}{\Delta^2} \left[h^4 + 3\beta^2 \Gamma^2 \left(1 - \frac{5h^2}{\Delta} \right) \cosh \sqrt{\Delta} \right] + \frac{1}{\Delta^{3/2}} \left[2h^2 - 1 + \frac{5h^2}{\Delta} \right] \sinh \sqrt{\Delta} \right\}. \end{aligned} \quad (\text{B.7})$$

A variável $\Delta(q, z)$ agora é

$$h = \beta J \sqrt{2qz} + \beta J \sqrt{2\chi\xi}. \quad (\text{B.8})$$

A segunda correlação é definida por

$$16\langle(S_\alpha S_\beta)^2\rangle = \left. \frac{\partial \Lambda_\alpha(q, z)}{\partial H_\alpha^2 \partial H_\beta^2} \right|_{H_\gamma, \beta=0} \quad (\text{B.9})$$

Seguindo o procedimento padrão anteriormente apresentado

$$\begin{aligned} \Lambda_\alpha(q, z, H_\gamma, H_\beta) &= \int Dz \prod_{\alpha \neq \alpha', \beta} [e^{\beta\mu_\alpha} (\cosh(\beta\mu_\alpha) + \int D\xi_\alpha \cosh(\sqrt{\Delta_\alpha}))] \\ &\times [e^{\beta\mu_{\alpha'}} (\cosh(\beta\mu_{\alpha'}) + \int D\xi_{\alpha'} \cosh(\sqrt{\Delta_{\alpha'}}))] [e^{\beta\mu_\beta} (\cosh(\beta\mu_\beta) + \int D\xi_\beta \cosh(\sqrt{\Delta_\beta}))] \end{aligned} \quad (\text{B.10})$$

derivando em relação a $H_{\alpha'}$ e H_β e tomando o limite de $n \rightarrow 0$, a seguinte expressão é encontrada:

$$16\langle(S_\alpha S_\beta)^2\rangle = \int Dz \left[\frac{\int D\xi \left(\frac{h^2 \cosh \sqrt{\Delta}}{\Delta} + \frac{(\beta\Gamma) \sinh \sqrt{\Delta}}{\Delta^{3/2}} \right)}{K(q, \xi)} \right]^2 \quad (\text{B.11})$$

com $\Delta(q, z)$ definido anteriormente. As correlações restantes serão apenas apresentadas aqui, já que o procedimento para encontrá-las é o mesmo utilizado anteriormente:

$$16\langle(S_\alpha)^2 S_\beta S_\delta\rangle = \int Dz \left[\left(\int D\xi \frac{\left(\frac{h^2 \cosh \sqrt{\Delta}}{\Delta} + \frac{(\beta\Gamma) \sinh \sqrt{\Delta}}{\Delta^{3/2}} \right)}{K(q, \xi)} \right) \left(\frac{\int D\xi \frac{h \sinh \sqrt{\Delta}}{\Delta^{1/2}}}{K(q, \xi)} \right)^2 \right] \quad (\text{B.12})$$

$$16\langle S_\alpha S_\beta S_\gamma S_\delta\rangle = \int Dz \left[\int D\xi \left(\frac{h \sinh \sqrt{\Delta}}{\Delta^{1/2}} \right) \frac{1}{K(q, \xi)} \right]^4 \quad (\text{B.13})$$

sendo

$$K(q, \xi) = \cosh(\beta\mu) + \int D\xi \cosh \sqrt{\Delta(q, \xi)}. \quad (\text{B.14})$$

APÊNDICE C

Neste apêndice, é efetuada a soma sobre as frequências de Matsubara.

$$\ln I(z, \xi, q, \bar{q}) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left[\ln \left(i\omega_n + y + \Delta^{\frac{1}{2}} \right) + \ln \left(i\omega_n + y - \Delta^{\frac{1}{2}} \right) \right] \quad (\text{C.1})$$

escrevendo $\ln I(z, \xi, q, \bar{q})$ em um formato apropriado, a solução pode ser encontrada através do método dos resíduos. Para isso, a expressão C.1 é derivada em relação a y , resultando na seguinte equação:

$$\frac{\partial \ln I(z, \xi, q, \bar{q})}{\partial y} = \sum_n \left[\frac{1}{i\omega_n + y + \sqrt{\Delta}} + \frac{1}{i\omega_n + y - \sqrt{\Delta}} \right] \quad (\text{C.2})$$

A somatória pode prontamente ser substituída por uma integral no plano complexo

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} F(i\omega_n) = \sum_n \frac{1}{i\omega_n - \varepsilon} = -\frac{1}{2\pi i} \oint_{C'} F(\omega) f(\omega) d\omega \quad (\text{C.3})$$

com

$$F(\omega) = \frac{1}{i\omega + y \pm \sqrt{\Delta}} \quad (\text{C.4})$$

sendo $f(\omega)$ a função de Fermi, que possui singularidade em todo seu eixo imaginário

$$f(\omega) = \frac{1}{e^{\omega} + 1} = \infty \quad (\text{C.5})$$

para todo $\omega_n = (2n+1)\pi$ e $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$. A validade da equação C.3 é obtida por meio do método dos resíduos (ver Mattuck (1976, p. 250)). A integral em C , que corresponde ao plano ω (o plano dado pelos eixos real e imaginário), é igual à integral do resíduo em torno de C' no eixo imaginário, que engloba os múltiplos ímpares de π no eixo, além dos resíduos dos pólos de $F(\omega)$ no eixo real. Se a integral $F(\omega)f(\omega) \rightarrow 0$ quando $C \rightarrow \infty$, é possível escrever

$$\oint_C F(\omega)f(\omega)d\omega = \oint_{C'} F(\omega)f(\omega)d\omega + 2\pi i \sum \text{resíduos de } F(\omega)f(\omega) \quad (\text{C.6})$$

Desta forma, $\sum(i\omega_n)$ pode ser definida com a soma dos resíduos de $F(\omega)f(\omega)$ para os pólos de $F(\omega)$ no eixo real, de tal forma que a integral C.3 assume o seguinte formato:

$$\begin{aligned} \oint_{C'} F(\omega)f(\omega)d\omega &= - \oint_{C'} F(\omega)d\omega \frac{1}{2}[f^+(\omega) - f^-(\omega)] \\ &= - \oint_{C'} F(\omega) \frac{1}{2} \tanh\left(\frac{\omega}{2}\right) d\omega. \end{aligned} \quad (\text{C.7})$$

Logo, a equação (C.3) resulta em

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} F(i\omega_n) = \frac{1}{2\pi i} \oint_{C'} F(\omega) \tanh\left(\frac{\omega}{2}\right) d\omega \quad (\text{C.8})$$

A partir das equações (C.6) e (C.7), as somas da equação (C.2) resultam em

$$\frac{\partial \ln I(z, \xi, q, \bar{q})}{\partial y} = \frac{1}{2} \tanh\left(\frac{y + \sqrt{\Delta}}{2}\right) + \frac{1}{2} \tanh\left(\frac{y - \sqrt{\Delta}}{2}\right). \quad (\text{C.9})$$

O caminho inverso é tomado, e a integral sobre y na equação C.9 é feita resultando em

$$\ln I(z, \xi, q, \bar{q}) = \ln \cosh\left(\frac{y + \sqrt{\Delta}}{2}\right) + \ln \cosh\left(\frac{y - \sqrt{\Delta}}{2}\right) \quad (\text{C.10})$$

a qual pode ser reescrita como

$$I(z, \xi, q, \bar{q}) = \frac{\cosh(y) + \cosh \sqrt{\Delta}}{2}. \quad (\text{C.11})$$

Referências

- ALMEIDA, J. R. L. de; THOULESS, D. J. Stability of the Sherrington-Kirkpatrick solution of a spin glass model. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, v. 11, n. 5, p. 983–990, 1978.
- BINDER, K. Theory of first-order phase transitions. *Reports on Progress in Physics*, v. 50, n. 7, p. 783–859, 1987. Disponível em: <<http://stacks.iop.org/0034-4885/50/783>>.
- BINDER, K.; YOUNG, A. P. Spin glass: Experimental facts, theoretical concepts, and open questions. v. 58, n. 4, p. 801–927, Out. 1986.
- BRAY, A. J.; MOORE, M. A. Replica theory of quantum spin glass. *J. Phys. C:Solid St. Phys.*, n. 13, p. L655–60, Jun. 1980.
- COSTA, F. A. da; YOKOI, C. S. O.; SALINAS, S. R. A. First-order transition in a spin-glass model. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, v. 27, n. 10, p. 3365–3372, 1994.
- DUMAS, J. et al. Spin-glass properties of a crystalline transition-metal oxide: $(Ti_{1-x}V_x)_2O_3$. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 20, n. 9, p. 3913–3925, Nov 1979. Disponível em: <http://prola.aps.org/abstract/PRB/v20/i9/p3913_1>.
- EDWARDS, S. F.; ANDERSON, P. W. Theory of spin glasses. *Journal of Physics F: Metal Physics*, v. 5, n. 5, p. 965–974, 1975.
- FELDMANN, H.; OPPERMANN, R. Replica symmetry breaking solution for the fermionic Ising spin glass and the Ghatak-Sherrington model. *Cond-Mat*, Out. 1999.
- FISCHER, K. H.; HERTZ, J. A. *Spin Glasses*. EUA: Oxford, 1991.
- GHATAK, S. K.; SHERRINGTON, D. Crystal field effects in a general S Ising spin glass. *J. Phys. C: Solid State*, Institut Laue Langevin, 156X, France, Fev. 1977.
- ISHII, H.; YAMAMOTO, T. Effect of a transverse field on the spin glass freezing in the Sherrington-Kirkpatrick model. *J. Phys. C:Solid St. Phys.*, n. 18, p. 6225–6237, Abr. 1984.
- KASUYA, T. A theory of metallic ferro and antiferromagnetism on zener's model. *Progress of Theoretical Physics*, v. 16, n. 1, p. 45–57, Jun. 1956.
- KORENBLIT, I. Y.; SHENDER, E. F. Spin glass in an Ising two-sublattice magnet. *Sov. Phys. JETP*, American Institute of Physics, v. 62, n. 5, p. 1030, 1985.
- LAGE, E. J. S.; ALMEIDA, J. R. L. de. Stability conditions of generalised Ising spin glass model. *J. Phys. C: Solid State*, Departamento de Física, Universidade Federal de Pernambuco, Ago. 1982.

- MATTUCK, R. D. *A guide to Feynman Diagrams in the many-body problem*. [S.l.]: Dover Publications, Inc., New York, 1976.
- NEGELE, J. W.; ORLAND, H. *Quantum Many-Particle Systems*. Department of Physics, Massachusetts Institute of Technology: Addison-Wesley Publishing Company, 1988.
- NISHIMORI, H. *Statistical Physics of Spin Glass and Information Processing, An introduction*. Department of Physics, Tokyo Institute of Technology: Clarendon Press, Oxford, 2001.
- PARISI, G. The order parameter for spin glasses: a function on the interval 0-1. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, v. 13, n. 3, p. 1101–1112, 1980. Disponível em: <<http://stacks.iop.org/0305-4470/13/1101>>.
- PEREZ, I. C.; SHERRINGTON, D. Exact mappings between fermionic Ising spin-glass and classical spin-glass models. *Physical Review B (Condensed Matter and Materials Physics)*, APS, v. 72, n. 10, p. 104427, 2005.
- ROSENOW, B.; OPPERMANN, R. Tricritical point of Ising spin glass with charge fluctuations. *Physical Review Letters*, Germany, v. 77, n. 8, Ago. 1996.
- RUDERMAN, M. A.; KITTEL, C. Indirect exchange coupling of nuclear magnetic moments by conduction electrons. *Physical Review*, v. 96, n. 1, p. 99–102, Out. 1954.
- SHERRINGTON, D.; KIRKPATRICK, S. Infinite-ranged models of spin-glasses. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 17, n. 11, p. 4384–4403, Jun. 1978.
- THEUMANN, A.; GUSMÃO, M. V. Quantum Ising spin glass. *J. Phys. C: Solid St. Phys.*, v. 105A, n. 6, Out 1984.
- THEUMANN, A.; SCHMIDT, A. A.; MAGALHÃES, S. G. The Ising spin glass in a transverse field revisited. results of two fermionic models. *Physica A*, Instituto de Física. UFRGS RS, UFSM RS, Brasil, Fev. 2002.
- WU, W. et al. From classical to quantum glass. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 67, n. 15, p. 2076–2079, Out. 1991.
- YOSIDA, K. Magnetic properties of Cu-Mn alloys. *Physical Review*, v. 106, n. 4, p. 893–898, Jun. 1957.