

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

VIDRO DE SPIN FERMIÔNICO EM DUAS  
SUB-REDES COM CAMPO TRANSVERSO:  
SOLUÇÃO COM QUEBRA DA SIMETRIA DE  
RÉPLICAS ‡

TESE DE DOUTORADO

Fábio Mallmann Zimmer

Santa Maria, RS, Brasil

2007

---

‡Trabalho financiado pelo Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico CNPq.

**VIDRO DE SPIN FERMIÔNICO EM DUAS SUB-REDES  
COM CAMPO TRANSVERSO: SOLUÇÃO COM QUEBRA  
DA SIMETRIA DE RÉPLICAS**

**por**

**Fábio Mallmann Zimmer**

Tese apresentada ao curso de Doutorado 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  
**Doutor em Física.**

**Orientador: Sergio Garcia Magalhães**

**Santa Maria, RS, Brasil**

**2007**

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

A Comissão Examinadora, abaixo assinada,  
aprova a Tese de Doutorado

**VIDRO DE SPIN FERMIÔNICO EM DUAS SUB-REDES  
COM CAMPO TRANSVERSO: SOLUÇÃO COM QUEBRA  
DA SIMETRIA DE RÉPLICAS**

elaborada por  
**Fábio Mallmann Zimmer**

como requisito parcial para obtenção do grau de  
**Doutor em Física**

**COMISSÃO EXAMINADORA:**

**Sergio Garcia Magalhães, Dr.**  
(Presidente/Orientador)

**Eduardo Miranda, Dr. (UNICAMP)**

**Miguel Angelo Cavalheiro Gusmão, Dr. (UFRGS)**

**Celso Arami Marques da Silva, Dr. (UFSM)**

**Luiz Fernando Schelp, Dr. (UFSM)**

Santa Maria, 01 de junho de 2007.

## **Agradecimentos**

Agradeço a todas as pessoas que de alguma forma colaboraram para a realização deste trabalho e em particular:

- ao professor Sergio Garcia Magalhães pelo incentivo, pela orientação e pela sua dedicação;
- aos meus colegas do Laboratório de Mecânica Estatística e Física da Matéria Condensada do Departamento de Física da UFSM;
- aos meus familiares, pelo apoio durante todas as etapas da minha vida;
- a Daniele, pelo incentivo, apoio e dedicação, que foram muito importantes para a realização deste trabalho;
- ao CNPq, pelo apoio financeiro.

# RESUMO

Tese de Doutorado  
Programa de Pós-Graduação em Física  
Universidade Federal de Santa Maria

## **VIDRO DE SPIN FERMIÔNICO EM DUAS SUB-REDES COM CAMPO TRANSVERSO: SOLUÇÃO COM QUEBRA DA SIMETRIA DE RÉPLICAS**

AUTOR: FÁBIO MALLMANN ZIMMER

ORIENTADOR: SERGIO GARCIA MAGALHÃES

Data e Local da Defesa: Santa Maria, 01 de junho de 2007.

Este trabalho apresenta uma versão fermiônica para o modelo de longo alcance de vidro de spin (VS) de Ising com campo transversal  $\Gamma$ . O modelo é analisado na estrutura de uma única rede (VS quântico) e na estrutura de duas sub-redes (competição VS/antiferromagnetismo (AF)). Nos dois casos, as interações de troca são variáveis aleatórias que seguem distribuições de probabilidade gaussianas (interações SK). Na estrutura de duas sub-redes, os spins de sub-redes diferentes podem interagir desordenadamente através de um acoplamento do tipo SK com uma média antiferromagnética. Neste caso, também se podem admitir interações desordenadas entre spins de mesmas sub-redes. O formalismo das integrais de caminho fermiônicas com campos de Grassmann e a aproximação estática são usados para estudar estes problemas de VS quântico. A desordem é calculada pelo método das réplicas, em que as aproximações com simetria de réplicas (SR) e com um passo de quebra da simetria de réplicas (IP-QSR) são empregadas.

Os resultados do modelo em uma rede sugerem que o esquema de 1P-QSR de Parisi pode ser usado para melhorar a descrição da fase VS quântico. Nos modelos de duas sub-redes, um campo magnético paralelo  $H$  quebra a simetria entre as sub-redes, destruindo a ordem AF. Porém,  $H$  pode favorecer a fase mista não ergódica (VS+AF) caracterizando uma região de quebra da simetria de réplicas (QSR) assimétrica. Nesta região, a interação desordenada  $V$  entre spins de mesmas sub-redes aumenta a diferença das soluções de QSR apresentadas em cada uma das sub-redes. A temperatura de congelamento  $T_f$  exibe um aumento mais acentuado com  $H$  quando  $V$  cresce. Uma transição de fase descontínua entre as soluções com SR e 1P-QSR pode surgir na presença de um acoplamento médio ferromagnético entre spins de mesma sub-rede. O campo  $\Gamma$  introduz um mecanismo quântico de “flip” nos spins, o qual suprime as ordens magnéticas conduzindo suas temperaturas críticas a pontos críticos quânticos. Logo, os campos  $H$  e  $\Gamma$  produzem efeitos que competem sobre  $T_f$ . Os resultados sugerem que as flutuações quânticas não restauram a solução com SR em nenhuma das sub-redes. Entretanto, na região de QSR assimétrica,  $\Gamma$  pode produzir uma solução com SR estável em qualquer temperatura finita para uma sub-rede particular, enquanto a outra sub-rede ainda apresenta solução com QSR para o caso especial em que somente os spins de sub-redes idênticas possuem interações desordenadas.

Palavras-chave: vidro de spin quântico; quebra da simetria de réplicas; antiferromagnetismo

# ABSTRACT

Tese de Doutorado  
Programa de Pós-Graduação em Física  
Universidade Federal de Santa Maria

## **TWO-SUBLATTICE FERMIONIC ISING SPIN GLASS MODEL WITH A TRANSVERSE FIELD: REPLICA SYMMETRY BREAKING SOLUTION**

AUTHOR: FÁBIO MALLMANN ZIMMER  
ADVISER: SERGIO GARCIA MAGALHÃES  
Local and Date: Santa Maria, june, 2007.

In the present work, a fermionic infinite-range Ising spin glass (SG) model with a transverse field  $\Gamma$  is studied. The model is analyzed in a one-lattice structure (quantum SG) and in a two-sublattice structure (SG/antiferromagnetism (AF) competition). In these two cases, the exchange interactions are random variables that follow Gaussian probability distributions (SK interactions). For the two-sublattice model, spins of distinct sublattices can couple with an SK-type interaction with an AF average. For a general case of this model, the disordered interactions can also occur with spins of same sublattices. The problem is formulated in a Grassmann path integral formalism within the static ansatz. The replica method is applied to treat the disorder, in which the replica symmetry (RS) and one-step replica symmetry breaking (1P-RSB) approximations are used.

The one-lattice model results provide evidences that the 1S-RSB can be used to improve the physical description of the ordered quantum SG phase treated by the replica method. In the two-sublattice model, a parallel magnetic field  $H$  breaks the symmetry of the sublattices. It destroys the antiferromagnetic (AF) order, but it can favor the nonergodic mixed phase (SG+AF) characterizing an asymmetric RSB region. In this region, intra-sublattice disordered interactions  $V$  increase the difference between the RSB solutions of each sublattice. The freezing temperature ( $T_f$ ) shows a higher increase with  $H$  when  $V$  enhances. A discontinuous phase transition from the replica symmetry (RS) solution to the RSB solution can appear with the presence of an intra-sublattice ferromagnetic average coupling. The  $\Gamma$  field introduces a quantum spin flip mechanism that suppresses the magnetic orders leading them to quantum critical points. Results suggest that the quantum effects are not able to restore the RS solution. Therefore, the presence of both fields,  $\Gamma$  and  $H$ , produces effects that are in competition on  $T_f$  for instance. However, in the asymmetric RSB region,  $\Gamma$  can produce a stable RS solution at any finite temperature for a particular sublattice while the other sublattice still presents RSB solution for the special case in which only the intra-sublattice spins couple with disordered interactions.

Keywords: quantum spin glass; replica symmetry breaking; antiferromagnetism

# SUMÁRIO

<b>1</b>	<b>Introdução</b>	<b>8</b>
<b>2</b>	<b>Vidros de Spin</b>	<b>12</b>
2.1	Caracterização dos vidros de spin . . . . .	12
2.2	Conceitos teóricos sobre Vidro de Spin . . . . .	17
2.2.1	Solução de Parisi . . . . .	19
2.3	Vidro de spin e antiferromagnetismo . . . . .	21
2.3.1	Algumas observações experimentais . . . . .	21
2.3.2	Modelos teóricos . . . . .	22
2.4	Vidro de spin quântico . . . . .	23
<b>3</b>	<b>Métodos</b>	<b>29</b>
3.1	Formalismo das integrais de caminho fermiônicas . . . . .	29
3.1.1	Segunda Quantização . . . . .	29
3.1.2	Integrais de caminho para férmions . . . . .	31
3.2	Formulação fermiônico para o vidro de spin de Ising em um campo transversal . . . . .	36
3.2.1	Modelo . . . . .	36
3.2.2	Solução com simetria de réplicas . . . . .	42
3.2.3	Solução com quebra da simetria de réplicas . . . . .	45
3.3	Resultados com quebra da simetria de réplicas: uma única rede . . . . .	48
<b>4</b>	<b>Vidro de spin quântico em duas sub-redes</b>	<b>53</b>
4.1	Modelo KS quântico: formulação fermiônica . . . . .	53
4.1.1	Solução com simetria de réplicas: duas sub-redes . . . . .	57

4.1.2	Solução com quebra da simetria de réplicas: duas sub-redes . . . . .	59
4.1.2.1	Esquema de Parisi com 1P-QSR em duas sub-redes . . . . .	60
4.1.2.2	Esquema modulado de quebra da simetria de réplicas . . . . .	62
4.2	Modelo KS generalizado quântico: formulação fermiônica . . . . .	66
<b>5</b>	<b>Resultados</b>	<b>71</b>
5.1	Resultados para o modelo KS em campo transversal . . . . .	71
5.1.1	Resultados com simetria de réplicas . . . . .	71
5.1.2	Resultados com quebra da simetria de réplicas . . . . .	79
5.1.3	Discussão dos resultados . . . . .	83
5.2	Resultados para o modelo KS generalizado em campo transversal . . . . .	86
5.2.1	Quebra da simetria de réplicas assimétrica com $J \neq 0$ e $V \neq 0$ . . . . .	88
5.2.2	Quebra da simetria de réplicas assimétrica com $J = 0$ e $V \neq 0$ . . . . .	90
5.2.3	Diagramas de fase . . . . .	95
<b>6</b>	<b>Considerações finais</b>	<b>98</b>
	<b>Apêndice A – Estados coerentes</b>	<b>101</b>
	<b>Apêndice B – Susceptibilidade Magnética</b>	<b>105</b>
	B.1 Simetria de réplicas . . . . .	105
	<b>Apêndice C – Expansão para temperatura de Néel</b>	<b>106</b>
	<b>Apêndice D – Estabilidade da solução com simetria de réplicas</b>	<b>108</b>
	<b>Referências</b>	<b>111</b>



# 1 INTRODUÇÃO

A descoberta do comportamento vidro de spin (VS) na década de 70 em ligas magneticamente diluídas tem estimulado interesses teóricos e experimentais no estudo deste fenômeno (Fischer e Hertz (1991)). O VS é caracterizado pelo congelamento desordenado dos momentos magnéticos localizados (spins) em temperaturas abaixo de uma temperatura crítica  $T_f$ . Esse congelamento desordenado ocorre com uma competição das interações (frustração), tal que as ordens de longo alcance ferromagnética e antiferromagnética não são favorecidas, gerando, assim, um estado magnético não trivial que é altamente meta-estável e irreversível (Binder e Young (1986)).

A teoria do vidro de spin quântico (Bray e Moore (1980)) tem sido objeto de vários estudos recentes, principalmente pela complexidade em descrever a fase ordenada VS. Esse problema torna-se ainda mais instigante quando o comportamento VS e as interações de longo alcance, como a ordem antiferromagnética (AF), são considerados. O congelamento da ordem AF pode dar origem a processos físicos complexos. Por exemplo, a relação entre flutuações quânticas (/térmicas), desordem, magnetismo frustrado e outras interações têm sido característica essencial de alguns sistemas de férmions pesados (Dickey et al. (2003)) e supercondutores de altas temperaturas (Scalapino (1995)). Tal relação pode conduzir a um ponto crítico quântico e a um desvio no comportamento de líquido de Fermi (não líquido de Fermi). Particularmente, trabalhos teóricos de Miranda e Dobrosavljevic (2001) e Castro-Neto e Jones (2000) propõem que a presença de desordem pode ser a origem do comportamento não líquido de Fermi nestes compostos de férmions pesados. Desse modo, é importante estabelecer uma estrutura teórica sólida para tratar o VS (ou a competição VS/AF) em conjunto com outros processos físicos tais como efeito Kondo ou supercondutividade, na mesma base e em temperaturas baixas, em que os efeitos quânticos tornam-se relevantes. O presente trabalho não pretende discutir essa específica classe de problemas fortemente correlacionados, mas se concentra nas propriedades magnéticas quânticas da formulação fermiônica do modelo VS de Ising em presença de campo transversal (Theumann, Schmidt e Magalhães (2002)). Este modelo é estudado tanto na estrutura de uma única rede (somente VS), quanto na estrutura de duas sub-redes (VS com acoplamento AF). Em ambos os casos, a formulação fermiônica tem se mostrado uma ferramenta im-

portante, pois, além de possibilitar um estudo detalhado do problema VS quântico (ou a competição VS/AF), ela também permite representar de um modo natural os elétrons que participam de outros processos físicos tais como efeito Kondo e supercondutividade. Neste sentido, têm sido realizados trabalhos envolvendo VS (/AF) e efeito Kondo (Magalhães, Zimmer e Coqblin (2006a), Magalhães et al. (2006), Magalhães, Zimmer e Krebs (2005), Magalhães, Zimmer e Coqblin (2006b), Magalhães et al. (2004) e Magalhães et al. (2003)) e VS (/AF) e supercondutividade (Zimmer e Magalhães (2004), Magalhães e Zimmer (2005) e Magalhães et al. (2006)).

O vidro de spin (VS) quântico descrito pelo modelo de longo alcance de Sherrington e Kirkpatrick (1975) em um campo transverso  $\Gamma$  tem sido extensivamente estudado como um modelo VS que apresenta um ponto crítico quântico. Entretanto, este modelo de VS quântico é tema constante de resultados discordantes em relação à estabilidade local (de Almeida e Thouless (1978)) da solução com simetria de réplicas (SR) (ver referência Santos e Theumann (2005) e Seção 2.4). Por exemplo, o modelo Sherrington-Kirkpatrick clássico é bem descrito pela solução de quebra da simetria de réplicas proposta por Parisi (1980). Esta solução considera a fase VS como uma situação não ergódica, na qual a energia livre é caracterizada com muitos vales termodinamicamente equivalentes separados por barreiras de energias infinitamente altas. Nesse contexto, surge uma questão relativa ao tunelamento quântico através destas barreiras, ou seja, se esse tunelamento pode ou não restaurar a SR quando os efeitos quânticos são inclusos ( $\Gamma > 0$ ).

Por outro lado, a competição VS/AF pode ser estudada teoricamente com um modelo introduzido por Korenblit e Shender (1985) (modelo KS) inicialmente para spins clássicos. O modelo KS considera uma estrutura de duas sub-redes com spins de Ising e uma interação do tipo Sherrington-Kirkpatrick somente entre spins de sub-redes diferentes. Uma generalização do modelo KS, denominada de modelo KS generalizado (KSG), admite interações desordenadas do tipo Sherrington-Kirkpatrick entre spins de sub-redes distintas e entre spins de mesmas sub-redes (Fyodorov, Korenblit e Shender (1987) e Takayama (1988)). Nos modelos KS e KSG, um campo magnético paralelo  $H$  quebra a simetria entre as sub-redes destruindo a fase AF, ao mesmo tempo em que  $H$  pode favorecer a frustração (região de quebra da simetria de réplicas (QSR)). Logo, a temperatura de congelamento  $T_f(H)$  pode aumentar com  $H$  (Korenblit e Shender (1985)). A QSR com esta assimetria causada pelo campo  $H$  é chamada de região de QSR assimétrica, em que as ordens VS e AF coexistem (fase mista). Entretanto, uma versão quântica para os modelos KS e KSG tem recebido uma menor atenção e é um dos temas do presente trabalho (ver Seções 2.3 e 2.4 para mais detalhes).

O objetivo deste trabalho é investigar teoricamente o comportamento do VS quântico descrito no formalismo fermiônico. Para tal, dividimos o problema em duas partes: a primeira estuda uma versão fermiônica para o modelo de VS de Ising (VSI) em um campo transversal  $\Gamma$ , na qual as propriedades quânticas da região de QSR são analisadas no esquema de um passo de QSR (1P-QSR) proposto por Parisi (1980). Na segunda parte, os modelos de duas sub-redes KS e KSG são investigados na presença de um campo  $\Gamma$ . Essas versões quânticas dos modelos KS e KSG são estudadas na representação fermiônica dos operadores de spin. O foco nos modelos de VS quântico em duas sub-redes está nos diagramas de fase (usa simetria de réplicas) e nas propriedades da região não ergódica VS, que são avaliadas com 1P-QSR. Em particular, são analisados os efeitos produzidos pelas desordens intra-sub-rede e intersub-rede na região de QSR assimétrica. Nessa região, um estudo envolvendo a capacidade dos efeitos quânticos de restaurarem as SR é realizado.

As funções de partição do presente trabalho são calculadas no formalismo das integrais de caminho fermiônicas, que é usado para tratar com a não comutatividade dos operadores de spin (Theumann et al. (2002)), os quais são representados por combinações bilineares de operadores de férmions (Theumann e Gusmão (1984) e Oppermann e Muller-Groeling (1993)). A representação fermiônica para os spins possui quatro estados quânticos por sítio (estados com zero, um ou dois férmions por sítio), sendo dois deles com autovalores não magnéticos para o operador  $\hat{S}^z$ , que não pertencem ao usual espaço de spins  $\pm 1/2$ . Esta representação é chamada de modelo 4S. Para recuperar a representação no espaço de spins  $\pm 1/2$ , uma restrição é introduzida para manter somente os autovalores magnéticos de  $\hat{S}^z$ . Esta versão do problema é denominada de modelo 2S (Theumann et al. (2002)). Os modelos 2S e 4S são discutidos neste trabalho, em que a média sobre a desordem é efetuada com o método das réplicas, e a aproximação estática é adotada para as funções de correlação spin-spin (discutida na Seção 2.4). Nesse procedimento, a energia livre é obtida para os seguintes casos: SR e 1P-QSR.

A tese está organizada na seguinte forma: o capítulo 1 destina-se à introdução. No capítulo 2, é apresentado um resumo das principais propriedades experimentais e caracterizações teóricas relacionadas ao comportamento VS. Além disso, é realizada uma breve discussão da competição VS e ordem antiferromagnética. Na Seção 2.4, é feita uma discussão detalhada do problema VS quântico e das principais questões que este trabalho visa a responder.

O capítulo 3 está dedicado à apresentação do formalismo das integrais de caminho fermiônica e sua aplicação no modelo de VS fermiônico em presença de campo transversal. Nesse caso, é realizado uma revisão dos principais resultados da solução com simetria de

réplicas (SR) e um estudo detalhado da solução com um passo de quebra da simetria de réplicas (1P-QSR), que investiga a possibilidade do tunelamento quântico restaurar a SR na formulação fermiônica do modelo de VS quântico.

No capítulo 4, são apresentados os cálculos analíticos, em que os modelos de duas sub-redes, KS e KSG, são estudados em presença de um campo transversal nas aproximações de SR e 1P-QSR.

No capítulo 5, são analisados e discutidos os resultados obtidos para os modelos KS e KSG quânticos. Finalmente, o capítulo 6 é reservado para as conclusões e considerações finais sobre os resultados apresentados nos capítulos anteriores.

## 2 VIDROS DE SPIN

Este segmento tem como objetivo caracterizar o comportamento dos vidros de spin (seção 2.1) e introduzir algumas técnicas usadas para descrever teoricamente a fase vidro de spin (VS) (seção 2.2). O capítulo também contém uma breve abordagem da competição entre as ordens VS e antiferromagnética (seção 2.3). O VS quântico e as dificuldades relacionadas com a teoria do VS de Ising em campo transversal são discutidas na seção 2.4.

### 2.1 Caracterização dos vidros de spin

Várias técnicas experimentais têm sido utilizadas para determinar o comportamento dos vidros de spin. Experimentalmente, um sistema vidro de spin (VS) possui propriedades peculiares, das quais se destacam as seguintes: o congelamento dos momentos magnéticos abaixo de uma temperatura crítica  $T_f$  bem definida (temperatura de congelamento) e, portanto, ocorre um pico agudo na susceptibilidade dependente de frequências baixas (Figura (1)); ausência de ordem magnética periódica de longo alcance abaixo de  $T_f$ ; remanência magnética que decai lentamente com o tempo para temperaturas  $T < T_f$ , quando existe mudança do campo magnético; abaixo da temperatura de congelamento, a magnetização e a susceptibilidade DC são fortemente dependentes das condições do experimento, isto é, os resultados experimentais obtidos para essas grandezas físicas após o resfriamento em campo nulo são diferentes dos obtidos na presença de campo.

A Figura (1) mostra a susceptibilidade magnética alternada AC para diversos sistemas com comportamento VS. Na Figura (1), verifica-se um pico característico na susceptibilidade, que indica a temperatura de congelamento dos spins e é uma evidência experimental da magnetização espontânea por sítio  $\langle S_i \rangle$  diferente de zero no estado de congelamento. Uma análise mais detalhada do comportamento da susceptibilidade dependente da frequência foi feita no painel da direita da Figura (1), que mostra um pequeno arredondamento no pico da susceptibilidade, o qual é deslocado a temperaturas inferiores à medida que a frequência decresce.

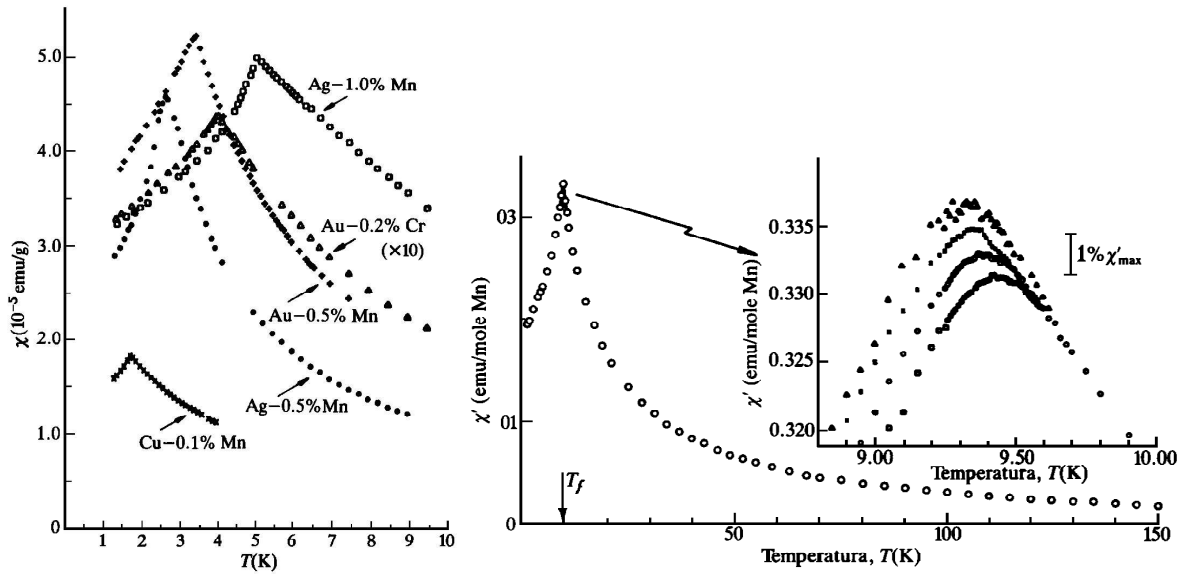


Figura 1: O painel da esquerda mostra a susceptibilidade AC em função da temperatura para diversos compostos VS (FISCHER; HERTZ, 1991). O painel da direita exibe a susceptibilidade AC em função da temperatura para o composto Cu-0,94% Mn em campo zero, com as seguintes frequências: 1,33 kHz ( $\square$ ), 234 Hz ( $\circ$ ), 10,4 Hz ( $\times$ ) e 2,6 Hz ( $\triangle$ ) (MYDOSH, 1996).

Outra característica experimental importante de todos os VS está relacionada aos efeitos de remanência magnética abaixo da temperatura  $T_f$ . Para mostrar isso, a Figura (2) exibe gráficos da magnetização e da remanência, que dependem fortemente da maneira como os experimentos são realizados. A Figura (2-a) mostra a magnetização DC para dois processos de medida do resfriamento da amostra considerada. Primeiro, a temperatura é reduzida sem campo externo de  $T \gg T_f$  para  $T \ll T_f$ ; após, um campo  $dc$  de valor baixo é aplicado e a magnetização assume valores positivos (ver na Figura (2-a) os caminhos  $1 \rightarrow 2$  e  $2 \rightarrow 3$ ). Quando a temperatura aumenta, a curva da magnetização segue os caminhos  $3 \rightarrow 4 \rightarrow 5$ . Se a amostra é resfriada, mas na presença do campo constante, a magnetização percorre de  $5 \rightarrow 4$ ; entretanto, para  $T$  abaixo de  $T_f$ , vai de  $4 \rightarrow 6$ , e a magnetização torna-se praticamente independente da temperatura. Os vidros de spin apresentam uma magnetização remanescente, que decai lentamente com o tempo depois do campo ser desligado. Esta também depende de como a amostra foi preparada. A Figura (2-b) mostra duas medidas da magnetização remanescente para valores altos de campo. Primeiro, a amostra é resfriada de uma temperatura  $T \gg T_f$  para  $T \ll T_f$  em campo nulo. Após o resfriamento, o campo é aplicado durante determinado período de tempo e depois desligado, possibilitando traçar o gráfico da magnetização remanescente isotérmica (IRM). Esse processo pode ser realizado aplicando o campo em  $T \gg T_f$  e resfriando a amostra para  $T \ll T_f$ ; então, desliga-se o campo. O resultado apresenta a

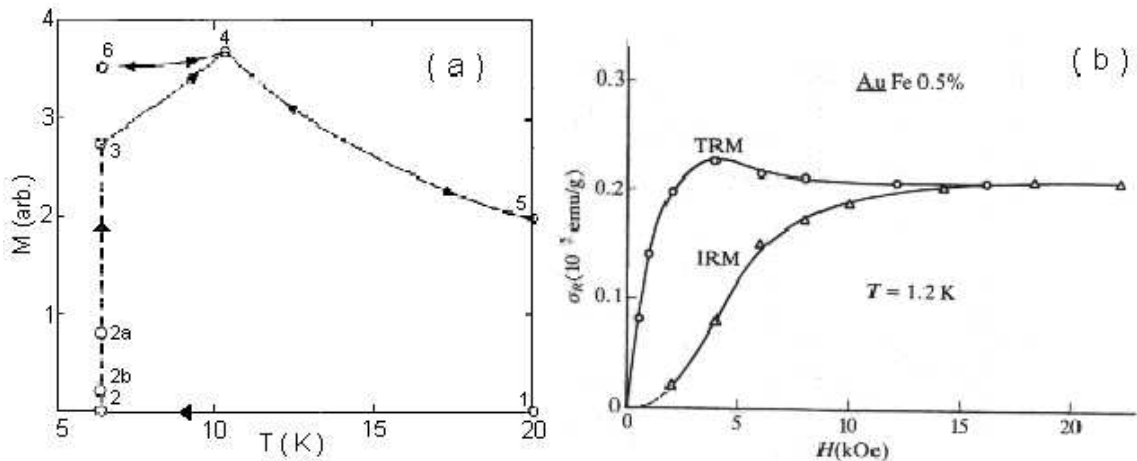


Figura 2: (a) Magnetização versus temperatura para Ag-2.6% Mn. O ciclo (1 → 2 → 3 → 4) é para a amostra resfriada em campo zero e (5 → 4 → 6 → 4 → 5) é para o resfriamento com campo (CHAMBERLIN et al., 1982). (b) Magnetização Termoremanescente (TRM) dependente do campo para Au-0,5% Fe obtida após resfriar a amostra de  $T > T_f$  para  $T = 1,2 \text{ K} < T_f$  em um campo H. Magnetização remanescente isotérmica (IRM) obtida quando o campo H aplicado em  $T = 1,2 \text{ K}$  é desligado (FISCHER; HERTZ, 1991).

magnetização termoremanescente (TRM), que difere da IRM (ver Figura (2-b)).

Os comportamentos exibidos nas Figuras (1) e (2) são característicos de um sistema que relaxa, isto é, a magnetização evolui no tempo devido às barreiras de potencial que separam diferentes estados, os quais diferem um do outro por uma pequena quantidade de energia livre. Então, o processo de resfriamento em campo zero pode levar a condição de não equilíbrio correspondente a estados locais meta-estáveis (Fischer e Hertz (1991)).

Após uma breve caracterização experimental do comportamento dos vidros de spins, é descrito como um sistema pode apresentar este estado. Compostos que exibem a fase VS canônica são metais nobres (Au, Ag, Cu, Pt), considerados como hospedeiros, nos quais se dilui aleatoriamente íons de metais de transição (Mn, Fe) como sendo impurezas magnéticas. Os momentos das impurezas produzem uma polarização dos elétrons de condução do metal hospedeiro ao seu redor, a qual é positiva para algumas distâncias e negativa para outras. Quando se adiciona outra impureza, o spin da impureza “sente” um campo magnético local gerado pela polarização dos elétrons de condução do hospedeiro, tendendo a alinhar-se ao longo desse campo. Como as impurezas estão dispostas aleatoriamente, algumas das interações são positivas, favorecendo o alinhamento paralelo dos momentos magnéticos (ferromagnético) e outras negativas, favorecendo o alinhamento antiparalelo dos momentos (antiferromagnético). Assim, o espalhamento dos elétrons de condução pela presença dos spins das impurezas leva a uma interação de troca indireta,

conhecida como RKKY <sup>1</sup> :

$$J(\vec{R}) = J_0 \frac{\cos(2\vec{K}_F \vec{R} + \phi_0)}{(\vec{K}_F \vec{R})^3}, \quad (2.1)$$

com  $J_0$  e  $\phi_0$  constantes e  $K_F$  o número de onda de Fermi do metal hospedeiro.

Considerando a interação RKKY entre os momentos magnéticos aleatoriamente distribuídos, não é possível encontrar um único alinhamento dos spins que satisfaça simultaneamente todos os vínculos. Com isso, o sistema apresenta outra característica fundamental: a frustração. Portanto, os materiais recém citados apresentam desordem na posição das impurezas e competição nas interações, ingredientes básicos para produzir um estado VS.

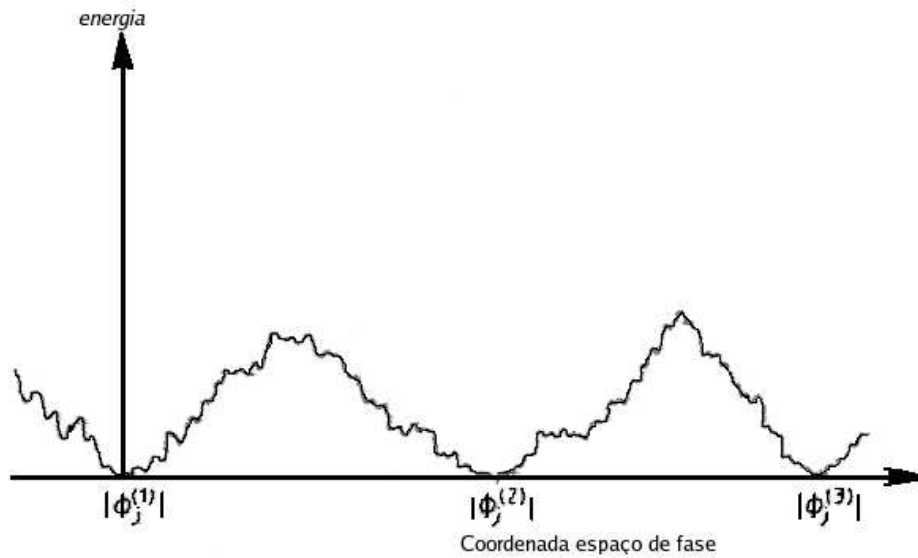


Figura 3: Representação qualitativa da energia livre de um sistema vidro de spin ( $T < T_f$ ) em função de uma coordenada do espaço de fases (BINDER; YOUNG, 1986).

O comportamento VS é caracterizado por uma quantidade grande de estados metaestáveis (mínimos locais da energia livre) e um estado fundamental altamente degenerado (Binder e Young (1986)). Nesse sentido, é sugestivo analisar como ocorre a quebra da ergodicidade<sup>2</sup> na fase VS, ou seja, em temperaturas  $T$  acima de  $T_f$  o sistema é ergódico. Entretanto, para  $T$  abaixo de  $T_f$ , acontece a quebra de ergodicidade, em que o espaço de fases é dividido em muitos vales (o número de vales vai ao infinito no limite termodinâmico  $N \rightarrow \infty$ ) separados por barreiras infinitamente altas de energia livre (quando  $N \rightarrow \infty$ ), subdividindo o espaço de fases em vários estados (vales) inacessíveis termodina-

<sup>1</sup>A denominação RKKY se deve a Ruderman, Kittel, Kasuya e Yosida, os quais estudaram esse tipo de interação.

<sup>2</sup>A hipótese ergódica diz que um sistema em equilíbrio se encontra com uma probabilidade proporcional a  $\exp(-E/k_b T)$  (Gibbs-Boltzmann) em qualquer de suas possíveis configurações do espaço de fases. O sistema é não ergódico quando está restrito a uma parte da configuração do espaço de fases.



micamente uns aos outros. Esse modo de visualizar a forma de energia livre é denominado de “picture” de muitos vales, que está representada na Figura (3). Cada vale ( $T < T_f$ ) é caracterizado por uma magnetização média por sítio não nula, porém com flutuação de sinal e intensidade de sítio para sítio, de tal modo que a magnetização global é zero. Ainda, em cada vale, existem muitos estados meta-estáveis separados por barreiras infinitamente altas de energia livre. Quando a temperatura decresce ( $T < T_f$ ), os vales se dividem novamente em um número maior de novos vales menores, alguns separados por barreiras infinitas de energia livre, ocorrendo uma nova “quebra de ergodicidade”. Esse processo de fragmentação do espaço de fases em vales menores acontece continuamente com o decréscimo da temperatura. Para  $T > T_f$ , a estrutura de muitos vales desaparece, ocorrendo um único mínimo para a energia livre.

Um dos conceitos fundamentais dos vidros de spin é a frustração, a qual descreve a incapacidade de o sistema satisfazer simultaneamente todas as interações. O conceito de frustração pode ser facilmente entendido através do exemplo de uma rede quadrada composta de quatro spins de Ising com interações independentes e iguais a  $\pm J$  (ver Figura (4)). Para um número par de interações positivas, como mostra a Figura (4-a), é possível encontrar uma configuração dos spins que satisfaça todas as interações impostas (rede não frustrada). Isto é, escolhendo um específico spin e movendo-se no sentido horário ao redor da rede, consegue-se determinar os valores dos próximos spins de forma que, ao fechar o ciclo, não se encontra conflito nas interações. Por outro lado, quando um número ímpar de interações positivas for considerado (Figura (4-b)), ao percorrer a rede, encontra-se que o último spin não consegue satisfazer todos os vínculos, caracterizando uma rede frustrada. Logo, a rede frustrada tem um grau extra de degenerescência, além da inversão de todos os spins.

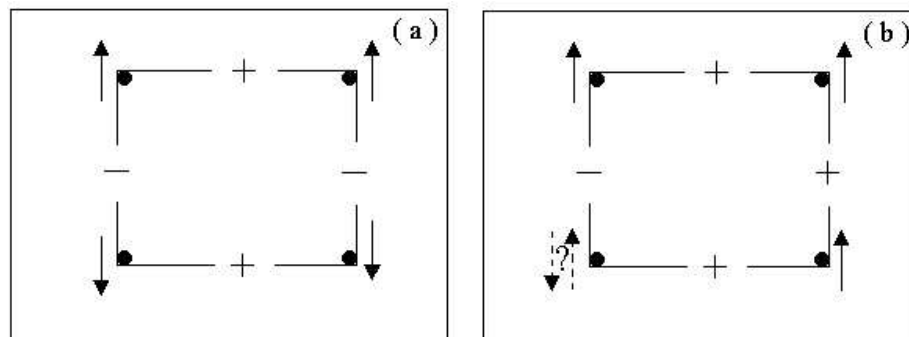


Figura 4: Rede quadrada com quatro spins. Os sinais + e - referem-se aos coeficientes de troca  $+J$  (interação ferromagnética) e  $-J$  (interação antiferromagnética), respectivamente. (a) rede não frustrada; (b) rede frustrada.

De acordo com a exposição acima, a frustração é reconhecida por causar o efeito que admite um estado fundamental altamente degenerado nos sistemas de VS, criando, assim, um espaço de fases que pode ser visualizado com o auxílio da “picture” de muitos vales.

## 2.2 Conceitos teóricos sobre Vidro de Spin

Os estudos teóricos do vidro de spin foram impulsionados pelo trabalho pioneiro realizado por Edwards e Anderson (1975). Os autores supuseram que, em lugar da aleatoriedade nas posições dos spins, as interações de troca são desordenadas e os spins posicionados nos sítios de um rede translacionalmente invariante. Posteriormente, Sherrington e Kirkpatrick (1975) tornaram a teoria de Edwards e Anderson exatamente solúvel, assumindo interações desordenadas de longo alcance entre os spins. Esse modelo é conhecido como modelo SK cujo Hamiltoniano é dado por:

$$H = - \sum_{ij} J_{ij} S_i S_j , \quad (2.2)$$

onde a soma é sobre todos os pares distintos de sítios,  $J_{ij}$  segue uma distribuição de probabilidades Gaussiana e a variável de spin  $S_j = \pm 1$ .

O modelo SK é analiticamente solúvel e amplamente utilizado nas teorias de campo médio para o estudo do VS. Portanto, a seguir, são apresentadas as principais técnicas empregadas na solução do modelo SK.

As informações termodinâmicas do sistema desordenado definido pela expressão (2.2) são obtidas realizando-se dois tipos distintos de médias: a média termodinâmica usual, denotada por  $\langle \dots \rangle$ , e a média sobre a distribuição dos parâmetros aleatórios  $J_{ij}$  (desordem), denotada por  $\langle \dots \rangle_{J_{ij}}$ , que, muitas vezes, é chamada de média configuracional. Assim, a energia livre  $F$  do sistema representado pela Equação (2.2) é dada pela média configuracional de logaritmo da função de partição:

$$F \equiv -k_B T \langle \ln \mathcal{Z}(J_{ij}) \rangle_{J_{ij}} = -k_B T \int dJ_{ij} P(J_{ij}) \ln \mathcal{Z}(J_{ij}), \quad (2.3)$$

sendo  $P(J_{ij})$  a distribuição de probabilidade da interação  $J_{ij}$ .

A média da Equação (2.3) é calculada com o auxílio do método das réplicas (Edwards e Anderson (1975)), que consiste em substituir o logaritmo de  $\mathcal{Z}(J_{ij})$  por

$$\ln \mathcal{Z}(J_{ij}) = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{\mathcal{Z}^n(J_{ij}) - 1}{n} . \quad (2.4)$$

A origem da igualdade (2.4) é verificada se:  $\mathcal{Z}^n = \exp(n \ln \mathcal{Z}) \simeq 1 + n \ln \mathcal{Z}$  com  $n \rightarrow 0$ . Para qualquer  $n$  inteiro positivo, o  $\mathcal{Z}^n(J_{ij})$  pode ser expresso em termos de  $n$  réplicas idênticas e não interagentes do sistema real

$$\mathcal{Z}^n(J_{ij}) = \prod_{\alpha=1}^n \mathcal{Z}_{\alpha}(J_{ij}) = \text{Tr} \exp \left( -\frac{1}{k_B T} \sum_{\alpha=1}^n H(S^{\alpha}, J_{ij}) \right), \quad (2.5)$$

sendo  $\mathcal{Z}_{\alpha}(J_{ij})$  a função de partição da réplica  $\alpha$ . Desse modo, a realização da média sobre a desordem é transferida do sistema original ao sistema replicado, podendo conduzir a um problema efetivo com interações entre réplicas, em que a continuação analítica de  $n \rightarrow 0$  deve ser tomada como o último passo do procedimento.

O método das réplicas permite tratar a desordem do problema, porém, nesse contexto, ainda é preciso caracterizar a fase VS. Para esse objetivo, é importante definir um parâmetro de ordem, que, quando distinto de zero, indica a presença do comportamento VS.

Edwards e Anderson (1975) introduziram o parâmetro de ordem  $q_{EA}$  para caracterizar o estado VS. Esse parâmetro verifica se os spins permanecem “congelados”, isto é, se existe uma probabilidade finita de observar os spins apontando nas mesmas direções após um longo período de tempo. Em termos matemáticos, considerando a média sobre a desordem,  $q_{EA}$  é dado por

$$q_{EA} = \lim_{t \rightarrow \infty} \lim_{N \rightarrow \infty} \langle \langle S_i(0) S_i(t) \rangle_t \rangle_{J_{ij}}, \quad (2.6)$$

sendo que  $\langle \cdot \cdot \rangle_t$  denota uma média temporal.

A Equação (2.6) interpretada na “picture” de muitos vales pode ser reescrita usando o seguinte argumento. No limite de  $N \rightarrow \infty$ , o sistema fica preso em um específico estado termodinâmico (vale)  $l$ , pois as barreiras que separam os vales tornam-se infinitas. Com isso, o sistema percorre todos os micro-estados acessíveis do vale  $l$  em um período de tempo suficientemente longo. Logo, a média temporal pode ser substituída pela média termodinâmica para o vale  $l$ . Assim,  $q_{EA}$  pode ser representado como a média do quadrado da magnetização espontânea de um vale  $l$ , mediado sobre todos os vales:

$$q_{EA} = \left\langle \sum_l P_l \langle S_i^l \rangle^2 \right\rangle_{J_{ij}}, \quad (2.7)$$

com  $l$  representando os vales e  $P_l$  o peso estatístico de cada vale. Também é possível definir um parâmetro de ordem físico, que mede o quadrado da magnetização espontânea

de equilíbrio ( $q$ ), quando a ordem nos limites da Equação (2.6) é invertida, ou seja:

$$q = \langle \langle S_i \rangle^2 \rangle_{J_{ij}} = \langle \left( \sum_l P_l \langle S_i^l \rangle \right)^2 \rangle_{J_{ij}} . \quad (2.8)$$

Comparando  $q$  e  $q_{EA}$ , verifica-se que eles são iguais quando existir somente um vale, já que  $q$  contém contribuições das interações entre vales, pois o limite  $t \rightarrow \infty$  foi tomado antes das barreiras que separam os vales se tornarem infinitas ( $N \rightarrow \infty$ ).

No método das réplicas, o parâmetro de ordem  $q^{\alpha\beta}$  ( $= \langle \langle S_i^\alpha S_i^\beta \rangle \rangle_{J_{ij}}$ , onde  $\alpha$  e  $\beta$  são índices de réplicas) é de grande importância na caracterização da fase VS. Ele está relacionado ao “overlap” (medida da similaridade) entre duas réplicas distintas do sistema. O “overlap” entre réplicas pode ser associado ao parâmetro de ordem  $q$ . Neste caso, a probabilidade média de dois estados puros (vales) do sistema terem um “overlap”  $q'$  é igual à fração de elementos da matriz dos “overlaps”  $\underline{Q}$  (matriz das réplicas) ser igual a  $q'$  (Castellani e Cavagna (2005)). Em particular, se todos os  $q^{\alpha\beta}$  são iguais (simetria de réplicas), existe um único estado termodinâmico e as Equações (2.7) e (2.8) tornam-se idênticas.

Na solução do modelo SK, o parâmetro de ordem  $q^{\alpha\beta}$  é introduzido de modo natural. Entretanto, no trabalho de Sherrington e Kirkpatrick (1975), foi utilizada a aproximação de simetria de réplicas (SR), que considera  $q^{\alpha\beta} = q_0$  para qualquer par de  $\alpha$  e  $\beta$ . Porém, em uma análise criteriosa da solução proposta por Sherrington e Kirkpatrick (1975), de Almeida e Thouless (1978) mostraram que a solução com SR produz resultados termodinamicamente instáveis em toda a fase VS. Para resolver esse problema de instabilidade, Parisi (1980) adotou um esquema de quebra da simetria de réplicas (QSR), o qual permite descrever a fase VS do modelo SK.

### 2.2.1 Solução de Parisi

Parisi (1980) propôs um esquema de QSR para encontrar uma solução fisicamente estável para a matriz das réplicas  $\underline{Q}$  no limite  $n \rightarrow 0$ . O esquema constitui-se de uma seqüência de aproximações (passos) que melhoram gradativamente a solução VS do modelo SK. Assim, no limite de infinitos passos, a solução correta na fase VS pode ser descrita em termos de uma função contínua de parâmetros de ordem, significando que o VS é caracterizado por um número infinito de parâmetros de ordem. Neste limite, a solução encontrada deve satisfazer todas as condições de estabilidade. Entretanto, o primeiro passo de QSR (1P-QSR) já apresenta uma sensível melhora nos resultados da solução VS. Por exemplo, em temperaturas ( $T$ ) baixas, a negatividade da entropia ( $S(T)$ ) vai de

$S(T) \simeq -0,17$  na solução com SR para  $S(T) \simeq -0,01$  na solução com 1P-QSR (Parisi (1980)).

Para 1P-QSR no esquema de Parisi (1980), as  $n$  réplicas da matriz  $\underline{Q}$  são divididas em  $n/m$  grupos com  $m$  réplicas cada ( $n$ ,  $m$  e  $n/m$  são inteiros). Logo, a matriz  $\underline{Q}$  é definida da seguinte forma:  $q^{\alpha\beta} = q_1$  se as réplicas  $\alpha$  e  $\beta$  pertencem ao mesmo grupo;  $q^{\alpha\beta} = q_0$  se as réplicas  $\alpha$  e  $\beta$  pertencem a grupos diferentes. Os elementos  $q^{\alpha\alpha} = 1$ . De forma compacta:

$$q_{\alpha\beta} = \begin{cases} q_1 & \text{se } I(\alpha/m) = I(\beta/m) \\ q_0 & \text{se } I(\alpha/m) \neq I(\beta/m) \end{cases}, \quad (2.9)$$

em que  $I(x)$  fornece o valor do menor inteiro maior ou igual a  $x$ . Uma estrutura qualitativa da matriz  $\underline{Q}$  com 1P-QSR é dada por:

$$\underline{Q} = \begin{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & q_1 & \cdots & q_1 \\ q_1 & 1 & & \vdots \\ \vdots & \cdots & \ddots & \vdots \\ q_1 & \cdots & q_1 & 1 \end{pmatrix}_{m \times m} & q_0 & q_0 & \cdots & \cdots & \cdots & q_0 \\ & q_0 & \cdots & & \cdots & \cdots & q_0 \\ & \vdots & \cdots & & \cdots & \cdots & \vdots \\ & q_0 & \cdots & & \cdots & \cdots & q_0 \\ & \vdots & & \ddots & & & \vdots \\ & & & & \ddots & & \\ q_0 & q_0 & \cdots & \cdots & \cdots & q_0 & \begin{pmatrix} 1 & q_1 & \cdots & q_1 \\ q_1 & 1 & & \vdots \\ \vdots & \cdots & \ddots & \vdots \\ q_1 & \cdots & q_1 & 1 \end{pmatrix} \\ q_0 & \cdots & & \cdots & \cdots & q_0 & \\ \vdots & \cdots & & \cdots & \cdots & \vdots & \\ q_0 & \cdots & & \cdots & \cdots & q_0 & \end{pmatrix}_{n \times n} \quad (2.10)$$

No esquema de Parisi (2.9), os parâmetros  $q_0$ ,  $q_1$  e  $m$  devem satisfazer condições ponto de sela da energia livre, tal que:  $0 \leq m$ ,  $q_0$ ,  $q_1 \leq 1$ . Fisicamente, na parametrização com 1P-QSR, o “overlap” entre réplicas pode possuir dois valores distintos:  $q_0$  e  $q_1$ . A probabilidade desses “overlaps” ocorrerem está relacionada com o parâmetro  $m$  (Fischer e Hertz (1991)). Além disso, no método das réplicas, a solução estável representa um máximo da energia livre (Kirkpatrick e Sherrington (1978)). Isso ocorre porque no limite  $n \rightarrow 0$  o número de componentes da matriz  $\underline{Q}$  torna-se negativo. Por exemplo, em 1P-QSR,  $\underline{Q}$  possui  $(m - 1) < 0$  elementos  $q_1$  e  $n(n - m) \rightarrow -m$  elementos  $q_0$ .

A generalização do processo de quebra da simetria de réplicas para mais passos é realizada por meio de uma nova parametrização dos elementos dos blocos diagonais  $m \times m$ , que deve seguir os mesmos princípios do esquema (2.9), em que as  $m$  réplicas são divididas em  $m/m_1$  sub-grupos. Assim, sucessivas parametrizações dos elementos dos “novos” blocos

diagonais levam a um esquema de QSR de infinitos passos.

## 2.3 Vidro de spin e antiferromagnetismo

### 2.3.1 Algumas observações experimentais

Experimentalmente, a competição entre VS e antiferromagnetismo tem sido observada em vários sistemas eletrônicos fortemente correlacionados tais como férmions pesados (Majumdar et al. (2002), Dickey et al. (2003), Marcano et al. (2005)) e supercondutores de altas temperaturas (Scalapino (1995)). Sistemas antiferromagnéticos de Ising tais como  $Fe_xMn_{1-x}TiO_3$  (Yoshizawa et al. (1987)),  $Fe_xMg_{1-x}Cl_2$  (Wong et al. (1985)) e  $Ni_{1-x}Mg_x(OH)_2$  (Suzuki et al. (2004)) também exibem evidências do comportamento VS em determinados valores de  $x$ .

Alguns destes sistemas antiferromagnéticos de Ising exibem propriedades interessantes associadas a um campo magnético paralelo  $H$  ao acoplamento Ising. Por exemplo, para certas concentrações  $x$ , os compostos  $Fe_xMg_{1-x}Cl_2$  (Wong et al. (1985)) e  $Ni_{1-x}Mg_x(OH)_2$  (Suzuki et al. (2004)) mostram uma competição entre as fases VS e antiferromagnética (AF). Nesse caso, diagramas de fase da temperatura pelo campo  $H$  apresentam as seguintes características: para  $H = 0$ , ocorre uma transição entre a ordem AF e a fase paramagnética (PM) na temperatura de Néel  $T_N$  e, para temperaturas mais baixas, uma transição da ordem AF para uma fase reentrante VS na temperatura  $T_f$ . Na fase reentrante, as ordens AF e VS coexistem (fase mista). Quando  $H$  aumenta,  $T_N$  decresce, porém  $T_f$  pode crescer aumentando a fase mista (região de frustração). Para  $H$  acima de um certo valor crítico, ocorre uma transição da fase PM ao VS puro. Nesse caso, a temperatura de transição PM/VS decresce monotonicamente com  $H$  (ver Wong et al. (1985) e Suzuki et al. (2004)).

A competição entre desordem, RKKY e efeito Kondo tem sido um mecanismo fundamental para explicar várias propriedades de alguns compostos de cério ( $Ce$ ) e urânio ( $U$ ). Nesse caso, certas ligas de  $Ce$  e  $U$  apresentam diagramas de fase com uma complicada relação entre ordens magnéticas e presença de um estado Kondo, em que os momentos magnéticos localizados são totalmente blindados pelos elétrons de condução. Por exemplo, na liga  $UCu_{5-x}Pd_x$  ocorre uma mudança da ordem AF para o estado Kondo e então para o VS quando a concentração  $x$  de  $Pd$  aumenta (Vollmer et al. (2000)). Por outro lado, o composto  $CeAu_{1-x}Co_xSi_3$  (ver referência Majumdar et al. (2002)) mostra um diagrama de fase experimental com um comportamento VS quando  $0 < x < 0,45$  em temperaturas

baixas. Aumentando a dopagem de cobalto  $Co$ , esse sistema apresenta uma transição para a fase AF. No intervalo de concentração de  $Co$  entre  $0,45 < x < 0,9$ , a temperatura de Néel decresce até atingir um ponto crítico quântico em  $x = 0,9$ . Para  $x > 0,9$ , os momentos magnéticos são suprimidos devido ao efeito Kondo.

### 2.3.2 Modelos teóricos

Do ponto de vista teórico, uma versão do modelo Sherrington-Kirkpatrick (SK) em duas sub-redes (Korenblit e Shender (1985)) tem sido usada como teoria de campo médio para explicar o comportamento das temperaturas críticas das ordens antiferromagnética (AF) e VS observadas nos sistemas antiferromagnéticos de Ising citados acima. Nesse caso, a ordem AF é caracterizada pelo início da magnetização “staggered” (diferença entre as magnetizações das duas sub-redes), e o comportamento VS (ou fase mista) pela instabilidade da solução com simetria de réplicas (de Almeida e Thouless (1978)). Recentemente, uma versão fermiônica desse modelo de duas sub-redes foi proposta para descrever alguns aspectos relevantes do diagrama de fase global do composto  $CeAu_{1-x}Co_xSi_3$  (ver referência Magalhães, Zimmer e Coqblin (2006a)).

O modelo SK em duas sub-redes foi inicialmente introduzido por Korenblit e Shender (1985), os quais consideraram duas sub-redes com spins de Ising representados por variáveis clássicas de spin e interações do tipo SK somente entre spins de sub-redes distintas. Nesse caso, a interação de troca é uma variável aleatória que segue uma distribuição de probabilidade gaussiana com média antiferromagnética. O modelo introduzido por Korenblit e Shender (1985) é denominado modelo KS. Uma generalização do modelo KS (modelo KSG) admite interações desordenadas do tipo SK entre spins pertencentes a sub-redes diferentes (intersub-redes) e entre spins de mesma sub-rede (intra-sub-rede) (ver referências Fyodorov, Korenblit e Shender (1987) e Takayama (1988)).

Os modelo KS e KSG têm mostrado uma característica interessante relacionada à presença de um campo magnético paralelo  $H$  ao acoplamento Ising. O campo  $H$  quebra a simetria entre as sub-redes e, desse modo, pode introduzir efeitos não usuais no problema. Por exemplo, a temperatura de congelamento  $T_f$  aumenta para um certo intervalo de campo  $H$ . Logo, a frustração (região de quebra da simetria de réplicas (QSR)) pode ser favorecida por  $H$ , que contrasta com os resultados bem estabelecidos do modelo clássico de Sherrington-Kirkpatrick (SK) (Kirkpatrick e Sherrington (1978)), no qual a temperatura  $T_f$ , associada à instabilidade de Almeida-Thouless, decresce monotonicamente com  $H$ . Esse comportamento ímpar de  $T_f$  nos modelos de duas sub-redes pode ser explicado pelo

campo interno aleatório que atua em cada sub-rede (Korenblit e Shender (1985)). O campo interno  $h_p$  aplicado numa particular sub-rede  $p$  ( $= a, b$ ) depende, além de  $H$ , da magnetização e do parâmetro de ordem vidro de spin da outra sub-rede  $p'$  ( $= b, a$ ). Devido à quebra de simetria entre as sub-redes, quando  $H$  aumenta em um específico intervalo, pode-se ter um comportamento não monotônico dos parâmetros de ordem acima referidos e, conseqüentemente, de  $h_p$ . Portanto,  $T_f$  pode aumentar com  $H$ , expandindo a região de quebra de ergodicidade não trivial (VS), ou seja, nos modelos KS e KSG, a assimetria causada pelo campo  $H$  pode elevar a temperatura em que ocorre a QSR. Nesse caso, é importante salientar que a QSR ocorre com uma magnetização “staggered” diferente de zero. Isso caracteriza uma fase mista, em que a ordem antiferromagnética e o comportamento vidro de spin coexistem.

## 2.4 Vidro de spin quântico

Os vidros de spins quânticos apresentam características interessantes, que estão associadas a transições de fase desses sistemas com interações magnéticas desordenadamente frustradas. Essas transições podem ser governadas tanto por flutuações térmicas quanto por flutuações quânticas. Por exemplo, as transições de fase em modelos clássicos são governadas essencialmente por flutuações térmicas, de modo que as variações de temperatura exercem um papel relevante. Na medida em que a temperatura  $T$  diminui, as flutuações de natureza quântica podem exercer efeitos importantes no sistema considerado. Quando  $T = 0$ , as flutuações térmicas deixam de ocorrer. Com isso, o sistema no estado fundamental é governado somente por flutuações quânticas que podem conduzir a transições de fase mesmo em  $T = 0$  (Sachdev (1999)).

Teoricamente, os vidros de spins quânticos têm sido estudados, principalmente, em dois modelos: o primeiro, inicialmente introduzido por Bray e Moore (1980), considera o modelo de spins isotrópicos de Heisenberg, no qual os spins interagem de modo desordenado e aleatório (desordem temperada); o segundo tipo considera um conjunto de spins Ising, como no vidro de spin clássico, mais um termo não-comutativo que adiciona flutuações de natureza quântica, o qual pode ser introduzido através de um campo magnético transversal ao acoplamento Ising (Ishii e Yamamoto (1985)). Este último é conhecido como modelo de vidro de spin de Ising (VSI) em presença de um campo transversal e é estudado em detalhes neste trabalho.

O modelo introduzido por Bray e Moore (1980) generaliza o modelo SK clássico usando operadores quânticos para os spins. O método das réplicas, a aproximação estática e trans-



formações de Hubbard-Stratonovich são aplicados para reduzir o estudo do vidro de spin quântico de Heisenberg ao problema efetivo de um único sítio. Nesse caso, a aproximação estática despreza correlações no tempo das interações spin-spin. Os operadores quânticos de spin ( $\vec{S}_j$ ) satisfazem as seguintes relações de comutação:

$$\vec{S}_j \times \vec{S}_k = i\delta_{j,k}\vec{S}_j, \quad (2.11)$$

reescrita como

$$[S_j^\pm, S_k^z] = \mp\delta_{j,k}S_j^\pm; \quad [S_j^+, S_k^-] = 2\delta_{j,k}S_j^z \quad (2.12)$$

sendo  $S_j^x = S_j^+ + S_j^-$  e  $S_j^y = i(-S_j^+ + S_j^-)$ . Para tratar com a não comutatividade dos operadores de spin foi usado o formalismo das integrais de caminho de Feynmann, que introduz um ordenamento temporal através de um tempo imaginário  $0 \leq \tau \leq \beta$ , no qual  $\beta$  é o inverso da temperatura.

Por outro lado, o modelo de VSI em um campo transverso  $\Gamma$  é um dos mais simples capaz de introduzir efeitos de natureza quântica, que podem levar a uma transição de fase em temperatura zero, ocorrendo um ponto crítico quântico (PCQ) dado pela transição entre a fase vidro de spin e o estado desordenado paramagnético (Sachdev (1999)). Essa transição é governada exclusivamente por flutuações quânticas. Nesse caso, o campo transverso é responsável por causar efeitos quânticos de “flip” nos spins. Em particular, a intensidade das flutuações quânticas pode ser ajustada através do campo magnético transverso  $\Gamma$ . Quando  $\Gamma = 0$ , as operadores de spin comutam e o problema reproduz os resultados do modelo clássico (Kirkpatrick e Sherrington (1978)); entretanto, se  $\Gamma \neq 0$ , a dinâmica dos operadores de spin recebe importantes contribuições quânticas, pois os operadores de spin do Hamiltoniano não comutam<sup>3</sup>.

Experimentalmente, o estudo da transição de fase do vidro de spin quântico pode ser realizado no sistema de VS de Ising  $LiHo_xY_{1-x}F_4$ , no qual a temperatura de congelamento  $T_f$  tem sido levada a zero por um campo magnético transverso aplicado (Kao et al. (2001), Wu et al. (1993) e Wu et al. (1991)).

Um particular interesse nesses modelos de VS quântico diz respeito à possibilidade de tunelamento entre as barreiras de energia livre determinadas nos modelos clássicos de VS (modelo SK). Esse tunelamento se dá devido às flutuações quânticas induzidas pelo campo transverso. Por exemplo, a fase VS é caracterizada classicamente por um espaço de fase composto de muitos vales separados por barreiras muito altas de energia livre.

---

<sup>3</sup>Para  $\Gamma > 0$ , a equação de Heisenberg fica:  $\partial S^z(\tau)/\partial\tau = 1/\hbar[H, S^z(\tau)]$ .

A altura dessas barreiras depende do tamanho do sistema e, ocasionalmente, ela tende ao infinito no limite termodinâmico. Dessa forma, flutuações térmicas são incapazes de fazer com que o sistema transponha essas barreiras de energia e, portanto, ele fica restrito a uma pequena região do espaço de fases (quebra da simetria de réplicas). Porém, as flutuações quânticas abrem a possibilidade de tunelamento entre essas barreiras de energia livre<sup>4</sup>, podendo restaurar a simetria de réplicas. Entretanto, esse é um tema de muita discussão. Para mostrar explicitamente a complexidade envolvida na descrição teórica do vidro de spin quântico, são especificados alguns trabalhos e suas principais conclusões. Por exemplo, Thirumalai, Li e Kirkpatrick (1989) analisaram o modelo de VSI quântico no formalismo de Trotter-Suzuki<sup>5</sup> com aproximação estática. Eles encontraram uma pequena região da fase VS (com  $\Gamma > 0$ ), onde a solução com simetria de réplicas (SR) é estável para temperaturas abaixo da temperatura de congelamento  $T_f$ . Nesse caso, a solução VS é caracterizada por um único valor para o parâmetro de ordem  $q$ , que representa uma solução termodinamicamente estável. Contudo, para esse mesmo modelo, Büttner e Usadel (1990b) encontraram quebra da simetria de réplicas em toda a fase VS, quando o formalismo de Trotter-Suzuki é usado sem aproximação estática, sendo a dinâmica das interações spin-spin no espaço das réplicas tratada numericamente. Nesse caso, a fase VS tem sido investigada pela solução com um passo de quebra da simetria de réplicas (1P-QSR), que sugere que o tunelamento quântico não restaura a SR (ver referências Büttner e Usadel (1990a) e Goldschmidt e Lai (1990)). Por outro lado, o VSI quântico também tem sido estudado no formalismo das réplicas introduzido por Bray e Moore (1980), em que a aproximação estática é adotada. Nesse caso, Kim e Kim (2002) têm mostrado que a SR é estável em quase toda fase VS quântica. Além disso, o vidro de spin estudado no modelo dos rotores quânticos<sup>6</sup>, bem como VSI em campo transversal, têm sido analisados em uma teoria de Landau-Ginzburg sugerida na referência Read, Sachdev e Ye (1995). Nesse caso, os efeitos dinâmicos são considerados através de uma aproximação analítica para temperaturas ( $T$ ) próximas à temperatura crítica  $T_f$ . Nesse tratamento, a QSR ocorre na fase VS em temperaturas finitas e é sugerido que a QSR é suprimida quando  $T \rightarrow 0$  na região perto do PCQ.

Recentemente, no trabalho de Theumann et al. (2002), o VSI em campo transversal

---

<sup>4</sup>A probabilidade de tunelamento é proporcional à área das barreiras, a qual permanece finita uma vez que as larguras das barreiras de energia podem ser infinitesimalmente estreitas (Chakrabarti e Das (2003)).

<sup>5</sup>O formalismo de Trotter-Suzuki é essencialmente um método para transformar um hamiltoniano quântico de  $d$ -dimensões em um hamiltoniano clássico efetivo de  $(d + 1)$ -dimensões que fornece a mesma função de partição canônica. Este método não é abordado aqui.

<sup>6</sup>O modelo dos rotores quânticos com  $M$  componentes possui o mesmo comportamento crítico do modelo de Ising em campo transversal quando  $M = \infty$  (Ye, Sachdev e Read (1993)).

foi estudado em uma formulação fermiônica usando integrais funcionais com variáveis de Grassmann. Esse problema tem sido tratado na aproximação estática, na qual o diagrama de fase encontrado mostra que  $T_f$  decresce em direção a um PCQ quando  $\Gamma$  atinge um valor crítico. Nesse formalismo, a SR é instável em toda fase VS, contrastando com os resultados obtidos na referência Kim e Kim (2002). Em um trabalho subsequente, Santos e Theumann (2005) estudaram o VSI quântico na mesma formulação fermiônica anterior (Theumann et al. (2002)) com aproximação estática. No entanto, adotando um esquema de QSR semelhante ao proposto originalmente por Parisi (1980), a simetria de réplicas foi quebrada em um passo. Nesse caso, a parametrização de Parisi (1980) é usada na matriz das réplicas, porém o parâmetro  $m$ , associado ao tamanho dos blocos diagonais no esquema de Parisi, é tomado como independente da temperatura no limite das réplicas ( $0 < m < 1$ ). Os resultados desse particular tratamento de QSR sugerem que a SR é restaurada em  $T = 0$  quando  $\Gamma > 0$ .

Um ponto importante da formulação fermiônica do modelo de VSI em campo transversal é a aproximação estática, que merece alguns comentários. Ela produz bons resultados para as linhas críticas dos diagramas de fase mesmo em temperaturas muito baixas (Miller e Huse (1993) e Ye, Sachdev e Read (1993)). Entretanto, a aproximação estática pode produzir resultados quantitativamente imprecisos para as demais grandezas termodinâmicas quando as temperaturas são muito baixas e  $\Gamma > 0$ . Contudo, ainda existem vários trabalhos recentes (Theumann, Schmidt e Magalhães (2002) e Santos e Theumann (2005), e Zimmer e Magalhães (2006a), Zimmer e Magalhães (2006b) e Zimmer e Magalhães (2007a), que são resultados parciais desta tese) adotando essa particular aproximação, devido a dificuldades em aplicar um método analítico consistente que permita ir além da aproximação estática no estudo de toda a fase vidro de spin no formalismo fermiônico, o qual também apresenta problemas relacionados com a solução de QSR. Ainda, quando a temperatura decresce para valores pequenos e intermediários de  $\Gamma$  no problema de uma única rede, os resultados produzidos pela aproximação estática com 1P-QSR (Zimmer e Magalhães (2006a)) concordam qualitativamente bem com aqueles obtidos no formalismo de Trotter-Suzuki, que usa métodos numéricos para tratar a dinâmica das correlações spin-spin (Büttner e Usadel (1990a) e Goldschmidt e Lai (1990)). Além disso, os resultados na aproximação estática com 1P-QSR concordam qualitativamente com os obtidos no formalismo de Landau-Ginzburg quando  $\Gamma$  aumenta em direção ao PCQ, sendo que os efeitos da QSR tornam-se menos importantes.

Por outro lado, uma versão quântica para o modelo de VS em duas sub-redes tem sido pouco debatida do ponto de vista teórico. Nesse sentido, surgem algumas questões

que devem ser respondidas neste trabalho, pois, os efeitos quânticos nas transições de fases e na região de QSR assimétrica permanecem como uma questão em aberto. Por exemplo, a QSR ocorre na mesma temperatura crítica em ambas sub-redes nos modelos clássicos KS (Korenblit e Shender (1985)) e KSG (Takayama (1988)). Porém, o grau de QSR pode ser diferente em cada sub-rede na região de QSR assimétrica ( $H > 0$ ). Considerando essa diferença, podemos questionar em relação ao comportamento da QSR quando flutuações quânticas estão presentes nos modelo KS e KSG.

Existe uma particular situação do modelo KSG clássico (KSGP), na qual as interações intersub-rede são somente antiferromagnéticas, sem desordem, enquanto os spins de mesma sub-rede acoplam-se com interações desordenadas (Fyodorov, Korenblit e Shender (1990)). Nesse caso, quando  $H > 0$ , a QSR pode ocorrer primeiro para uma específica sub-rede (considera-se  $b$ ), ao mesmo tempo em que a outra sub-rede ( $a$ ) ainda apresenta solução com SR. A sub-rede  $a$  também pode mostrar QSR, mas a temperaturas mais baixas. Agora, as flutuações quânticas são mais pronunciadas em temperaturas baixas. Nesse contexto, a solução com QSR da sub-rede  $a$  pode ser mais afetada pelas flutuações quânticas do que a da sub-rede  $b$ . Logo, a sub-rede  $a$  poderia apresentar uma solução com SR estável em qualquer temperatura finita, ao mesmo tempo em que a sub-rede ainda mostra uma solução com QSR quando as flutuações quânticas são consideradas. Esse é um ponto importante para o problema VS/AF, pois a solução de uma particular sub-rede também depende dos parâmetros de ordem da outra sub-rede (Korenblit e Shender (1985)). Além disso, a frustração na região de QSR assimétrica poderia ser afetada se somente os spins da sub-rede  $b$  apresentarem solução com QSR.

Nos modelo KS e KSG, o campo magnético paralelo  $H$  quebra a simetria entre as sub-redes, conseqüentemente,  $H$  pode favorecer a frustração ao mesmo tempo em que destrói a ordem AF. Logo, a temperatura de congelamento  $T_f(H)$  pode aumentar com  $H$  (Korenblit e Shender (1985)). Por outro lado, um campo magnético transversal  $\Gamma$  ao acoplamento Ising introduz mecanismos quânticos de “flip” nos spins, os quais podem suprimir as ordens magnéticas, levando as temperaturas críticas a pontos críticos quânticos (Theumann et al. (2002)). Portanto, os dois campos magnéticos produzem efeitos que competem no comportamento de  $T_f(H)$  do problema VS/AF de duas sub-redes. O cenário pode ficar ainda mais complicado quando as interações intra-sub-rede são consideradas, como no caso do modelo KSG. Neste também pode surgir uma transição de fase de primeira ordem do AF à fase paramagnética com o aumento de  $H$  (Fyodorov, Korenblit e Shender (1987)).

De acordo com as discussões acima, existem algumas questões em aberto no problema de VS quântico, que este trabalho aborda. Por exemplo, o modelo de uma única rede

de VSI em campo transverso foi investigado em uma formulação fermiônica com 1P-QSR, usando o esquema de Parisi (1980). Em particular, foi comparado este com o procedimento alternativo de QSR proposto na referência Santos e Theumann (2005) para o mesmo problema fermiônico, em que  $m$  (tamanho dos blocos diagonais da matriz de Parisi com 1P-QSR) é constante. Para os modelos de duas sub-redes, são analisados os efeitos de um campo transverso  $\Gamma$  sobre formulações fermiônicas dos modelos KS e KSG. Em específico, foram investigados os efeitos produzidos pelo campo  $\Gamma$  na região de QSR assimétrica, em que também foi dada ênfase ao modelo KSGP, no qual somente as interações intra-sub-rede são desordenadas. O esquema de Parisi de 1P-QSR é adotado para estudar a região de quebra de ergodicidade não trivial. Nesse caso, checa-se se as flutuações quânticas são suficientemente fortes para causar tunelamento entre as barreiras de energia livre dos muitos estados termodinamicamente degenerados (VS). Os diagramas de fase dos modelos KS e KSG quânticos também são estudados em detalhes.

No problema de duas sub-redes (considera-se sub-redes  $a$  e  $b$ ) a estrutura hierárquica de Parisi é usada em cada uma das sub-redes na solução com QSR. Assim, os elementos das matrizes das réplicas das sub-redes  $a$  e  $b$  são parametrizados seguindo o esquema de 1P-QSR proposto por Parisi (1980). Em particular, no modelo KSGP, as matrizes das réplicas são independentes (Fyodorov et al. (1990)). Logo, no modelo KSGP, as duas sub-redes apresentam soluções com 1P-QSR independentes. Entretanto, as matrizes das réplicas para as sub-redes  $a$  e  $b$  são acopladas nos modelos KS e KSG. Nesses casos, adota-se a aproximação  $m_a = m_b$  para desacoplá-las, em que  $m_p$  ( $p = a$  ou  $b$ ) é o parâmetro relacionado com o tamanho dos blocos diagonais do esquema de Parisi de 1P-QSR para a sub-rede  $p$ . Nessa aproximação, a situação  $m_a \neq m_b$  nunca ocorre, contudo, ainda é possível ter uma dependência das sub-redes nos demais parâmetros de ordem com 1P-QSR. Um método alternativo de QSR, baseado no esquema de Parisi e em uma estrutura modulado, tem sido proposto por Oppermann, Sherrington e Kiselev (2004) para o modelo KS clássico sem desordem intra-sub-rede. Esse é o esquema modulado de QSR, o qual considera uma possível assimetria entre  $m_a$  e  $m_b$  ( $m_a \neq m_b$ ), que é controlada por um parâmetro variacional no limite das réplicas. Em particular, o esquema modulado de QSR é aplicado no modelo KS e seus resultados comparados aos do método de Parisi ( $m_a = m_b$ ).

## 3 MÉTODOS

Neste capítulo, é introduzido o formalismo utilizado no presente trabalho. Em específico, a seção 3.1 faz uma breve abordagem sobre as integrais de caminho fermiônicas com variáveis de Grassmann, que compreende na apresentação de alguns conceitos para sistemas de muitos corpos representados em segunda quantização (seção 3.1.1) e na apresentação das integrais de caminho para férmions (seção 3.1.2). Essa discussão toma com base a referência Negele e Orland (1988).

Na seção 3.2, é abordada a formulação fermiônica do problema de vidro de spin (VS) de Ising em um campo transverso. Nesse caso, o modelo é analisado na seção 3.2.1 e o problema com simetria de réplicas é discutido na seção 3.2.2, que consiste em uma revisão do trabalho de Theumann, Schmidt e Magalhães (2002). Na seção 3.2.3, é introduzida a quebra de simetria de réplicas para esse problema de VS quântico (Santos e Theumann (2005) e Zimmer e Magalhães (2006a)).

### 3.1 Formalismo das integrais de caminho fermiônicas

Antes de introduzir o formalismo das integrais de caminho fermiônicas propriamente dito, é realizada uma breve revisão de sistemas descritos em segunda quantização.

#### 3.1.1 Segunda Quantização

Sistemas quânticos de muitas partículas idênticas são convenientemente estudados no formalismo de segunda quantização. Para esse propósito, são definidos operadores de criação ( $c_\alpha^\dagger$ ) e destruição ( $c_\alpha$ ), que criam e destroem partículas em um estado específico  $\alpha$ . Os demais operadores de interesse físico na segunda quantização podem ser expressos em termos desses dois operadores. Com isso, é necessário construir uma base para a álgebra dos operadores descritos acima, ou seja, funções de onda sobre as quais eles atuam, além de representarem o estado do sistema.

Funções de onda para sistemas de muitas partículas não interagentes são consideradas como produtos tensoriais de funções de onda de partícula única ( $|\alpha_1, \alpha_2 \cdots \alpha_N\rangle = |\alpha_1\rangle \otimes$

$|\alpha_2\rangle \otimes \cdots \otimes |\alpha_N\rangle$ ) e pertencem ao espaço de Hilbert  $H_N$  ( $H_N = H \otimes H \otimes \cdots \otimes H$ , sendo  $H$  o espaço de Hilbert de uma partícula). Quando o sistema possui interações entre partículas, ou com algum potencial externo, o estado do sistema pode ser representado por uma combinação linear das funções de onda não-interagentes. Por outro lado, as informações essenciais de um sistema estão contidas no número de partículas presentes em cada estado, pois estas são indistinguíveis.

No sistema fermiônico, as funções de onda são anti-simétricas sobre permutações dos  $N$  férmions, sendo admissível somente zero ou uma partícula por estado. As funções com essa propriedade pertencem ao espaço fermiônico de Hilbert  $\mathcal{F}_N$ <sup>1</sup>.

Para verificar como agem os operadores  $c_\alpha^\dagger$  e  $c_\alpha$  sobre um estado  $|\alpha_1 \alpha_2 \cdots \alpha_N\rangle$  pertencente ao espaço  $\mathcal{F}_N$ , que representa uma partícula no estado  $\alpha_1$ , uma no estado  $\alpha_2$ ,  $\cdots$  e uma no estado  $\alpha_N$ , são expostas as relações abaixo:

$$c_\alpha^\dagger |\alpha_1 \cdots \alpha_N\rangle = \begin{cases} |\alpha \alpha_1 \cdots \alpha_N\rangle & \text{se o estado } |\alpha\rangle \notin |\alpha_1 \cdots \alpha_N\rangle \\ 0 & \text{se o estado } |\alpha\rangle \in |\alpha_1 \cdots \alpha_N\rangle \end{cases} \quad (3.1)$$

e

$$c_{\alpha_P} |\alpha_1 \cdots \alpha_N\rangle = \begin{cases} (-1)^{P-1} |\alpha_1 \cdots \alpha_{P-1} \alpha_{P+1} \cdots \alpha_N\rangle & \text{se } |\alpha_P\rangle \in |\alpha_1 \cdots \alpha_N\rangle \\ 0 & \text{se } |\alpha_P\rangle \notin |\alpha_1 \cdots \alpha_N\rangle. \end{cases} \quad (3.2)$$

Na equação (3.1), o operador  $c_\alpha^\dagger$  leva um estado do espaço  $\mathcal{F}_N$  para o espaço  $\mathcal{F}_{N+1}$ , fazendo-se necessária à definição do espaço de Fock  $\mathcal{F}$ , que é construído com a soma direta dos espaços fermiônicos:

$$\mathcal{F} = \mathcal{F}_0 \oplus \mathcal{F}_1 \oplus \cdots \oplus \mathcal{F}_N \oplus \cdots, \quad (3.3)$$

sendo  $\mathcal{F}_0 = |0\rangle$  e  $\mathcal{F}_1 = H$ , com  $|0\rangle$  representando um estado sem partícula, denominado vácuo. Logo,  $\{|0\rangle, |\alpha_1\rangle, |\alpha_1 \alpha_2\rangle, \cdots\}$  pode ser adotado como base do espaço  $\mathcal{F}$ . De acordo com a Equação (3.1), qualquer elemento da base pode ser obtido por sucessivas aplicações do operador de criação sobre o vácuo:

$$|\alpha_1 \alpha_2 \cdots \alpha_n\rangle = c_{\alpha_1}^\dagger c_{\alpha_2}^\dagger \cdots c_{\alpha_n}^\dagger |0\rangle. \quad (3.4)$$

No formalismo de segunda quantização, os operadores de criação e destruição devem obedecer a certas relações de anticomutação, as quais são necessárias para satisfazer a propriedade anti-simétrica das funções de onda de um sistema fermiônico. Essas relações

---

<sup>1</sup> $\mathcal{F}_N$  é o espaço que contém as funções de onda anti-simétricas do espaço  $H_N$ , aquele determinado pelo  $N$ -ésimo produto tensorial de espaços de partícula única  $H$ .

são dadas por

$$\{c_\alpha, c_\beta\} = c_\alpha c_\beta + c_\beta c_\alpha = 0 \quad (3.5)$$

$$\{c_\alpha^\dagger, c_\beta^\dagger\} = c_\alpha^\dagger c_\beta^\dagger + c_\beta^\dagger c_\alpha^\dagger = 0 \quad (3.6)$$

$$\{c_\alpha, c_\beta^\dagger\} = c_\alpha c_\beta^\dagger + c_\beta^\dagger c_\alpha = \delta_{\alpha\beta} . \quad (3.7)$$

Após representar um sistema de muitos férmions, deve-se saber como calcular a sobreposição de dois estados fermiônicos, que é dada por

$$\langle \beta_1 \cdots \beta_N | \alpha_1 \cdots \alpha_M \rangle = \begin{cases} \sum_{\{P\}} (-1)^P \langle \beta_1 | \alpha_{P1} \rangle \cdots \langle \beta_N | \alpha_{PN} \rangle & \text{se } N = M \\ 0 & \text{se } N \neq M \end{cases} \quad (3.8)$$

com  $\{P\}$  indicando todas as permutações possíveis.

A partir de idéias similares à dedução das integrais de caminho de Feynman, que utilizam auto-estados dos operadores posição e momento, são determinadas as integrais de caminho fermiônicas para sistemas de muitos corpos. Nesse caso, ao invés dos auto-estados posição e momento, são usados estados coerentes, que representam auto-estados do operador de destruição. Uma breve revisão sobre estados coerentes é realizada no Apêndice A.

### 3.1.2 Integrais de caminho para férmions

Um dos métodos utilizados no estudo de sistemas de muitos elétrons é o das integrais de caminho fermiônicas, que disponibiliza um tratamento para a função de partição escrita em segunda quantização, na qual os operadores de criação e destruição são associados a variáveis de Grassmann. Devido ao formalismo aplicado na dedução dessas integrais de caminho, o ordenamento temporal dos operadores é estabelecido de modo natural, permitindo estudar sistemas em que os operadores não comutam.

Como ponto inicial, considera-se a função de partição representada no ensemble grandecanônico:

$$Z = Tr \exp[-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})] , \quad (3.9)$$

onde  $\hat{H} = \hat{H}(c_\alpha^\dagger, c_\alpha)$  é um Hamiltoniano escrito em segunda quantização,  $\mu$  o potencial químico,  $\beta$  o inverso da temperatura e  $\hat{N}$  o operador número dado por:  $\hat{N} = \sum_\alpha c_\alpha^\dagger c_\alpha$  (a soma em  $\alpha$  é sobre todos estados). Definindo-se um conjunto completo de estados  $\{|n\rangle\}$



no espaço de Fock, torna-se possível calcular o traço como

$$Z = \sum_n \langle n | \exp[-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})] | n \rangle. \quad (3.10)$$

Com o prévio conhecimento do operador unitário na base dos estados coerentes fermiônicos, dado por (A.10)

$$\mathcal{I} = \int \prod_{\alpha} d\phi_{\alpha}^* d\phi_{\alpha} e^{-\sum_{\alpha} \phi_{\alpha}^* \phi_{\alpha}} | \phi \rangle \langle \phi |, \quad (3.11)$$

é permitido representar a função de partição na base dos estados coerentes. Para isso, introduz-se o operador  $\mathcal{I}$  na Equação (3.10):

$$Z = \sum_n \int \prod_{\alpha} d\phi_{\alpha}^* d\phi_{\alpha} e^{-\sum_{\alpha} \phi_{\alpha}^* \phi_{\alpha}} \langle n | \phi \rangle \langle \phi | \exp[-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})] | n \rangle. \quad (3.12)$$

Sabendo que os estados coerentes fermiônicos são combinações lineares dos elementos de uma base do espaço  $\mathcal{F}$  com coeficientes contendo números de Grassmann, tem-se devido as propriedades de anticomutação

$$\langle n | \phi \rangle \langle \phi' | n \rangle = \langle -\phi' | n \rangle \langle n | \phi \rangle. \quad (3.13)$$

Sendo assim, a Equação (3.12) pode ser escrita como

$$Z = \sum_n \int \prod_{\alpha} d\phi_{\alpha}^* d\phi_{\alpha} e^{-\sum_{\alpha} \phi_{\alpha}^* \phi_{\alpha}} \langle -\phi | \exp[-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})] | n \rangle \langle n | \phi \rangle$$

ou

$$Z = \int \prod_{\alpha} d\phi_{\alpha}^* d\phi_{\alpha} e^{-\sum_{\alpha} \phi_{\alpha}^* \phi_{\alpha}} \langle -\phi | \exp[-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})] | \phi \rangle. \quad (3.14)$$

Após expressar a função de partição na base dos estados coerentes, é de grande importância o conceito de um operador  $\hat{O}(c^{\dagger}, c)$  em ordem normal, significando que os operadores de criação estão à esquerda dos de destruição. A notação para a ordem normal é  $: \hat{O}(c^{\dagger}, c) :$ . Assim, supondo  $\hat{H}(c^{\dagger}, c)$  em ordem normal, é calculada a seguinte expressão:

$$\begin{aligned} e^{\varepsilon \hat{H}(c^{\dagger}, c)} &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{[\varepsilon \hat{H}(c^{\dagger}, c)]^n}{n!} \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\varepsilon^n : [\hat{H}(c^{\dagger}, c)]^n :}{n!} + \sum_{n=2}^{\infty} \frac{\varepsilon^n [\hat{H}(c^{\dagger}, c)]^n}{n!} - \sum_{n=2}^{\infty} \frac{\varepsilon^n : [\hat{H}(c^{\dagger}, c)]^n :}{n!} \\ &= : e^{\varepsilon \hat{H}(c^{\dagger}, c)} : + \varepsilon^2 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\varepsilon^n}{(n+2)!} \{ [\hat{H}(c^{\dagger}, c)]^{n+2} - : [\hat{H}(c^{\dagger}, c)]^n : \}. \end{aligned} \quad (3.15)$$

Por intermédio da Equação (3.15), os elementos de matriz de um operador  $e^{\varepsilon\hat{H}(c^\dagger,c)}$ , na base dos estados coerentes, são representados por

$$\langle\phi|e^{\varepsilon\hat{H}(c^\dagger,c)}|\phi'\rangle = \langle\phi| \left[ : e^{\varepsilon\hat{H}(c^\dagger,c)} : + O(\varepsilon^2) \right] |\phi'\rangle, \quad (3.16)$$

e, utilizando a Equação (A.21), tem-se

$$\langle\phi|e^{\varepsilon\hat{H}(c^\dagger,c)}|\phi'\rangle = e^{\sum_\alpha\phi_\alpha^*\phi'_\alpha} e^{\sum_\alpha\varepsilon H(\phi_\alpha^*,\phi'_\alpha)} + O(\varepsilon^2), \quad (3.17)$$

tendo feita uma aproximação da ordem de  $\varepsilon^2$ . Com isso,  $H(\phi_\alpha^*,\phi'_\alpha)$  tornou-se uma função das variáveis de Grassmann  $\phi_\alpha^*$  e  $\phi'_\alpha$ .

O resultado alcançado na Equação (3.17) pode ser utilizado no cálculo da função de partição. Para tal, o fator  $\beta$  da Equação (3.14) deve assumir valores da ordem de  $\varepsilon$ , ou melhor, subdivide-se  $\beta$  em pequenos intervalos que podem estar associados a tempos imaginários, como se verifica comparando a função de partição (3.14) e a soma dos elementos da diagonal da matriz do operador evolução temporal:

$$U(\phi_\alpha^*t_f; \phi_\alpha t_i) = \langle\phi_\alpha t_f|e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(c^\dagger,c)(t_f-t_i)}|\phi_\alpha t_i\rangle. \quad (3.18)$$

Comparando a Equação (3.18) com o último termo da Equação (3.14), quando impostas as condições de contorno antiperiódicas tal que:  $\phi_{\alpha,t_i} = \phi_\alpha$ ;  $\phi_{\alpha,t_f}^* = -\phi_\alpha^*$ , é possível identificar  $\beta = \frac{i(t_f-t_i)}{\hbar}$  como tempo imaginário. Então, a função de partição pode ser escrita como

$$Z = \int \prod_\alpha d\phi_\alpha^* d\phi_\alpha e^{-\sum_\alpha\phi_\alpha^*\phi_\alpha} \langle-\phi|\exp[-(\tau_f-\tau_i)(\hat{H}-\mu\hat{N})]|\phi\rangle, \quad (3.19)$$

onde  $\tau_f - \tau_i = \beta$ , com  $\tau$  representando  $it$  e as unidades ajustadas para  $\hbar = 1$ .

O intervalo de tempo imaginário  $\beta = \tau_f - \tau_i$  pode ser pensado como a soma de várias fatias de tempos de tamanhos  $\varepsilon$ , conseguidas quando este intervalo se divide em  $M$  partes iguais:

$$\varepsilon = \frac{\tau_f - \tau_i}{M}. \quad (3.20)$$

Assumindo  $\tau_i = 0$  (implica  $\tau_f = M\varepsilon$ ), é possível representar a Equação (3.19) como

$$Z = \int \prod_\alpha d\phi_\alpha^* d\phi_\alpha e^{-\sum_\alpha\phi_\alpha^*\phi_\alpha} \langle-\phi|\left(\exp[-\varepsilon(\hat{H}-\mu\hat{N})]\right)^M|\phi\rangle. \quad (3.21)$$

Tomando um valor grande para  $M$  e introduzido  $M - 1$  vezes o operador unitário

(3.11), pode-se separar cada etapa da evolução do tempo imaginário da Equação (3.21), estabelecendo um índice  $k$  ( $k = 1, 2, \dots, M - 1$ ), que especifica a ordem cronológica. De acordo com a discussão acima, a função de partição (3.21) fica:

$$\begin{aligned}
Z &= \lim_{M \rightarrow \infty} \int \prod_{\alpha} d\phi_{\alpha}^* d\phi_{\alpha} e^{-\sum_{\alpha} \phi_{\alpha}^* \phi_{\alpha}} \int \prod_{k=1}^{M-1} \prod_{\alpha} d\phi_{\alpha,k}^* d\phi_{\alpha,k} e^{-\sum_{k=1}^{M-1} \sum_{\alpha} \phi_{\alpha,k}^* \phi_{\alpha,k}} \\
&\times \langle -\phi | \exp[-\varepsilon(\hat{H} - \mu\hat{N})] | \phi_{M-1} \rangle \langle \phi_{M-1} | \dots \\
&\times \dots | \phi_1 \rangle \langle \phi_1 | \exp[-\varepsilon(\hat{H} - \mu\hat{N})] | \phi \rangle. \tag{3.22}
\end{aligned}$$

Assumindo condições de contorno antiperiódicas  $\phi_{\alpha,0} = \phi_{\alpha}$ ,  $\phi_{\alpha,M}^* = -\phi_{\alpha}^*$  e definindo a variável  $\phi_{\alpha} \equiv -\phi_{\alpha,M}$ , a Equação (3.22) pode ser representada como:

$$\begin{aligned}
Z &= \lim_{M \rightarrow \infty} \int \prod_{k=1}^M \prod_{\alpha} d\phi_{\alpha,k}^* d\phi_{\alpha,k} e^{-\sum_{k=1}^M \sum_{\alpha} \phi_{\alpha,k}^* \phi_{\alpha,k}} \\
&\times \langle -\phi | \exp[-\varepsilon(\hat{H} - \mu\hat{N})] | \phi_{M-1} \rangle \prod_{k=2}^{M-1} \langle \phi_k | \exp[-\varepsilon(\hat{H} - \mu\hat{N})] | \phi_{k-1} \rangle \\
&\times \langle \phi_1 | \exp[-\varepsilon(\hat{H} - \mu\hat{N})] | \phi \rangle. \tag{3.23}
\end{aligned}$$

Na Equação (3.23), como consequência da não comutatividade dos operadores de criação e destruição, não é permitido calcular os elementos de matriz diretamente. Para prosseguir a dedução da integral de caminho, supõe-se que  $\hat{H}(c^{\dagger}, c)$  está em ordem normal, possibilitando utilizar a aproximação (3.17), que disponibiliza um resultado correto até segunda ordem em  $\varepsilon$ . Assim, a expressão (3.23) torna-se

$$\begin{aligned}
Z &\approx \lim_{M \rightarrow \infty} \int \prod_{k=1}^M \prod_{\alpha} d\phi_{\alpha,k}^* d\phi_{\alpha,k} e^{-\sum_{k=1}^M \sum_{\alpha} \phi_{\alpha,k}^* \phi_{\alpha,k}} \\
&\times \langle -\phi | : \exp[-\varepsilon(\hat{H} - \mu\hat{N})] : | \phi_{M-1} \rangle \exp \left\{ \sum_{k=2}^{M-1} \sum_{\alpha} [\phi_{\alpha,k}^* \phi_{\alpha,k-1} \right. \\
&\quad \left. + -\varepsilon (H(\phi_{\alpha,k}^*; \phi_{\alpha,k-1}) - \mu\phi_{\alpha,k}^* \phi_{\alpha,k-1}) \right\} \langle \phi_1 | : \exp[-\varepsilon(\hat{H} - \mu\hat{N})] : | \phi \rangle. \tag{3.24}
\end{aligned}$$

Usando as condições de contorno antiperiódicas,

$$\begin{aligned}
Z &\approx \lim_{M \rightarrow \infty} \int \prod_{k=1}^M \prod_{\alpha} d\phi_{\alpha,k}^* d\phi_{\alpha,k} e^{-\sum_{k=1}^M \sum_{\alpha} \phi_{\alpha,k}^* \phi_{\alpha,k}} \\
&\times \exp \left\{ \sum_{k=2}^M \sum_{\alpha} [\phi_{\alpha,k}^* \phi_{\alpha,k-1} - \varepsilon (H(\phi_{\alpha,k}^*; \phi_{\alpha,k-1}) - \mu \phi_{\alpha,k}^* \phi_{\alpha,k-1})] \right\} \\
&\times \exp \left\{ \sum_{\alpha} [-\phi_{\alpha,1}^* \phi_{\alpha,M} - \varepsilon (H(\phi_{\alpha,1}^*; -\phi_{\alpha,M}) + \mu \phi_{\alpha,1}^* \phi_{\alpha,M})] \right\}. \quad (3.25)
\end{aligned}$$

Finalmente, pode-se reescrever a última equação evidenciando  $\varepsilon$ , utilizando a definição  $\phi_{\alpha} \equiv -\phi_{\alpha,M}$  e reagrupando alguns termos:

$$\begin{aligned}
Z &\approx \lim_{M \rightarrow \infty} \int \prod_{k=1}^M \prod_{\alpha} d\phi_{\alpha,k}^* d\phi_{\alpha,k} \\
&\times \exp \left\{ -\varepsilon \sum_{k=1}^M \sum_{\alpha} \left[ \phi_{\alpha,k}^* \left( \frac{\phi_{\alpha,k} - \phi_{\alpha,k-1}}{\varepsilon} - \mu \phi_{\alpha,k-1} \right) + H(\phi_{\alpha,k}^*; \phi_{\alpha,k-1}) \right] \right\}, \quad (3.26)
\end{aligned}$$

sendo que os termos da ordem de  $\varepsilon^2$  são desprezados.

Na Equação (3.26), os operadores  $c^{\dagger}$  e  $c$  foram substituídos por variáveis de Grassmann quando se utilizou a expressão (3.17). Assim, a função de partição está escrita em termos das variáveis de Grassmann.

A expressão (3.26) pode ser representada em termos de uma notação de trajetórias. Para tal, associa-se  $\phi_{\alpha}^*(\tau)$  e  $\phi_{\alpha}(\tau)$  com variáveis deslocadas por um passo  $\phi_{\alpha,k}^*$  e  $\phi_{\alpha,k-1}$ , respectivamente, permitindo substituir  $H(\phi_{\alpha,k}^*; \phi_{\alpha,k-1})$  por  $H(\phi_{\alpha}^*(\tau); \phi_{\alpha}(\tau))$ . Já no limite de  $M$  tendendo ao infinito, o somatório em  $k$  pode ser substituído por uma integral em  $\tau$ , com a diferença  $\frac{\phi_{\alpha,k} - \phi_{\alpha,k-1}}{\varepsilon} = \frac{\phi_{\alpha}(\tau) - \phi_{\alpha}(\tau - \varepsilon)}{\varepsilon}$  sendo identificada como a derivada  $\frac{\partial}{\partial \tau} \phi_{\alpha}(\tau)$ . Desse modo, a Equação (3.26) é dada por

$$\begin{aligned}
Z &= \int_{\phi(\beta) = -\phi(0)} D(\phi_{\alpha}^*(\tau) \phi_{\alpha}(\tau)) \\
&\times \exp \left( - \int_0^{\beta} d\tau \sum_{\alpha} \left\{ \phi_{\alpha}^*(\tau) \left[ \frac{\partial}{\partial \tau} \phi_{\alpha}(\tau) - \mu \phi_{\alpha}(\tau) \right] + H(\phi_{\alpha}^*(\tau); \phi_{\alpha}(\tau)) \right\} \right), \quad (3.27)
\end{aligned}$$

com a seguinte notação:

$$\int_{\phi(\beta) = -\phi(0)} D(\phi_{\alpha}^*(\tau) \phi_{\alpha}(\tau)) = \lim_{M \rightarrow \infty} \int \prod_{k=1}^M \prod_{\alpha} d\phi_{\alpha,k}^* d\phi_{\alpha,k}, \quad (3.28)$$

onde os limites de integração enfatizam as condições de contorno antiperiódicas para sistemas fermiônicos.

A técnica de integrais de caminho fermiônica disponibiliza um método para calcular a função de partição de modelos fermiônicos. Para ilustrar algumas de suas aplicações, nas próximas seções são realizados estudos relativos ao vidro de spin fermiônico (Theumann e Gusmão (1984) e Theumann et al. (2002)) que utilizam a Equação (3.27) na obtenção da função de partição.

## 3.2 Formulação fermiônico para o vidro de spin de Ising em um campo transverso

Nesta seção, é apresentada uma breve revisão da formulação fermiônico do modelo de vidro de spin de Ising em um campo transverso  $\Gamma$ . O estudo é baseado no trabalho de Theumann et al. (2002), no qual o formalismo das integrais de caminho fermiônicas, a aproximação estática e a simetria de réplicas são utilizados na obtenção da energia livre e das demais quantidades termodinâmicas.

A representação fermiônica do problema vidro de spin foi inicialmente usada por Theumann e Gusmão (1984) no estudo do VS quântico com interações do tipo proposto por Sherrington e Kirkpatrick (1975) (SK). Uma vantagem da representação fermiônica é que os operadores de spin são escritos em termos de operadores de criação e destruição de férmions, os quais também podem representar elétrons que participam de outros processos físicos tais como supercondutividade (Magalhães e Theumann (1999)) e efeito Kondo (Theumann et al. (2001)). Por outro lado, para manterem as relações de comutação corretas, os operadores de spin na representação fermiônica atuam sobre o espaço de Fock com quatro estados por sítio (estados com zero, um ou dois férmions), sendo que, desses estados, somente dois (os estados magnéticos com um férmion) podem representar estados pertencentes ao espaço de spins. Essa diferença é detalhada no próximo segmento, que trata do modelo fermiônico fazendo uma distinção entre os modelo que admitem quatro estados por sítio (modelo 4S) e dois estados por sítio (modelo 2S).

### 3.2.1 Modelo

O modelo considerado neste estudo é dado pelo hamiltoniano (Theumann et al. (2002))

$$\hat{H} = - \sum_{i \neq j} V_{ij} \hat{S}_i^z \hat{S}_j^z - 2\Gamma \sum_i \hat{S}_i^x \quad (3.29)$$

onde as somas sobre os índices  $i$  e  $j$  são estendidas aos  $N$  sítios da rede. O primeiro termo do modelo (3.29) representa um acoplamento entre momentos magnéticos de Ising locali-

zados nos sítios  $i$  e  $j$ . As interações de troca  $V_{ij}$  são variáveis aleatórias que independem dos pares de sítios  $(i, j)$  e seguem uma distribuição de probabilidades Gaussiana:

$$P_V(V_{ij}) = \sqrt{\frac{N}{16\pi V^2}} \exp\left[-\frac{V_{ij}^2}{16V^2}N\right]. \quad (3.30)$$

O segundo termo da Equação (3.29) expressa um campo magnético  $\Gamma$  não comutativo aplicado na direção transversa ao acoplamento de Ising.

Os operadores de spin da Equação (3.29) satisfazem as relações de comutação (2.11) e são representados em segunda quantização através de combinações bilineares de férmions com spins localizados nos sítios:

$$\hat{S}_i^z = \frac{1}{2}(\hat{n}_{i\uparrow} - \hat{n}_{i\downarrow}) \text{ e } \hat{S}_i^x = \frac{1}{2}(c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow} + c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\uparrow}) \quad (3.31)$$

em que  $c_{i\sigma}^\dagger$  ( $c_{i\sigma}$ ) é um operador de criação (aniquilação) de um férmion com spin  $\sigma$  ( $\uparrow$  ou  $\downarrow$ ) no sítio  $i$ , e  $\hat{n}_{i\sigma} = c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}$  fornece o número de férmions no sítio  $i$  com projeção de spin  $\sigma$ .

No modelo (3.29),  $\hat{S}^z$  e  $\hat{S}^x$  estão representados em termos de operadores de férmions com spin. Nesse caso, o Hamiltoniano está definido no espaço de Fock com quatro estados por sítio: um estado sem férmion (vazio), dois estados com um único férmion e, finalmente, um estado com dois férmions por sítio. Esquemáticamente, esses estados podem ser expressos como:

$$|0\ 0\rangle, \quad |\uparrow\ 0\rangle, \quad |0\ \downarrow\rangle \text{ e } |\uparrow\ \downarrow\rangle. \quad (3.32)$$

Portanto,  $\hat{S}^z$  (ver Equação (3.31)) possui quatro autovalores: dois magnéticos, quando  $\hat{S}^z$  atua nos estados com um férmion por sítio ( $|\uparrow\ 0\rangle$  e  $|0\ \downarrow\rangle$ ), e dois não magnéticos obtidos quando  $\hat{S}^z$  atua nos estados vazios ou duplamente ocupados ( $|0\ 0\rangle$  e  $|\uparrow\ \downarrow\rangle$ ). Nesse sentido, o modelo fermiônico (3.29) difere dos modelos representados no espaço de spins 1/2, no qual  $\hat{S}^z$  possui somente os dois estados magnéticos. Nesta seção, segue-se a referência Theumann et al. (2002) que faz distinção entre dois modelos na formulação fermiônica: um permite os quatro estados por sítio (modelo 4S), porém exige ocupação média de um férmion por sítio (Theumann e Gusmão (1984)); o outro modelo restringe o operador  $\hat{S}^z$  ao subespaço onde os estados não magnéticos são proibidos. Esse é o modelo 2S, que admite somente estados com um férmion por sítio, evitando por meio de restrições a presença dos estados vazio ou duplamente ocupados.

Dando seqüência ao trabalho fermiônico, deve-se considerar as funções de partição dos dois modelos descritos acima. A função de partição do modelo 4S não apresenta restrições,

logo:

$$Z_{4S} = \text{Tr}\{e^{-\beta\hat{H}}\}, \quad (3.33)$$

sendo  $\text{Tr}$  o traço e  $\beta = 1/T$  ( $T$  a temperatura). Por outro lado, no modelo 2S, deve-se introduzir uma restrição quanto à presença dos estados não magnéticos. Para isso, segue-se a referência Wietheger e Sherrington (1986), na qual a função de partição considera somente estados com um férmion por sítio:  $\hat{n}_{j\uparrow} + \hat{n}_{j\downarrow} = 1$ . Essa restrição é obtida usando a função delta de Kronecker, tal que:

$$Z_{2S} = \text{Tr}\{e^{-\beta\hat{H}} \prod_j^N \delta(\hat{n}_{j\uparrow} + \hat{n}_{j\downarrow} - 1)\} \quad (3.34)$$

e a função  $\delta$  de Kronecker representada na forma integral

$$\delta(\hat{n}_{j\uparrow} + \hat{n}_{j\downarrow} - 1) = \int_0^{2\pi} \frac{dx_j}{2\pi} \exp[ix_j(\hat{n}_{j\uparrow} + \hat{n}_{j\downarrow} - 1)]. \quad (3.35)$$

O formalismo Lagrangeano das integrais de caminho fermiônicas é usado na obtenção das funções de partição de ambos os modelos (ver seção 3.1 e Negele e Orland (1988)). Nesse caso, as variáveis de Grassmann  $\phi$  e  $\phi^*$  são associadas aos operadores  $c$  e  $c^\dagger$ . Em particular, a representação integral da função  $\delta$  de Kronecker (3.35) é adotada no modelo 2S, permitindo uma notação compacta para a forma funcional que expressa as funções  $Z_{2S}$  e  $Z_{4S}$  (Theumann et al. (2002)):

$$Z_{\{\mu\}} = \int D[\phi_j^* \phi_j] \int_0^{2\pi} \prod_j \frac{dx_j}{2\pi} e^{-\mu_j} e^{\mathcal{A}\{\mu\}} \quad (3.36)$$

com

$$\int D[\phi^* \phi] = \lim_{M \rightarrow \infty} \int \prod_{k=1}^M \prod_j \prod_{\sigma=\uparrow,\downarrow} d\phi_{j\sigma,k}^* d\phi_{j\sigma,k} \quad (3.37)$$

e a ação  $\mathcal{A}\{\mu\}$  dada por

$$\mathcal{A}\{\mu\} = \int_0^\beta d\tau \left\{ \sum_j \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \phi_{j\sigma}^*(\tau) \left( \frac{\partial}{\partial \tau} + \mu_j \right) \phi_{j\sigma}(\tau) - H(\phi_j^*(\tau), \phi_j(\tau)) \right\}, \quad (3.38)$$

onde  $\tau$  representa o tempo imaginário e  $\mu_j = ix_j$  para o modelo 2S ou  $\mu_j = 0$  para o modelo 4S, que corresponde a situação de semipreenchimento. É interessante notar que os operadores fermiônicos da Equação (3.38) foram substituídos pelas variáveis de Grassmann dependentes do tempo  $\tau$  ( $\phi_j^*(\tau)$  e  $\phi_j(\tau)$ ).

Na Equação (3.38), as funções  $\phi_{j\sigma}(\tau)$  e  $\phi_{j\sigma}^*(\tau)$  são exploradas na representações de

Fourier:

$$\phi_{j\sigma}(\tau) = \sum_{\omega} e^{-i\omega\tau/\beta} \phi_{j\sigma}(\omega) \quad \text{e} \quad (3.39)$$

$$\phi_{j\sigma}^*(\tau) = \sum_{\omega} e^{i\omega\tau/\beta} \phi_{j\sigma}^*(\omega), \quad (3.40)$$

sendo as frequências  $\omega = (2m + 1)\pi$  ( $m = 0, \pm 1, \dots$ ) escolhidas para satisfazerem condições de contorno anti-simétricas:

$$\phi_{j\sigma}(\tau + \beta) = -\phi_{j\sigma}(\tau) \quad , \quad \phi_{j\sigma}^*(\tau + \beta) = -\phi_{j\sigma}^*(\tau) \quad (3.41)$$

e as transformadas inversas dadas por

$$\phi_{j\sigma}(\omega) = \int_0^{\beta} d\tau e^{i\omega\tau/\beta} \phi_{j\sigma}(\tau) \quad \text{e} \quad (3.42)$$

$$\phi_{j\sigma}^*(\omega) = \int_0^{\beta} d\tau e^{-i\omega\tau/\beta} \phi_{j\sigma}^*(\tau). \quad (3.43)$$

Através das Equações (3.39) e (3.40), a integral em  $\tau$  da expressão (3.38) poder ser substituída por um somatório sobre as frequências  $\omega$ . Para isso, usam-se explicitamente as séries de Fourier em cada um dos termos da ação (3.38), seguidas diretamente das propriedades de ortogonalidade da transformada inversa, tal que:

$$A\{\mu\} = A_{0\Gamma} + A_{SG} \quad (3.44)$$

com

$$A_{0\Gamma} = \sum_j \sum_{\omega} \underline{\phi}_j^{\dagger}(\omega) [(i\omega + \mu_j)\underline{I} + \beta\Gamma\underline{\sigma}^x] \underline{\phi}_j(\omega), \quad (3.45)$$

$$A_{SG} = \sum_{\Omega} \sum_{ij} \beta V_{ij} S_i^z(\Omega) S_j^z(-\Omega) \quad \text{e} \quad (3.46)$$

$$S_i^z(\Omega) = \frac{1}{2} \sum_{\omega} \underline{\phi}_i^{\dagger}(\omega + \Omega) \underline{\sigma}^z \underline{\phi}_i(\omega), \quad (3.47)$$

onde  $\omega = (2m + 1)\pi$  e  $\Omega = 2m\pi$  ( $m = 0, \pm 1, \dots$ ) correspondem as frequências de Matsubara. As matrizes nas Equação (3.45) e (3.47) são definidas como:

$$\underline{\phi}_i(\omega) = \begin{bmatrix} \phi_{i\uparrow}(\omega) \\ \phi_{i\downarrow}(\omega) \end{bmatrix}; \quad \underline{I} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}; \quad \underline{\sigma}^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}; \quad \underline{\sigma}^x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.48)$$

A energia livre por sítio de um sistema com desordem “quenched”<sup>1</sup> é dada pela média

---

<sup>1</sup>Diz-se que um sistema (modelo) possui desordem temperada (“quenched”) quando este apresenta interações dadas por variáveis aleatórias independentes do tempo.



configuracional do logaritmo da função de partição

$$\beta F_{\{\mu\}} = -\frac{1}{N} \langle \ln Z_{\{\mu\}} \rangle_{V_{ij}} \quad (3.49)$$

em que  $\langle \dots \rangle_{V_{ij}}$  representa a média sobre a variável aleatória  $V_{ij}$ . A dificuldade em encontrar uma expressão analítica para a Equação (3.49) foi resolvida através do método das réplicas:

$$\beta F_{\{\mu\}} = -\frac{1}{N} \lim_{n \rightarrow 0} \frac{\langle Z_{\{\mu\}}^n \rangle_{V_{ij}} - 1}{n} \quad (3.50)$$

onde, para qualquer  $n$  inteiro positivo,  $Z_{\{\mu\}}^n$  é a função de partição replicada  $n$  vezes, isto é, a função de partição de um conjunto de  $n$  réplicas idênticas do sistema original não interagentes. Na formulação estudada aqui,  $Z_{\{\mu\}}^{(n)} \equiv \langle Z_{\{\mu\}}^n \rangle_{V_{ij}}$  corresponde a

$$\begin{aligned} Z_{\{\mu\}}^{(n)} = & \int_0^{2\pi} \prod_{\alpha=1}^n \prod_j \frac{dx_{j\alpha}}{2\pi} e^{-\mu_{j\alpha}} \int D(\phi_\alpha^* \phi_\alpha) \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{ij} dV_{ij} \sqrt{\frac{N}{16\pi V^2}} \\ & \times \exp \left[ \sum_{\alpha=1}^n A_{0\Gamma}^\alpha - \frac{1}{2} \sum_{ij} \left( \frac{V_{ij}^2 N}{8V^2} - 2\beta V_{ij} \sum_{\alpha=1}^n S_{i\alpha}^z S_{j\alpha}^z \right) \right] \end{aligned} \quad (3.51)$$

em que  $\alpha$  denota o índice das réplicas com  $\alpha = 1, \dots, n$ . Na Equação (3.51), foi adotada a aproximação estática que considera somente o termo com  $\Omega = 0$  no somatório da Equação (3.47), sendo  $S_{j\alpha}^z \equiv S_{j\alpha}^z(\Omega = 0)$ . As integrais sobre  $V_{ij}$  são calculadas analiticamente, resultando em

$$Z_{\{\mu\}}^{(n)} = \int_0^{2\pi} \prod_{\alpha,j} \frac{dx_{j\alpha}}{2\pi} e^{-\mu_{j\alpha}} \int D(\phi_\alpha^* \phi_\alpha) \exp \left[ \sum_{\alpha=1}^n A_{0\Gamma}^\alpha + \frac{8\beta^2 V^2}{N} \sum_{ij} \left( \sum_{\alpha=1}^n S_{i\alpha}^z S_{j\alpha}^z \right)^2 \right], \quad (3.52)$$

sendo que o termo contendo interações entre os sítios  $i$  e  $j$  pode ser reescrito como

$$\frac{1}{N} \sum_{ij} \left[ \sum_{\alpha=1}^n S_{i\alpha}^z S_{j\alpha}^z \right]^2 = \frac{1}{N} \sum_{\alpha\gamma=1}^n \left[ \left( \sum_{j=1}^N S_{j\alpha}^z S_{j\gamma}^z \right)^2 - \sum_{j=1}^N (S_{j\alpha}^z)^2 (S_{j\gamma}^z)^2 \right]. \quad (3.53)$$

No limite termodinâmico, o último termo da Equação (3.53) é desprezível quando comparado com  $\left( \sum_{j=1}^N S_j^\alpha S_j^\beta \right)^2$ , que é da ordem de  $N^2$ . Logo,

$$\frac{1}{N} \sum_{ij} \left[ \sum_{\alpha=1}^n S_{i\alpha}^z S_{j\alpha}^z \right]^2 \approx \frac{1}{N} \sum_{\alpha\gamma=1}^n \left[ \sum_{j=1}^N S_{j\alpha}^z S_{j\gamma}^z \right]^2. \quad (3.54)$$

Levando a Equação (3.54) em (3.52), tem-se

$$Z_{\{\mu\}}^{(n)} = \int_0^{2\pi} \prod_{\alpha,j} \frac{dx_{j\alpha}}{2\pi} e^{-\mu_{j\alpha}} \int D[\phi_\alpha^* \phi_\alpha] \exp \left[ \sum_{\alpha=1}^n A_{0\Gamma}^\alpha + \frac{1}{2} \sum_{\alpha\gamma} \left( \frac{4\beta V}{\sqrt{N}} \sum_j S_{j\alpha}^z S_{j\gamma}^z \right)^2 \right]. \quad (3.55)$$

O termo quadrático, presente na Equação (3.55), é linearizado usando a transformação Hubbard-Stratonovich:

$$\sqrt{\det(A)} \int_{-\infty}^{\infty} \prod_j \frac{dy_j}{\sqrt{2\pi}} \exp \left( -\frac{1}{2} y_j A_{jk} y_k + P_j y_j \right) = \exp \left( \frac{1}{2} P_j A_{jk}^{-1} P_k \right), \quad (3.56)$$

onde os índices repetidos expressam uma soma. Através da transformação (3.56), campos auxiliares  $y_j$  se acoplam ao sistema e, em uma formulação de integrais funcionais, eles podem assumir interpretações relacionadas a parâmetros de ordem. Na Equação (3.55), a linearização introduz elementos  $q_{\alpha\gamma}$  pertencentes à matriz das réplicas:

$$Z_{\{\mu\}}^{(n)} = \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{\alpha\gamma} dq_{\alpha\gamma} \frac{\beta V \sqrt{N}}{\sqrt{2\pi}} \exp \left( -\frac{N\beta^2 V^2}{2} \sum_{\alpha\gamma} q_{\alpha\gamma}^2 \right) \int_0^{2\pi} \prod_{\alpha=1}^n \prod_j \frac{dx_{j\alpha}}{2\pi} \times e^{-\mu_{j\alpha}} \int D[\phi^{*\alpha} \phi^\alpha] \exp \left( \sum_{\alpha=1}^n A_{0\Gamma}^\alpha + 4\beta^2 V^2 \sum_j \sum_{\alpha\gamma} q_{\alpha\gamma} S_{j\alpha}^z S_{j\gamma}^z \right), \quad (3.57)$$

em que o problema original se reduziu ao problema efetivo de um único sítio com interações entre réplicas. Nesse caso, os valores de equilíbrio dos elementos de matriz  $q_{\alpha\gamma}$  são definidos pela condição  $\delta Z_{\{\mu\}}^{(n)} / \delta q_{\alpha\gamma} = 0$ , isto é,

$$q_{\alpha\gamma} = \frac{4}{N} \left\langle \sum_i S_{i\alpha}^z S_{i\gamma}^z \right\rangle_{ef} \quad (3.58)$$

e  $\langle \dots \rangle_{ef}$  expressa uma média em relação ao problema efetivo (3.57).

Considerando simetria translacional, a função de partição replicada (3.57) é fatorada em funções de partições de sítios independentes:

$$Z_{\{\mu\}}^{(n)} = \int dU \exp \left\{ -N \left[ \frac{\beta^2 V^2}{2} \left( \sum_\alpha q_{\alpha\alpha}^2 + \sum_{\alpha\gamma} q_{\alpha\gamma}^2 \right) - \ln \Lambda_{\{\mu\}} \right] \right\} \quad (3.59)$$

onde  $\int dU \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{\alpha\gamma} dq_{\alpha\gamma} \frac{\beta V \sqrt{N}}{\sqrt{2\pi}}$ ,

$$\Lambda_{\{\mu\}} = \prod_\alpha \int_0^{2\pi} \frac{dx_\alpha}{2\pi} e^{-\mu_\alpha} \int D[\phi_\alpha^*, \phi_\alpha] \exp[\bar{H}] \quad (3.60)$$

e

$$\bar{H} = \sum_{\alpha} \sum_{\omega} \phi_{\alpha}^{\dagger}(\omega) [(i\omega + \mu_{\alpha})\underline{I} + \beta\Gamma\underline{g}^x] \phi_{\alpha}(\omega) + 4\beta^2 V^2 \sum_{\alpha, \gamma} q_{\alpha\gamma} S_{\alpha}^z S_{\gamma}^z. \quad (3.61)$$

No limite termodinâmico, o conjunto de integrais em  $\int dU$  pode ser calculado exatamente pelo método “steepest descent”,<sup>2</sup> no qual os elementos da matriz das réplicas são dados por seus valores estacionários

$$q_{\alpha\gamma} = 4\langle S_{\alpha}^z S_{\gamma}^z \rangle_{\bar{H}} \quad \text{e} \quad q_{\alpha\alpha} = 4\langle S_{\alpha}^z S_{\alpha}^z \rangle_{\bar{H}} \quad (3.62)$$

em que  $\langle \dots \rangle_{\bar{H}}$  representa uma média sobre a interação efetiva (3.61). Nesse caso, a energia livre por sítio pode ser escrita como

$$\beta F_{\{\mu\}} = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{n} \left[ \frac{\beta^2 V^2}{2} \left( \sum_{\alpha} q_{\alpha\alpha}^2 + \sum_{\alpha\gamma} q_{\alpha\gamma}^2 \right) - \ln \Lambda_{\{\mu\}} \right] \quad (3.63)$$

onde  $q_{\alpha\alpha}$  e  $q_{\alpha\gamma}$  satisfazem equações ponto de sela da expressão (3.63).

A partir da Equação (3.63), a solução desse problema segue, em linhas gerais, com o seguinte procedimento. Primeiro, conjectura-se uma forma geral para a matriz das réplicas, que pode depender de um número finito de parâmetros, os quais devem satisfazer as equações ponto de sela. Então, o limite das réplicas é adotado. Por fim, deve-se verificar se a solução encontrada representa um extremo estável da energia livre. Para tal, a solução obtida deve gerar uma matriz de Hessian ( $\delta F^2 / \delta q_{\alpha\gamma}^2$ ) definida positivamente.

### 3.2.2 Solução com simetria de réplicas

A primeira tentativa para os elementos da matriz das réplicas é a aproximação com simetria de réplicas (SR) (ver Sherrington e Kirkpatrick (1975) e Theumann et al. (2002)):

$$q_{\alpha\gamma} = \begin{cases} r_{SR} & \text{para todo } \alpha = \gamma \\ q & \text{para todo } \alpha \neq \gamma. \end{cases} \quad (3.64)$$

Nesse caso, a fase VS é caracterizada por um único parâmetro de ordem  $q$ . De acordo com a discussão na seção 2.2 para o problema de VS clássico, essa aproximação admite somente uma única configuração estável para o espaço de fases que caracteriza o comportamento VS.

Na aproximação com SR, as somas sobre os índices de réplica nas Equações (3.61) e

---

<sup>2</sup>  $\int dx \exp[-Nf(x)] \approx \int dx \exp[-Nf(x_0) - N\frac{1}{2}f''(x_0)(x - x_0)^2 + \dots]$ , onde  $f'(x_0) = 0$  define um ponto de sela  $x_0$ . No limite de  $N \rightarrow \infty$ , o termo quadrático pode ser desprezado se  $f''(x_0) \geq 0$ , então:  $\int dx \exp[-Nf(x)] \approx \exp[-Nf(x_0)]$ .

(3.63) são realizadas, ou seja,

$$\beta F_{\{\mu\}}^{SR} = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{n} \left[ n \frac{\beta^2 V^2}{2} (r_{SR}^2 + (n-1)q^2) - \ln \Lambda_{\{\mu\}}^{RS} \right] \quad (3.65)$$

com

$$\Lambda_{\{\mu\}}^{RS} = \prod_{\alpha} \int_0^{2\pi} \frac{dx_{\alpha}}{2\pi} e^{-\mu_{\alpha}} \int D[\phi_{\alpha}^*, \phi_{\alpha}] \exp \left\{ \sum_{\alpha} \sum_{\omega} \phi_{\alpha}^{\dagger}(\omega) [(i\omega + \mu_{\alpha})\underline{I} + \beta\Gamma\sigma^x] \phi_{\alpha}(\omega) + 4\beta^2 V^2 [(r_{SR} - q) \sum_{\alpha} (S_{\alpha}^z)^2 + q (\sum_{\alpha} S_{\alpha}^z)^2] \right\}, \quad (3.66)$$

sendo estipulado que

$$\sum_{\alpha \neq \gamma} S_{\alpha}^z S_{\gamma}^z = (\sum_{\alpha} S_{\alpha}^z)^2 - \sum_{\alpha} (S_{\alpha}^z)^2. \quad (3.67)$$

Novamente, o problema foi linearizado introduzindo dois novos campos auxiliares ( $z$  e  $\xi_{\alpha}$ ) e

$$\Lambda_{\{\mu\}}^{RS} = \int_{-\infty}^{\infty} Dz \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{\alpha} D\xi_{\alpha} \int_0^{2\pi} \frac{dx_{\alpha}}{2\pi} e^{-\mu_{\alpha}} \int D[\phi_{\alpha}^*, \phi_{\alpha}] \exp \left\{ \sum_{\alpha} \sum_{\omega} \phi_{\alpha}^{\dagger}(\omega) [(i\omega + \mu_{\alpha})\underline{I} + \beta\Gamma\sigma^x] \phi_{\alpha}(\omega) + \sum_{\alpha} [2\beta V \sqrt{2q} + 2\beta V \sqrt{2(r_{SR} - q)} \xi_{\alpha}] S_{\alpha}^z \right\}, \quad (3.68)$$

ou usando a definição (3.47),

$$\Lambda_{\{\mu\}}^{RS} = \int_{-\infty}^{\infty} Dz \left[ \int_{-\infty}^{\infty} D\xi \int_0^{2\pi} \frac{dx e^{-\mu}}{2\pi} \int D[\phi^*, \phi] \exp \left[ \sum_{\omega} \Phi^{\dagger}(\omega) \underline{G}_{SR}^{-1}(\omega) \underline{\Phi}(\omega) \right] \right]^n \quad (3.69)$$

onde

$$\underline{G}_{RS}^{-1}(\omega) = \begin{pmatrix} i\omega + \mu + \beta h_{SR} & \beta\Gamma \\ \beta\Gamma & i\omega_n + \mu - \beta h_{SR} \end{pmatrix} \quad (3.70)$$

com  $h_{SR} = V\sqrt{2q} + V\sqrt{2(r_{SR} - q)}\xi$  e  $Dx = dx e^{-x^2/2}/\sqrt{2\pi}$  ( $x = z$  ou  $\xi$ ).

Na Equação (3.69), a integral gaussiana sobre os campos de Grassmann é calculada, e a soma nas frequências de Matsubara efetuada. Finalmente, a condição de restrição quanto ao número de estados admitidos em cada modelo pode ser explicitamente adotada. Levando a resultante desse processo na Equação (3.65), obtém-se a seguinte expressão para a energia livre com simetria de réplicas<sup>3</sup>:

$$\beta f_s^{SR} = \frac{\beta^2 V^2}{2} (r_{SR}^2 - q^2) - \int_{-\infty}^{\infty} Dz \ln K_s^{SR} - \ln 2 \quad (3.71)$$

<sup>3</sup>No limite de  $n \rightarrow 0$ , são usadas as seguintes relações matemáticas:  $\ln[\int Dz (K_s^{SR})^n] = \ln[\int Dz \exp(n \ln K_s^{SR})] \approx \ln[\int Dz (1 + n \ln K_s^{SR}) + o(n^2)] = \ln[1 + n \int Dz \ln K_s^{SR}] \approx n \int Dz \ln K_s^{SR}$ .

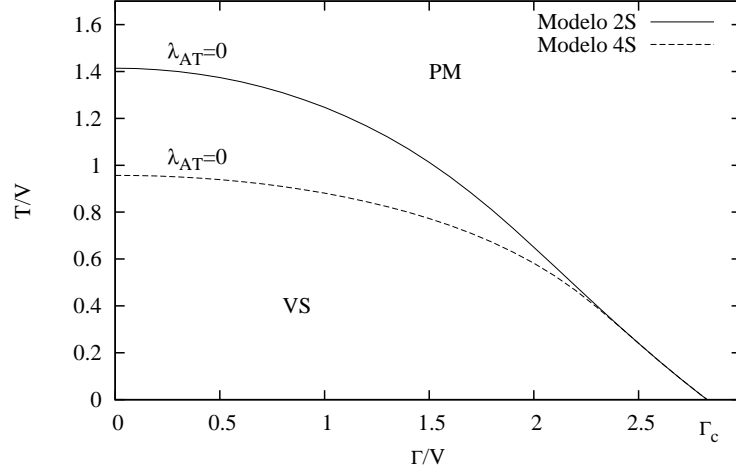


Figura 5: Diagramas de fase  $T/V$  versus  $\Gamma/V$  para os modelos 2S e 4S. A figura reproduz resultados da referência Theumann et al. (2002).

com

$$K_s^{SR} = \frac{s-2}{2} + \int_{-\infty}^{\infty} D\xi \cosh(\beta\sqrt{h_{SR}^2 + \Gamma^2}) \quad (3.72)$$

onde  $s$  (=2 ou 4) representa o número de estados admitidos em cada modelo e os parâmetros de ordem  $q$  e  $r_{SR}$  são dados pela condição de extremo da Equação (3.71):

$$q = \int_{-\infty}^{\infty} Dz \frac{1}{(K_s^{SR})^2} \left[ \int_{-\infty}^{\infty} D\xi \frac{h_{SR} \sinh(\beta\sqrt{h_{SR}^2 + \Gamma^2})}{\sqrt{h_{SR}^2 + \Gamma^2}} \right]^2 \quad (3.73)$$

e

$$r_{SR} = \int_{-\infty}^{\infty} Dz \frac{1}{K_s^{SR}} \int_{-\infty}^{\infty} D\xi \left[ \frac{h_{SR}^2 \cosh(\beta\sqrt{h_{SR}^2 + \Gamma^2})}{h_{SR}^2 + \Gamma^2} + \frac{\Gamma^2 \sinh(\beta\sqrt{h_{SR}^2 + \Gamma^2})}{\beta(h_{SR}^2 + \Gamma^2)^{3/2}} \right]. \quad (3.74)$$

A análise da estabilidade da solução com SR é realizada seguindo o trabalho de Almeida e Thouless (1978). Nesse caso, a condição de estabilidade é dada pelo autovalor  $\lambda_{AT} > 0$ , em que

$$\lambda_{AT} = 1 - 2(\beta V)^2 \int_{-\infty}^{\infty} Dz \frac{1}{(K_s^{SR})^4} \left\{ \left[ \int_{-\infty}^{\infty} D\xi \frac{h_{SR} \sinh(\beta\sqrt{h_{SR}^2 + \Gamma^2})}{\sqrt{h_{SR}^2 + \Gamma^2}} \right]^2 - K_s^{SR} \int_{-\infty}^{\infty} D\xi \left[ \frac{h_{SR}^2 \cosh(\beta\sqrt{h_{SR}^2 + \Gamma^2})}{h_{SR}^2 + \Gamma^2} + \frac{\Gamma^2 \sinh(\beta\sqrt{h_{SR}^2 + \Gamma^2})}{\beta(h_{SR}^2 + \Gamma^2)^{3/2}} \right] \right\}. \quad (3.75)$$

A região que limita a estabilidade da solução com SR ( $\lambda_{AT} = 0$ ) é comumente denominado linha de Almeida-Thouless. Quando a condição de estabilidade não é satisfeita ( $\lambda_{AT} < 0$ ), diz-se que ocorre a quebra da simetria de réplicas (QSR).

Resultados numéricos das Equações (3.73), (3.74) e (3.75) são exibidos na Figura 5, que mostra diagramas de fase da temperatura pelo campo transversal para os modelos 2S e 4S. Os resultados apresentam uma transição entre as fases paramagnética (PM) e vidro de spin (VS), quando a temperatura decresce com  $\Gamma < \Gamma_c = 2\sqrt{2}V$ , que é o valor do campo transversal  $\Gamma$ , onde ocorre uma transição de fase governada somente por flutuações quânticas; isto é,  $\Gamma_c$  é um ponto crítico quântico (PCQ). Com  $\Gamma$  acima de  $\Gamma_c$ , o sistema é sempre paramagnético, independente da temperatura. Mas, quando  $\Gamma < \Gamma_c$  a fase PM (temperaturas altas) sofre uma transição ao VS em temperaturas baixas. Na Figura 5, as temperaturas de transições dos dois modelos são gradualmente diminuídas com o aumento de  $\Gamma$  até atingirem o valor zero, em  $\Gamma = \Gamma_c$ . A temperatura crítica do modelo 2S é maior do que a do modelo 4S ( $\Gamma < \Gamma_c$ ), porém à medida que  $\Gamma$  aumenta as duas temperaturas críticas convergem para os mesmos valores. Em ambos os modelos, as transições de fase são de segunda ordem, e a linha de Almeida-Thouless segue toda a extensão das transições, logo, a solução com SR é instável em toda fase VS.

### 3.2.3 Solução com quebra da simetria de réplicas

Agora, analisa-se o modelo (3.29) na solução com um passo de quebra de simetria de réplicas (1P-QSR). Para isso, usa-se como referência o trabalho Zimmer e Magalhães (2006a). Nesse caso, é adotado o esquema de parametrização proposto por Parisi (1980) para a quebra de simetria de réplicas. Portanto, a matriz das réplicas  $\underline{Q}$ , de ordem  $n \times n$  no espaço das réplicas, é dividida em  $n/m$  grupos com  $m$  réplicas cada ( $n$  múltiplo inteiro de  $m$ ). Então, a matriz  $\underline{Q}$  consiste de matrizes diagonais de ordem  $m \times m$ , nas quais os elementos da diagonal são iguais a  $r$ , e os elementos fora da diagonal são iguais a  $q_1$ , e de matrizes fora da diagonal com elementos  $q_0$ . Em uma notação matemática, tem-se:

$$q_{\alpha\gamma} = \begin{cases} r & \text{se } \alpha = \gamma \\ q_1 & \text{se } \alpha \neq \gamma \text{ e } I(\alpha/m) = I(\gamma/m) \\ q_0 & \text{se } \alpha \neq \gamma \text{ e } I(\alpha/m) \neq I(\gamma/m) \end{cases}, \quad (3.76)$$

em que  $I(x)$  fornece o menor inteiro que é maior ou igual a  $x$ . Na Equação (3.76), o parâmetro  $r$  representa a correlação spin-spin da diagonal da matriz das réplicas,  $r = \langle S_\alpha^z S_\alpha^z \rangle$ . A interpretação física de  $m$  vem do fato deste agrupar os dois parâmetros de ordem vidro de spin,  $q_0$  e  $q_1$ , na razão  $m : 1 - m$ , isto é, os parâmetros de ordem  $q_0$  e  $q_1$  compõem uma distribuição de probabilidade que representa os valores dos “overlaps” entre réplicas distintas. Essa distribuição pode ser relacionada aos “overlaps” entre estados diferentes quando existem muitos estados que compõem o espaço de fases como no caso

dos vidros de spin (Fischer e Hertz (1991)).

A parametrização (3.76) é usada para efetuar as somas sobre os índices de réplica das Equações (3.61) e (3.63). Por exemplo, o último termo da Equação (3.61) fica

$$\sum_{\alpha\gamma} q_{\alpha\gamma} S_{\alpha}^z S_{\gamma}^z = r \sum_{\alpha} S_{\alpha}^z S_{\alpha}^z + (q_1 - q_0) \sum_{\{b. d.\}} S_{\alpha}^z S_{\gamma}^z + q_0 \sum_{\alpha \neq \gamma} S_{\alpha}^z S_{\gamma}^z \quad (3.77)$$

onde a notação  $\sum_{\{b. d.\}}$  representa uma soma sobre os índices  $\alpha$  e  $\gamma$  ( $\alpha \neq \gamma$ ) pertencentes aos blocos diagonais da matriz da réplicas. De forma explícita,

$$\sum_{\{b. d.\}} S_{\alpha}^z S_{\gamma}^z = \sum_{l=1}^{n/m} \sum_{\alpha, \gamma=(l-1)m+1}^{lm} S_{\alpha}^z S_{\gamma}^z \quad (3.78)$$

com  $\alpha \neq \gamma$ . A Equação (3.78) pode ser reescrita como

$$\begin{aligned} \sum_{\{b. d.\}} S_{\alpha}^z S_{\gamma}^z &= \sum_{l=1}^{n/m} \left[ \left( \sum_{\alpha=(l-1)m+1}^{lm} S_{\alpha}^z \right)^2 - \sum_{\alpha=(l-1)m+1}^{lm} (S_{\alpha}^z)^2 \right] \\ &= \sum_{l=1}^{n/m} \left( \sum_{\alpha=(l-1)m+1}^{lm} S_{\alpha}^z \right)^2 - \sum_{\alpha=1}^n (S_{\alpha}^z)^2. \end{aligned} \quad (3.79)$$

Analogamente, o somatório do último termo da Equação (3.77) é reescrito por

$$\sum_{\alpha \neq \gamma} S_{\alpha}^z S_{\gamma}^z = \left( \sum_{\alpha=1}^n S_{\alpha}^z \right)^2 - \sum_{\alpha=1}^n (S_{\alpha}^z)^2. \quad (3.80)$$

Substituindo as Equações (3.79) e (3.80) em (3.77), obtém-se a seguinte relação:

$$\sum_{\alpha\gamma} q_{\alpha\gamma} S_{\alpha}^z S_{\gamma}^z = \left\{ (q_1 - q_0) \sum_{l=1}^{n/m} \left( \sum_{\alpha=(l-1)m+1}^{lm} S_{\alpha}^z \right)^2 + (r - q_1) \sum_{\alpha=1}^n (S_{\alpha}^z)^2 + q_0 \left( \sum_{\alpha=1}^n S_{\alpha}^z \right)^2 \right\}. \quad (3.81)$$

Levando o resultado (3.81) na Equação (3.61) e linearizando a expressão resultante dessa operação, surgem três campos auxiliares na equação para  $\Lambda_{\{\mu\}}^{QSR}$  com 1P-QSR (ver expressão (3.60)), ou seja,

$$\begin{aligned} \Lambda_{\{\mu\}}^{QSR} &= \int Dz \int \prod_{l=1}^{n/m} Dv_l \int \prod_{\alpha=(l-1)m}^{lm} D\xi_{\alpha} \int_0^{2\pi} \frac{dx_{\alpha}}{2\pi} e^{-y_{\alpha}} \int D[\phi_{\alpha}^*, \phi_{\alpha}] \\ &\times \exp \left\{ \sum_{\omega} \sum_{l=1}^{n/m} \sum_{\alpha=(l-1)m+1}^{lm} \Phi_{\alpha}^{\dagger}(\omega) [(i\omega + \mu_{\alpha}) \underline{I} + \beta h_{QSR}^{\alpha} \underline{\sigma}^z + \beta \Gamma \underline{\sigma}^x] \underline{\Phi}_{\alpha}(\omega) \right\}, \end{aligned} \quad (3.82)$$

onde  $h_{QSR}^{\alpha} = V[\sqrt{2q_0}z + \sqrt{2(q_1 - q_0)}v_l + \sqrt{2(r - q_1)}\xi_{\alpha}]$ .

Usando explicitamente a parametrização (3.76) na Equação (3.63), tem-se:

$$\beta F_{\{\mu\}}^{QSR} = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{n} \left\{ \frac{n\beta^2 V^2}{2} [r^2 + (m-n)(q_1^2 - q_0^2) + (n-1)q_0^2] - \ln \Lambda_{\{\mu\}}^{QSR} \right\}. \quad (3.83)$$

Agora, a integral funcional sobre os campos de Grassmann é calculada e a soma nas frequências de Matsubara efetuada. A condição de restrição quanto ao número de estados admitidos em cada modelo é adotada explicitamente. Finalmente, o limite das réplicas é tomado resultando na seguinte expressão para a energia livre com 1P-QSR <sup>4</sup>:

$$\beta F_s = \frac{\beta^2 V^2}{2} [m(q_1^2 - q_0^2) + r^2 - q_1^2] - \frac{1}{m} \int_{-\infty}^{\infty} Dz \ln \int_{-\infty}^{\infty} Dv (2K_s)^m \quad (3.84)$$

com

$$K_s = \frac{s-2}{2} + \int_{-\infty}^{\infty} D\xi \cosh(\beta\sqrt{\Delta}) \quad (3.85)$$

onde  $s$  ( $= 2$  ou  $4$ ) representa o números de estado admitidos em cada modelo,  $Dx = dx e^{-x^2/2}/\sqrt{2\pi}$  ( $x = z, v$  ou  $\xi$ ),  $\Delta = h^2 + \Gamma^2$ ,  $h = V(\sqrt{2}q_0 z + \sqrt{2}(q_1 - q_0)v + \sqrt{2}(r - q_1)\xi)$  e os parâmetros  $q_0$ ,  $q_1$ ,  $r$  e  $m$  são dados pela condição de extremo da energia livre (3.84):

$$q_0 = \int_{-\infty}^{\infty} Dz \left[ \frac{\int_{-\infty}^{\infty} Dv \left( K_s^{m-1} \int D\xi \frac{h \sinh(\beta\sqrt{\Delta})}{\sqrt{\Delta}} \right)}{\int_{-\infty}^{\infty} Dv K_s^m} \right]^2, \quad (3.86)$$

$$q_1 = \int_{-\infty}^{\infty} Dz \frac{\int_{-\infty}^{\infty} Dv \left[ K_s^{m-2} \left( \int D\xi \frac{h \sinh(\beta\sqrt{\Delta})}{\sqrt{\Delta}} \right)^2 \right]}{\int_{-\infty}^{\infty} Dv K_s^m}, \quad (3.87)$$

$$r = \int_{-\infty}^{\infty} Dz \frac{\int_{-\infty}^{\infty} Dv \left[ K_s^{m-1} \int D\xi \left( \frac{h^2 \cosh(\beta\sqrt{\Delta})}{\Delta} + \frac{\Gamma^2 \sinh(\beta\sqrt{\Delta})}{\beta\Delta^{3/2}} \right) \right]}{\int_{-\infty}^{\infty} Dv K_s^m} \quad (3.88)$$

e

$$m = \frac{m^2 \frac{\beta^2 V^2}{2} (q_1^2 - q_0^2) + \int_{-\infty}^{\infty} Dz \ln \int_{-\infty}^{\infty} Dv K_s^m}{\int_{-\infty}^{\infty} Dz \frac{\int_{-\infty}^{\infty} Dv [K_s^m \ln K_s]}{\int_{-\infty}^{\infty} Dv K_s^m}}. \quad (3.89)$$

Primeiramente, é possível observar que os resultados das Equações (3.71)-(3.74) com SR são recuperados quando se exige a condição  $q_0 = q_1$  nas soluções com 1P-QSR. Nesse

<sup>4</sup>O sub-índice QSR foi suprimido.



caso, as integrais em  $v$  (Equações (3.84)-(3.88)) são resolvidas analiticamente ( $\int Dv = 1$ ) recuperando a solução com SR.

Um ponto importante da Equação (3.84) diz respeito ao parâmetro  $m$ . No presente trabalho,  $m$  é tomado como um parâmetro variacional da energia livre (Parisi (1980)). Nesse caso, é feita uma distinção em relação ao trabalho prévio de Santos e Theumann (2005), que usa o mesmo formalismo fermiônico para estudar o modelo de VS de Ising com campo transversal, entretanto com uma teoria de 1P-QSR que assume  $m$  como um parâmetro independente da temperatura, tal que  $0 < m < 1$ .

### 3.3 Resultados com quebra da simetria de réplicas: uma única rede

Nesta seção, são apresentados os resultados obtidos com um passo de quebra de simetria de réplicas (1P-QSR) para a formulação fermiônica do modelo de vidro de spin Ising em presença de campo transversal (ver seção 3.2.3). Para tal, o conjunto de equações ponto de sela, dado pelas Equações (3.86), (3.87), (3.88) e (3.89) para os parâmetros  $q_0$ ,  $q_1$ ,  $r$  e  $m$ , respectivamente, é resolvido numericamente. Cabe salientar que o parâmetro  $m$  é calculado auto-consistentemente com os demais parâmetros  $q_0$ ,  $q_1$  e  $r$  (Parisi (1980)).

Primeiro, foi possível observar que, quando  $\Gamma = 0$ , o modelo 2S recupera os resultados do modelo SK clássico para solução com 1P-QSR (ver Parisi (1980)). Nesse caso, a Equação (3.88) é resolvida analiticamente fornecendo  $r = 1$ . Por outro lado, quando  $\Gamma > 0$  a função correlação spin-spin da diagonal das réplicas  $r$  torna-se dependente da temperatura e deve ser calculada juntamente com os demais parâmetros  $(q_0, q_1, m)$ . Os resultados dos parâmetros de ordem do modelo 2S são exibidos na Figura (6) para vários valores de campo transversal  $\Gamma$ . Os parâmetros  $q_0$ ,  $q_1$ ,  $m$  e  $\delta \equiv q_1 - q_0$  são zero para  $T > T_f$  em que a solução com simetria de réplicas (SR) é estável (válida). O parâmetro  $\delta$  indica quebra da simetria de réplicas (QSR) e  $T_f$  a temperatura crítica na qual  $\delta$  deixa de ser nulo (QSR). O campo transversal reduz  $T_f$  bem como os valores dos parâmetros de ordem. As quantidades termodinâmicas são menos sensíveis a variações de  $m$  para  $T$  próximo de  $T_f$  do que para temperaturas baixas. Por exemplo, os resultados obtidos com o esquema original de Parisi mostram que  $\delta$  aumenta quando  $T$  diminui em relação a  $T_f$  (ver Figura (6)), concordando com resultados da referência Santos e Theumann (2005) que considera  $m$  constante. Isso ocorre porque, logo abaixo da temperatura de transição os demais parâmetros de ordem dependem fracamente da solução de  $m$ . Por outro lado, em temperaturas baixas, o esquema de Parisi mostra que o valor de  $m$  torna-se muito

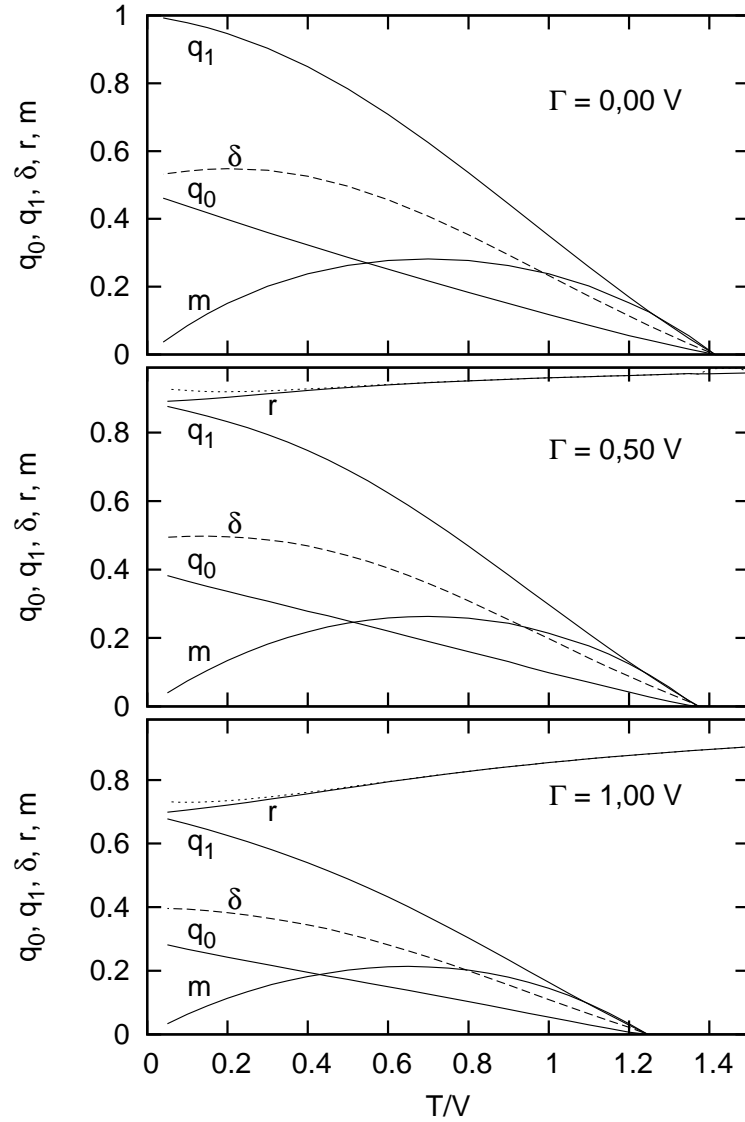


Figura 6: Parâmetros  $q_0$ ,  $q_1$ ,  $\delta = q_1 - q_0$ ,  $r$  e  $m$  em função de  $T/V$  para o modelo 2S. Os painéis superior, intermediário e inferior são para valores de  $\Gamma/V = 0, 0,5$  e  $1$ , respectivamente. As linhas pontilhadas mostram resultados de  $r_{SR}$  com solução de SR.

importante. Nesse caso, o parâmetro  $\delta$  é maior do que zero e a diferença entre  $r$  e  $r_{SR}$  (para  $\Gamma > 0$ ) aumenta quando  $T$  decresce, o que contrasta com resultados da referência Santos e Theumann (2005), na qual  $\delta$  tende a zero quando  $T \rightarrow 0$ . Portanto, usando o esquema de Parisi e a aproximação estática, os resultados deste trabalho (ver também Zimmer e Magalhães (2006a)) sugerem que os efeitos da QSR estão presentes mesmo em  $T \rightarrow 0$ , como podem ser verificados através de uma extrapolação das curvas da Figura (6) para  $T \rightarrow 0$ .

A Figura (7) exhibe os parâmetros de ordem do modelo 4S. Os comportamentos de  $q_0$ ,  $q_1$ ,  $\delta$  e  $m$  são qualitativamente os mesmos observados no modelo 2S. As principais diferenças estão em  $T_f$ , que é menor no modelo 4S, e no parâmetro  $r$ . No modelo 4S,

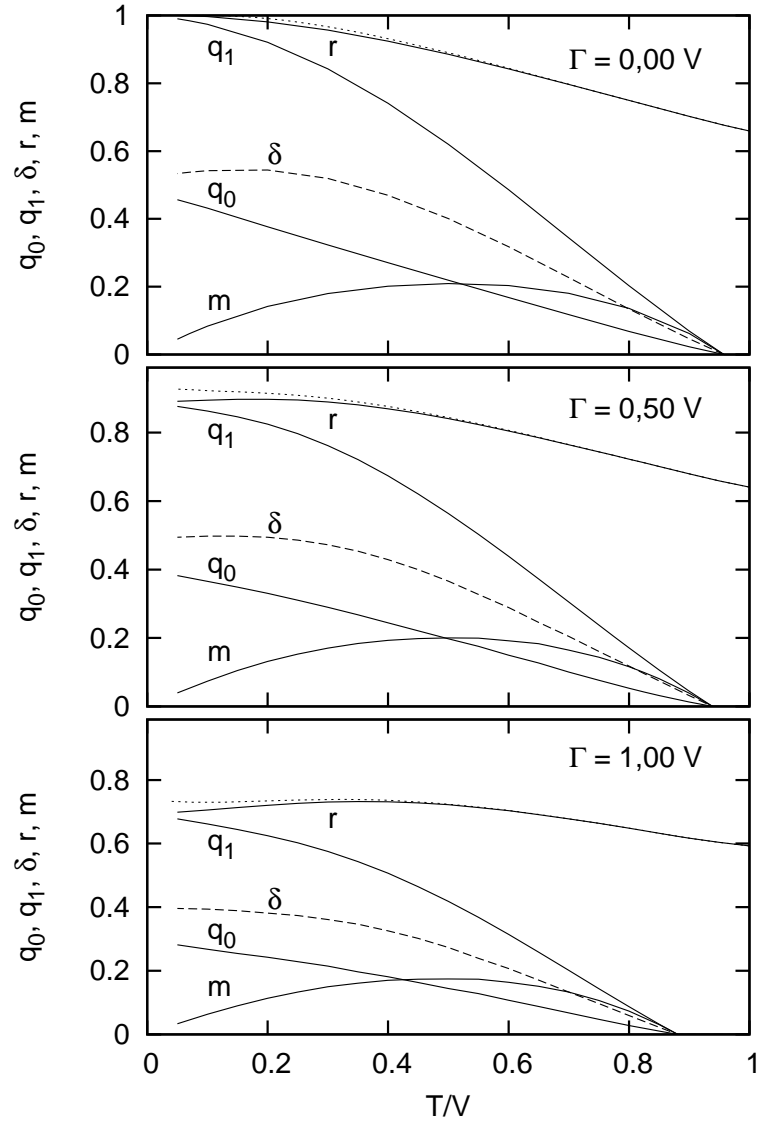


Figura 7: Parâmetros  $q_0$ ,  $q_1$ ,  $\delta = q_1 - q_0$ ,  $r$  e  $m$  em função de  $T/V$  para o modelo 4S. Aqui, é adotada a mesma convenção da Figura (6) para os valores de  $\Gamma/V$  e tipos de linhas.

devido à presença dos estados não magnéticos,  $r$  depende da temperatura inclusive para  $\Gamma = 0$ . Entretanto, a energia do estado fundamental do modelo 4S em  $\Gamma = 0$  é a mesma que no modelo 2S clássico (Castillo e Sherrington (2005)). Os resultados dos modelos 2S e 4S convergem para os mesmos valores quando  $T \rightarrow 0$ , ainda que  $\Gamma > 0$ . Portanto, poderia ser esperado que, no estado fundamental do modelo 4S, cada sítio possui somente um único férmion. Assim, os sítios vazios e duplamente ocupados não contribuem para as quantidades termodinâmicas em  $T \rightarrow 0$ .

As energias livres dos modelos 2S e 4S são mostradas na Figura (8) quando  $\Gamma/V = 0, 5$  e  $\Gamma/V = 1$ . As soluções com SR e com 1P-QSR podem ser comparadas na Figura (8). A diferença entre essas duas aproximações aumenta quando  $T$  diminui de  $T_f$ . A solução com

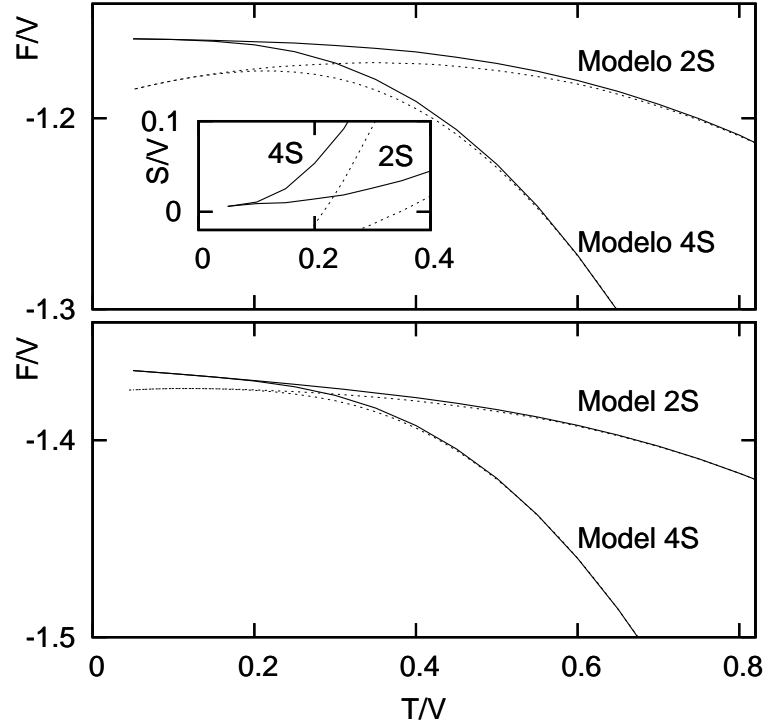


Figura 8: Energia livre como função de  $T/V$  para os modelo 2S e 4S. Os painéis superior e inferior são para valores de  $\Gamma/V = 0,5$  e  $1$ , respectivamente. As linhas cheias são resultados com 1P-QSR, enquanto as linhas pontilhadas representam resultados com SR. O detalhe mostra a entropia em temperaturas baixas.

1P-QSR fornece valores maiores de energia livre e sua entropia ( $S = -\partial F/\partial T$ ) é positiva em toda extensão de temperatura analisada na Figura (8) (ver detalhe da Figura (8)). O aumento de  $\Gamma$  reduz a diferença entre as energias livres com SR e com 1P-QSR. Logo, poderia ser conjecturado que, quando a intensidade de  $\Gamma$  aumenta, as flutuações quânticas assumem um papel relevante induzindo um tunelamento quântico entre os muitos vales meta-estáveis que compõem a configuração do espaço de fases do vidro de spin. Assim, a importância da quebra de simetria de replicas poderia diminuir com  $\Gamma$ . Contudo, a solução de SR ainda não é restaurada pela ação do campo  $\Gamma$ . Embora esses resultados sejam limitados pela aproximação estática, que pode produzir quantidades quantitativamente imprecisas a temperaturas muito baixas, eles estão em boa concordância qualitativa com resultados obtidos por outras técnicas que não utilizam a aproximação estática. Por exemplo, quando  $T$  é menor que  $T_f$ , os resultados estão de acordo com aqueles obtidos pelo formalismo de Trotter-Suzuki em que, através de um tratamento numérico para as correlações spin-spin, a aproximação estática não é usada (Büttner e Usadel (1990a) e Goldschmidt e Lai (1990)). Igualmente, quando  $\Gamma$  aumenta em direção ao valor em que ocorre o PCQ, eles concordam qualitativamente com os resultados da teoria de Landau-Ginzburg para o vidro de spin estudado com rotores quânticos (Read, Sachdev e Ye

(1995)).

Em suma, o modelo de vidro de spin de Ising em presença de um campo transversal foi estudado numa formulação fermiônica que usa as integrais de caminho com variáveis de Grassmann, a aproximação estática e o método das réplicas. Em específico, na presente seção, analisaram-se resultados com 1P-QSR pelo esquema proposto por Parisi (1980). Recentemente, esse mesmo problema foi analisado com uma teoria de QSR na qual o parâmetro  $m$ , que está relacionado com o tamanho dos blocos da diagonal da matriz das réplicas no esquema de Parisi, foi tomado como um parâmetro independente da temperatura, tal que  $0 < m < 1$  (ver Santos e Theumann (2005)). O método adotado na referência Santos e Theumann (2005) leva à conclusão de que a SR é restaurada em  $T = 0$  quando  $\Gamma > 0$ . Comparando-se o procedimento de QSR proposto na referência Santos e Theumann (2005) com o esquema original de Parisi, verifica-se que o procedimento alternativo de QSR pode produzir resultados aceitáveis somente na vizinhança da temperatura crítica. Portanto, qualquer extrapolação a temperaturas baixas está limitada pelo próprio método, além da aproximação estática. Ainda, quando as flutuações quânticas tornam-se importantes, os resultados apresentados aqui mostram evidências que o esquema original de Parisi para QSR pode ser usado para melhorar a descrição física da fase vidro de spin quântico tratada pelo método das réplicas.

## 4 VIDRO DE SPIN QUÂNTICO EM DUAS SUB-REDES

Este capítulo tem como objetivo estudar o vidro de spin (VS) de Ising em duas sub-redes na presença de campo magnético transverso  $\Gamma$  ao acoplamento Ising. Para tal, a seção 4.1 utiliza uma versão fermiônica para o modelo introduzido por Korenblit e Shender (1985)<sup>1</sup> (modelo KS), na qual o campo  $\Gamma$  é aplicado. Nesse modelo, somente spins de diferentes sub-redes podem interagir por meio de um acoplamento aleatório que segue uma distribuição de probabilidades Gaussiana. isto é, uma interação do tipo considerada por Sherrington e Kirkpatrick (1975) (SK). Na seção 4.2, o modelo descrito acima é generalizado para admitir também interações do tipo SK entre spin de sub-redes idênticas (modelo KSG).

### 4.1 Modelo KS quântico: formulação fermiônica

Nesta seção, é levado em consideração um modelo fermiônico de Ising em que os spins estão localizados nos sítios de duas sub-redes idênticas  $a$  e  $b$ . Um campo magnético paralelo ( $H$ ) e outro transverso ( $\Gamma$ ) aos spins Ising são aplicados. Nesse modelo, somente spins localizados em sub-redes distintas podem interagir, como no modelo de KS (Korenblit e Shender (1985)). As interações são descritas pelo Hamiltoniano:

$$\hat{H} = - \sum_{i_a j_b} J_{i_a j_b} \hat{S}_{i_a}^z \hat{S}_{j_b}^z - 2 \sum_{i_a} \left( \Gamma \hat{S}_{i_a}^x + H \hat{S}_{i_a}^z \right) - 2 \sum_{j_b} \left( \Gamma \hat{S}_{j_b}^x + H \hat{S}_{j_b}^z \right) \quad (4.1)$$

onde as somas são sobre os  $N$  sítios de cada sub-rede  $p$  ( $= a$  ou  $b$ ). O acoplamento  $J_{i_a j_b}$  é uma variável aleatória que segue uma distribuição de probabilidade Gaussiana:

$$P_J(J_{i_a j_b}) = \sqrt{\frac{N}{64\pi J^2}} \exp \left[ -\frac{(J_{i_a j_b} + 4J_0/N)^2}{64J^2} N \right]. \quad (4.2)$$

Na distribuição (4.2), a média é  $-4J_0/N$ , que pode permitir uma interação desordenada ( $J^2 > 0$ ) com acoplamento médio antiferromagnético ( $J_0 > 0$ ) entre as sub-redes. Assim,

---

<sup>1</sup>Korenblit e Shender (1985) introduziram o modelo para discutir a competição vidro de spin e anti-ferromagnetismo com variáveis clássicas de spins de Ising.

o primeiro termo no modelo descrito pela Equação (4.1) é responsável pelas interações que podem levar tanto ao comportamento VS quanto à ordem antiferromagnética (AF). Os demais termos representam os campos magnéticos transversos  $\Gamma$  e paralelo  $H$  que são aplicados uniformemente nas duas sub-redes.

Os operadores de spin na Equação (4.1) são definidos como (Theumann et al. (2002)):

$$\hat{S}_{i_p}^z = \frac{1}{2}[\hat{n}_{i_p\uparrow} - \hat{n}_{i_p\downarrow}], \quad \hat{S}_{i_p}^x = \frac{1}{2}[c_{i_p\uparrow}^\dagger c_{i_p\downarrow} + c_{i_p\downarrow}^\dagger c_{i_p\uparrow}] \quad (4.3)$$

sendo  $\hat{n}_{i_p\sigma} = c_{i_p\sigma}^\dagger c_{i_p\sigma}$  o operador número e  $c_{i_p\sigma}^\dagger$  ( $c_{i_p\sigma}$ ) o operador de criação (aniquilação) de férmions com projeção de spin  $\sigma = \uparrow$  ou  $\downarrow$ . O sub-índice  $p$  ( $= a$  ou  $b$ ) representa a sub-rede que pertence o sítio  $i_p$ .

Os operadores de spin (4.3) têm sido definidos por combinações bilineares de férmions, que atuam no espaço de Fock com quatro estados por sítio ( $|0\ 0\rangle$ ,  $|\uparrow\ 0\rangle$ ,  $|0\ \downarrow\rangle$ ,  $|\uparrow\ \downarrow\rangle$ ) (ver seção 3.2.1 para mais detalhes). Portanto,  $\hat{S}_{i_p}^z$  tem quatro autovalores por sítio:  $\pm 1/2$  (quando existe somente um férmion por sítio  $i_p$  ( $\sigma = \uparrow$  ou  $\downarrow$ )) e dois não magnéticos quando o sítio  $i_p$  está desocupado ou duplamente ocupado ( $\sigma = \uparrow$  e  $\downarrow$ ). Neste capítulo, são consideradas duas formulações do problema: uma não restringe o número de estados de  $\hat{S}_{i_p}^z$ , mas considera uma ocupação média de um férmion por sítio (modelo 4S); outra restringe o número de ocupação para  $\hat{n}_{i_p\uparrow} + \hat{n}_{i_p\downarrow} = 1$  (modelo 2S). Esta última representação evita a presença dos estados desocupados e duplamente ocupados (Wietheger e Sherrington (1986)).

O formalismo Lagrangeano das integrais de caminho fermiônicas é usado na função de partição, na qual os operadores de spin são representados pelos campos anticomutantes de Grassmann ( $\phi$ ,  $\phi^*$ ). No modelo 2S, a função de partição deve considerar estados que contêm somente um férmion por sítio. Essa restrição é alcançada com o uso da função  $\delta$  de Kronecker (ver seção 3.2.1:  $\delta(\hat{n}_{i_p\uparrow} + \hat{n}_{i_p\downarrow} - 1) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} dx_{i_p} e^{ix_{i_p}(\hat{n}_{i_p\uparrow} + \hat{n}_{i_p\downarrow} - 1)}$ ). Portanto, a função de partição dos dois modelos pode ser expressa em uma forma compacta, dada por (Theumann et al. (2002)):

$$Z\{\mu\} = \prod_{p=a,b} \prod_{i_p} \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} dx_{i_p} e^{-\mu_{i_p}} \int D(\phi^* \phi) \exp(A\{\mu\}) \quad (4.4)$$

onde  $\mu_{i_p} = 0$  corresponde à situação de semipreenchimento no modelo 4S, ou  $\mu_{i_p} = ix_{i_p}$  para o modelo 2S. Tomando a transformada de Fourier no tempo  $\tau$ , a ação  $A\{\mu\}$  da Equação (4.4) pode ser escrita como:

$$A\{\mu\} = A_{H\Gamma}^a + A_{H\Gamma}^b + A_{SG} \quad (4.5)$$

com

$$A_{HG}^p = \sum_{i_p} \sum_{\omega} \phi_{i_p}^\dagger(\omega) [(i\omega + \mu_{i_p})\underline{I} + \beta H \underline{\sigma}^z + \beta \Gamma \underline{\sigma}^x] \phi_{i_p}(\omega), \quad (4.6)$$

$$A_{SG} = \sum_{\Omega} \sum_{i_a j_b} \beta J_{i_a j_b} S_{i_a}^z(\Omega) S_{j_b}^z(-\Omega), \quad (4.7)$$

$$S_{i_p}^z(\Omega) = \frac{1}{2} \sum_{\omega} \phi_{i_p}^\dagger(\omega + \Omega) \underline{\sigma}^z \phi_{i_p}(\omega), \quad (4.8)$$

$\beta = (1/T)$  ( $T$  é a temperatura) e as matrizes usadas nas expressões (4.6) e (4.8) estão definidas na Equação (3.48). Nas Equações acima,  $\omega = (2m+1)\pi$  e  $\Omega = 2m\pi$  representam frequências de Matsubara que são somadas sobre todos valores possíveis de  $m = 0, \pm 1, \dots$ . Entretanto, este trabalho analisa o problema na aproximação estática, a qual considera somente o termo  $\Omega = 0$  no somatório da expressão (4.7) (Theumann e Gusmão (1984) e Theumann et al. (2002)).

O método das réplicas é usado para obter a energia livre por sítio:  $\beta F = -1/(2N) \langle \ln Z \rangle_{J_{i_a j_b}} = -1/(2N) \lim_{n \rightarrow 0} (Z(n) - 1)/n$ , sendo que  $Z(n) \equiv \langle Z^n \rangle_{J_{i_a j_b}}$  corresponde à média configuracional da função de partição replicada (ver seção 3.2.1). Calculando a média sobre a distribuição de probabilidade  $P_J(J_{i_a j_b})$  (Equação (4.2)), tem-se

$$Z(n) = \prod_{p=a,b} \prod_{i_p} \prod_{\alpha=1}^n \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} dx_{i_p}^\alpha e^{-\mu_{i_p}^\alpha} \int D(\phi_\alpha^*, \phi_\alpha) \exp \left\{ \sum_{\alpha=1}^n (A_{HG}^{a,\alpha} + A_{HG}^{b,\alpha}) + \sum_{i_a j_b} \left[ \frac{16\beta^2 J^2}{N} \left( \sum_{\alpha=1}^n S_{i_a \alpha}^z S_{j_b \alpha}^z \right)^2 - \frac{4\beta J_0}{N} \sum_{\alpha=1}^n S_{i_a \alpha}^z S_{j_b \alpha}^z \right] \right\}, \quad (4.9)$$

com  $\alpha$  denotando o índice das réplicas e, na aproximação estática,  $S_{i_p \alpha}^z \equiv S_{i_p \alpha}^z(0)$ . Na Equação (4.9), as somas sobre sítios de diferentes sub-redes podem ser reescritas como quadrados de somas de sítios de mesmas sub-redes, isto é

$$\begin{aligned} \sum_{i_a j_b} \left( \sum_{\alpha=1}^n S_{i_a \alpha}^z S_{j_b \alpha}^z \right)^2 &= \sum_{\alpha \gamma} \sum_{i_a j_b} S_{i_a \alpha}^z S_{j_a \gamma}^z S_{i_b \alpha}^z S_{j_b \gamma}^z \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\alpha \gamma} \left[ \left( \sum_{i_a} S_{i_a \alpha}^z S_{j_a \gamma}^z + \sum_{j_b} S_{i_b \alpha}^z S_{j_b \gamma}^z \right)^2 - \left( \sum_{i_a} S_{i_a \alpha}^z S_{j_a \alpha}^z \right)^2 - \left( \sum_{j_b} S_{i_b \alpha}^z S_{j_b \alpha}^z \right)^2 \right] \end{aligned} \quad (4.10)$$

e

$$\sum_{i_a j_b} S_{i_a \alpha}^z S_{j_b \alpha}^z = \frac{1}{2} \left[ \left( \sum_{i_a} S_{i_a \alpha}^z + \sum_{j_b} S_{i_b \alpha}^z \right)^2 - \left( \sum_{i_a} S_{i_a \alpha}^z \right)^2 - \left( \sum_{j_b} S_{i_b \alpha}^z \right)^2 \right]. \quad (4.11)$$

Levando as Equações (4.10) e (4.11) na expressão (4.9), surgem seis termos quadráticos que



são linearizados com transformações de Hubbard-Stratonovich (Equação (3.56)). Essas transformações inserem os campos auxiliares  $\bar{M}_3^\alpha$ ,  $\bar{M}_p^\alpha$ ,  $Q_3^{\alpha\gamma}$ , e  $Q_p^{\alpha\gamma}$  ( $p = a, b$ ) na função de partição replicada, logo

$$Z(n) = \int dU \exp \left\{ -N \left[ \frac{\beta J_0}{2} \sum_{\alpha} \left( (\bar{M}_3^\alpha)^2 + \sum_{p=a,b} (\bar{M}_p^\alpha)^2 \right) + \frac{\beta^2 J^2}{2} \sum_{\alpha\gamma} \left( (Q_3^{\alpha\gamma})^2 + \sum_{p=a,b} (Q_p^{\alpha\gamma})^2 \right) - \frac{1}{N} \ln \Theta\{\mu\} \right] \right\} \quad (4.12)$$

onde  $\int dU = \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{r=a,b,3} \prod_{\alpha} d\bar{M}_r^\alpha \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{r=a,b,3} \prod_{\alpha\gamma} dQ_r^{\alpha\gamma}$  e a parte funcional expressa como

$$\Theta\{\mu\} = \prod_{p=a,b} \prod_{i_p, \alpha} \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} dx_{i_p}^\alpha e^{-\mu_{i_p}^\alpha} \int D(\phi_\alpha^*, \phi_\alpha) \exp \left\{ \sum_{p=a,b} \left[ \sum_{\alpha} A_{H\Gamma}^{p,\alpha} + 2\beta J_0 \sum_{\alpha, i_p} (i\bar{M}_3^\alpha + \bar{M}_p^\alpha) S_{i_p}^\alpha + 4\beta^2 J^2 \sum_{\alpha\gamma, i_p} (Q_3^{\alpha\gamma} + iQ_p^{\alpha\gamma}) S_{i_p}^\alpha S_{i_p}^\gamma \right] \right\}. \quad (4.13)$$

No limite termodinâmico, o conjunto de integrais em  $\int dU$  pode ser calculado pelo método “steepest descent”, em que os campos auxiliares são dados pelas soluções ponto de sela:

$$\bar{M}_3^\alpha = \frac{i2}{N} \langle \sum_{p=a,b} \sum_{i_p} S_{i_p}^\alpha \rangle = 2iM_3^\alpha; \quad Q_3^{\alpha\gamma} = \frac{4}{N} \langle \sum_{p=a,b} \sum_{i_p} S_{i_p}^\alpha S_{i_p}^\gamma \rangle = 2q_3^{\alpha\gamma}; \quad (4.14)$$

$$\bar{M}_p^\alpha = \frac{2}{N} \langle \sum_{i_p} S_{i_p}^\alpha \rangle = M_p^\alpha; \quad Q_p^{\alpha\gamma} = \frac{i4}{N} \langle \sum_{i_p} S_{i_p}^\alpha S_{i_p}^\gamma \rangle = iq_p^{\alpha\gamma}; \quad p = a, b \quad (4.15)$$

em que  $\langle \dots \rangle$  denota uma média efetuada em relação à Equação (4.13). Na solução estacionária, essas equações ponto de sela podem ser usadas para reescrever a expressão (4.12) como:

$$Z(n) = \int dU \exp \left\{ -N \left[ \beta^2 J^2 \sum_{\alpha\gamma} q_a^{\alpha\gamma} q_b^{\alpha\gamma} - \beta J_0 \sum_{\alpha} M_a^\alpha M_b^\alpha - \sum_p \ln \Theta_p\{\mu\} \right] \right\}, \quad (4.16)$$

onde

$$\Theta_p\{\mu\} = \prod_{\alpha} \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} dx_p^\alpha e^{-\mu_p^\alpha} \int D[\phi_p^*, \phi_p] \exp [H_p^{ef}], \quad (4.17)$$

com

$$H_p^{ef} = \sum_{\alpha} [\mathcal{A}_{H\Gamma}^{p,\alpha} - 2\beta J_0 M_{p'}^\alpha S_p^\alpha] + 4\beta^2 J^2 \sum_{\alpha\gamma} q_{p'}^{\alpha\gamma} S_p^\alpha S_p^\gamma \quad (4.18)$$

e  $p = a$  ( $p' = b$ ) ou  $p = b$  ( $p' = a$ ).  $\mathcal{A}_{H\Gamma}^{p,\alpha}$  é a notação para a Equação (4.6) sem a soma em  $i_p$  e com o índice das réplicas. Na Expressão (4.16), observa-se que o problema original foi

reduzido ao problema efetivo de um único sítio em cada rede com interações entre réplicas de ambas as sub-redes.

#### 4.1.1 Solução com simetria de réplicas: duas sub-redes

Nesta seção, como uma primeira tentativa de resolver o problema efetivo (4.16), assume-se a aproximação com simetria de réplicas (SR) para as duas sub-redes, tal que,  $M_p^\alpha = M_p$  para todo  $\alpha$  e

$$q_p^{\alpha\gamma} = \begin{cases} r_p & \text{para todo } \alpha = \gamma \\ q_p & \text{para todo } \alpha \neq \gamma. \end{cases} \quad (4.19)$$

Adotando a SR, as somas sobre  $\alpha$  e  $\gamma$  na Equação (4.16) são trivialmente efetuadas:  $\beta^2 J^2 \sum_{\alpha\gamma} q_a^{\alpha\gamma} q_b^{\alpha\gamma} - \beta J_0 \sum_{\alpha} M_a^\alpha M_b^\alpha = n \{ \beta^2 J^2 [r_a r_b + (n-1) q_a q_b] - \beta J_0 M_a M_b \}$ . Já o último somatório da Equação (4.18) pode ser representado em dois termos quadráticos dependentes de um único índice de réplica

$$\sum_{\alpha\gamma} q_p^{\alpha\gamma} S_p^\alpha S_p^\gamma = (r_{p'} - q_{p'}) \sum_{\alpha} (S_p^\alpha)^2 + q_{p'} (\sum_{\alpha} S_p^\alpha)^2. \quad (4.20)$$

Levando a Equação (4.20) em (4.17), as partes quadráticas são então linearizadas através de transformações de Hubbard-Stratonovich, que introduzem os campo auxiliares  $z$  e  $\xi_\alpha$ . Agora, efetuando explicitamente a soma em  $\alpha$ , tem-se

$$\Theta_p^{SR}\{\mu\} = \int_{-\infty}^{\infty} Dz_p \left[ \int_{-\infty}^{\infty} D\xi_p \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} dx_p e^{-\mu_p \Lambda_p^{ef}} \right]^n \quad (4.21)$$

sendo  $Dy_p = dy_p \exp(-y_p^2/2)/\sqrt{2\pi}$  ( $y_p = z_p, \xi_p$ ) e

$$\Lambda_p^{ef} = \int D[\phi_p^* \phi_p] \exp \left[ \sum_{\omega} \phi_p^\dagger(\omega) \underline{G}_p^{-1}(\omega) \phi_p(\omega) \right]. \quad (4.22)$$

A matrix  $\underline{G}_p^{-1}(\omega)$  é dada por:

$$\underline{G}_p^{-1}(\omega) = \begin{pmatrix} i\omega + \mu_p + \beta h_p^{SR} & \beta\Gamma \\ \beta\Gamma & i\omega + \mu_p - \beta h_p^{SR} \end{pmatrix} \quad (4.23)$$

onde

$$h_p^{SR} = H - J_0 M_{p'} + J \sqrt{2q_{p'}} z_p + J \sqrt{2(r_{p'} - q_{p'})} \xi_p \quad (4.24)$$

com  $p' \neq p$ . Portanto, o campo interno  $h_p^{SR}$  aplicado em uma particular sub-rede depende dos parâmetros de ordem da outra sub-rede, que está de acordo com a referência Korenblit e Shender (1985).

Na Equação (4.22), a integral funcional sobre as variáveis de Grassmann pode ser calculada (ver referência Negele e Orland (1988)), resultando em  $\ln \Lambda_p^{eff} = \sum_{\omega} \ln(\det \underline{G}_p^{-1}(\omega))$ . Nessa mesma equação, a soma nas frequências de Matsubara pode ser efetuada seguindo a referência Theumann et al. (2002). Como resultado dessas operações, obtém-se

$$\Lambda_p^{eff} = 2e^{\mu_p} [\cosh \mu_p + \cosh(\beta\sqrt{\Delta_p})] \quad (4.25)$$

onde  $\Delta_p = (h_p^{SR})^2 + \Gamma^2$ .

Agora a restrição quanto ao número de estados permitidos em cada modelo pode ser usada. No modelo 4S, a ocupação média de um férmion por sítio é obtida fazendo  $\mu_p = 0$  nas Expressões (4.21) e (4.25). Portanto, a integral em  $x_p$  (ver Equação (4.21)) é igual a um. Para o modelo 2S ( $\mu_p = ix_p$ ), que corresponde a uma formulação de spin, em que são considerados somente dois estados por sítio ( $|\uparrow, 0\rangle, |0, \downarrow\rangle$ ), a integral em  $x_p$  é igual a zero. Essa situação é equivalente ao método adotado por Popov e Fedotov (1988), em que um potencial químico imaginário e dependente da temperatura é usado. Assim, a principal diferença entre os dois modelos está na contribuição dos estados locais não magnéticos, os quais são exatamente cancelados no modelo 2S, enquanto que no modelo 4S é adotado o “half-filling” (semipreenchimento dos sítios). Esses resultados são usados na Equação (4.16) e a energia livre pode ser escrita como

$$\beta F_s = \frac{\beta^2 J^2}{2} (r_a r_b - q_a q_b) - \frac{\beta J_0}{2} M_a M_b - \frac{1}{2} \sum_{p=a,b} \int_{-\infty}^{\infty} D z_p \ln K_{s,p}^{SR} - \ln 2 \quad (4.26)$$

com

$$K_{s,p}^{SR} = \frac{s-2}{2} + \int_{-\infty}^{\infty} D \xi_p \cosh(\beta\sqrt{\Delta_p}), \quad (4.27)$$

onde  $s$  representa o número de estados admitidos em cada modelo. Os parâmetros de ordem  $q_p$ ,  $r_p$  e  $M_p$  são dados pela condição de extremo da energia livre (4.26):

$$M_p = \int_{-\infty}^{\infty} D z_p \frac{\int_{-\infty}^{\infty} D \xi_p h_p^{SR} \sinh(\beta\sqrt{\Delta_p}) / \sqrt{\Delta_p}}{K_{s,p}^{SR}}, \quad (4.28)$$

$$q_p = \int_{-\infty}^{\infty} D z_p \left( \frac{\int_{-\infty}^{\infty} D \xi_p h_p^{SR} \sinh(\beta\sqrt{\Delta_p}) / \sqrt{\Delta_p}}{K_{s,p}^{SR}} \right)^2 \quad (4.29)$$

e

$$r_p = \int_{-\infty}^{\infty} D z_p \frac{\int_{-\infty}^{\infty} D \xi_p [(h_p^{SR})^2 \cosh(\beta\sqrt{\Delta_p}) / \Delta_p + \Gamma^2 \sinh(\beta\sqrt{\Delta_p}) / (\beta\Delta_p^{3/2})]}{K_{s,p}^{SR}}. \quad (4.30)$$

Em particular, quando  $\Gamma = 0$ , o conjunto de integrais em  $\xi_p$  pode ser calculado analiticamente. Nesse caso, para o modelo 2S, é fácil verificar que o parâmetro  $r_p \equiv \frac{4}{N} \langle \sum_{i_p} S_{i_p}^{\alpha} S_{i_p}^{\alpha} \rangle =$

1 (ver Equação (4.15) para  $\alpha = \gamma$ ). Entretanto, no modelo 4S, devido à presença dos estados não magnéticos,  $r_p$  depende da temperatura e do campo interno  $h_p^{SR}$ :

$$r_p(\Gamma = 0) = \int_{-\infty}^{\infty} Dz_p \frac{\cosh[\beta(H - J_0 m_{p'} + J\sqrt{2q_{p'}}z_p)]}{\exp[-\beta^2 J^2(r_{p'} - q_{p'})] + \cosh[\beta(H - J_0 m_{p'} + J\sqrt{2q_{p'}}z_p)]}. \quad (4.31)$$

Contudo, próximo à temperatura  $T = 0$ ,  $r_p$  pode ser expresso usando uma expansão para temperaturas baixas:

$$r_p = 1 - \frac{(s-2)T}{2J} \sqrt{\frac{\pi}{4q_{p'}}} \exp\left[-\frac{(\varrho_p)^2}{2} - \frac{J e^{-(\varrho_p)^2/2}}{T\sqrt{q_{p'}\pi}}\right], \quad (4.32)$$

onde  $\varrho_p = J_0 m_{p'}/(J\sqrt{2q_{p'}})$  e  $H = 0$ . Esse resultado sugere que a ocupação dos estados não magnéticos é exponencialmente pequena no modelo 4S para  $T$  próximo a zero.

Como visto anteriormente, a simetria de réplicas pode apresentar problemas de estabilidade termodinâmica na fase vidro de spin (Theumann et al. (2002)), em que o autovalor de Almeida-Thouless  $\lambda_{AT}$  fica negativo (de Almeida e Thouless (1978)). No caso do problema de duas sub-redes, a análise da estabilidade da simetria de réplicas (Korenblit e Shender (1985)) é dada pela expressão (ver Equação (D.16) do Apêndice D para o caso particular  $V = 0$ ):

$$\lambda_{AT} = 1 - 4(\beta J)^4 \prod_{p=a,b} \int_{-\infty}^{\infty} Dz_p \left(\frac{I_p}{(K_{s,p}^{SR})^2}\right)^2 \quad (4.33)$$

com

$$I_p(z) = K_{s,p} \int_{-\infty}^{+\infty} D\xi_p \left[ \frac{h_p^2}{\Delta_p} \cosh(\beta\sqrt{\Delta_p}) + \frac{\Gamma^2}{\beta\Delta_p^{3/2}} \sinh(\beta\sqrt{\Delta_p}) \right] - \left( \int_{-\infty}^{+\infty} D\xi_p \frac{h_p}{\sqrt{\Delta_p}} \sinh(\beta\sqrt{\Delta_p}) \right)^2. \quad (4.34)$$

Os resultados numéricos para as Equações (4.28), (4.29), (4.30) e (4.33) são apresentados na seção 5.1.

#### 4.1.2 Solução com quebra da simetria de réplicas: duas sub-redes

Neste estágio, estuda-se o problema efetivo (4.16) com um passo de quebra de simetria de réplicas (1P-QSR). Para tal, são utilizados dois métodos distintos de quebra de simetria de réplicas: no primeiro, o esquema de Parisi (1980) (inicialmente proposto para o modelo SK em uma rede) é adotado nas duas sub-redes, porém com uma aproximação quanto ao tamanho dos blocos diagonais  $m_p$  das matrizes das réplicas com 1P-QSR; no segundo, usa-

se o esquema modulado de quebra de simetria de réplicas (ver Oppermann, Sherrington e Kiselev (2004)), que é baseado no esquema de Parisi mais uma estrutura que considera uma assimetria entre  $m_a$  e  $m_b$  ( $m_a \neq m_b$ ).

#### 4.1.2.1 Esquema de Parisi com 1P-QSR em duas sub-redes

A quebra da simetria de réplicas em um passo é realizada usando a parametrização proposta por Parisi (1980) nas matrizes das réplicas das duas sub-redes, tal que

$$q_p^{\alpha\gamma} = \begin{cases} r_p & \text{se } \alpha = \gamma \\ q_{p1} & \text{se } \alpha \neq \gamma \text{ e } I(\alpha/m_p) = I(\gamma/m_p), \\ q_{p0} & \text{se } \alpha \neq \gamma \text{ e } I(\alpha/m_p) \neq I(\gamma/m_p) \end{cases}, \quad (4.35)$$

sendo que  $I(x)$  fornece o menor inteiro que é maior ou igual a  $x$ . Observa-se que  $m_p$  nota o tamanho dos blocos diagonais da matriz das réplicas da sub-rede  $p$  com 1P-QSR.

Na Equação (4.16), tem-se uma soma com produtos de elementos das matrizes  $\underline{Q}_a$  e  $\underline{Q}_b$

$$\sum_{\alpha\gamma} q_a^{\alpha\gamma} q_b^{\alpha\gamma} = \sum_{\alpha} r_a^{\alpha} r_b^{\alpha} + \sum_{\alpha \neq \gamma} q_a^{\alpha\gamma} q_b^{\alpha\gamma}. \quad (4.36)$$

Usando a parametrização (4.35), o segundo termo da expressão (4.36) pode ser somado com facilidade desde que  $m_a = m_b$ , então

$$\sum_{\alpha\gamma} q_a^{\alpha\gamma} q_b^{\alpha\gamma} = nr_a r_b + n[(m-1)q_{a1}q_{b1} + (n-1)q_{a0}q_{b0}] \quad (4.37)$$

onde assumimos  $m \equiv m_a = m_b$ . A soma sobre as réplicas no segundo termo da Equação (4.18) pode ser reescrita como:

$$\sum_{\alpha\gamma} q_p^{\alpha\gamma} S_p^{\alpha} S_p^{\gamma} = (q_{p'1} - q_{p'0}) \sum_{l=1}^{n/m} \left( \sum_{\alpha=(l-1)m+1}^{lm} S_p^{\alpha} \right)^2 + (r_{p'} - q_{p'1}) \sum_{\alpha=1}^n (S_p^{\alpha})^2 + q_{p'0} \left( \sum_{\alpha=1}^n S_p^{\alpha} \right)^2. \quad (4.38)$$

Substituindo a Equação (4.38) na Expressões (4.18) e linearizando a resultante dessa operação, obtém-se:

$$\Theta_p^{QSR}\{\mu\} = \int_{-\infty}^{\infty} Dz_p \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} Dv_p \left[ \int_{-\infty}^{\infty} D\xi_p \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} dx_p e^{-\mu_p} \Lambda_p^{QSR} \right]^m \right\}^{n/m} \quad (4.39)$$

onde  $Dy_p = dy_p \exp(-y_p^2/2)/\sqrt{2\pi}$  ( $y_p = z_p, v_p, \xi_p$ ) e  $\Lambda_p^{QSR}$  é definido como na Equação

(4.22) com  $h_p$  no lugar de  $h_p^{SR}$  na definição (4.23):

$$h_p = H - J_0 M_{p'} + J \sqrt{2q_{p'0}} z_p + J \sqrt{2(q_{p'1} - q_{p'0})} v_p + J \sqrt{2(r_{p'} - q_{p'1})} \xi_p. \quad (4.40)$$

A integral funcional nas variáveis de Grassmann e a soma sobre as frequências de Matsubara são realizadas na Equação (4.39).

Levando as Equações (4.37) e (4.39) em (4.16), pode-se tomar o limite das réplicas  $n \rightarrow 0$  que resulta na seguinte expressão para energia livre com 1S-QSR:

$$\begin{aligned} \beta F_s = & -\frac{\beta J_0}{2} M_a M_b + \frac{\beta^2 J^2}{2} [m(q_{a1} q_{b1} - q_{a0} q_{b0}) + r_a r_b - q_{a1} q_{b1}] \\ & - \sum_{p=a,b} \frac{1}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} D z_p \ln \int_{-\infty}^{\infty} D v_p (K_{s,p})^m - \ln 2 \end{aligned} \quad (4.41)$$

onde

$$K_{s,p} = \frac{s-2}{2} + \int_{-\infty}^{\infty} D \xi_p \cosh(\beta \sqrt{h_p^2 + \Gamma^2}) \quad (4.42)$$

com os parâmetros de ordem dados pela condição de extremo da Equação (4.41):

$$M_p = \int_{-\infty}^{\infty} D z_p \frac{\int_{-\infty}^{\infty} D v_p \left( (K_{s,p})^{m-1} \int D \xi_p \frac{h_p \sinh(\beta \sqrt{h_p^2 + \Gamma^2})}{\sqrt{h_p^2 + \Gamma^2}} \right)}{\int_{-\infty}^{\infty} D v_p (K_{s,p})^m}, \quad (4.43)$$

$$q_{p0} = \int_{-\infty}^{\infty} D z_p \left[ \frac{\int_{-\infty}^{\infty} D v_p \left( (K_{s,p})^{m-1} \int D \xi_p \frac{h_p \sinh(\beta \sqrt{h_p^2 + \Gamma^2})}{\sqrt{h_p^2 + \Gamma^2}} \right)}{\int_{-\infty}^{\infty} D v_p (K_{s,p})^m} \right]^2, \quad (4.44)$$

$$q_{p1} = \int_{-\infty}^{\infty} D z_p \frac{\int_{-\infty}^{\infty} D v_p \left[ (K_{s,p})^{m-2} \left( \int D \xi_p \frac{h_p \sinh(\beta \sqrt{h_p^2 + \Gamma^2})}{\sqrt{h_p^2 + \Gamma^2}} \right)^2 \right]}{\int_{-\infty}^{\infty} D v_p (K_{s,p})^m}, \quad (4.45)$$

$$r_p = \int_{-\infty}^{\infty} D z_p \frac{\int_{-\infty}^{\infty} D v_p \left[ (K_{s,p})^{m-1} \int D \xi_p \left( \frac{h_p^2 \cosh(\beta \sqrt{h_p^2 + \Gamma^2})}{h_p^2 + \Gamma^2} + \frac{\Gamma^2 \sinh(\beta \sqrt{h_p^2 + \Gamma^2})}{\beta (h_p^2 + \Gamma^2)^{3/2}} \right) \right]}{\int_{-\infty}^{\infty} D v (K_{s,p})^m} \quad (4.46)$$

e

$$m = \frac{m^2 \beta^2 J^2 (q_{a1} q_{b1} - q_{a0} q_{b0}) + \sum_p \int_{-\infty}^{\infty} D z_p \ln \int_{-\infty}^{\infty} D v_p (K_{s,p})^m}{\sum_p \int_{-\infty}^{\infty} D z_p \frac{\int_{-\infty}^{\infty} D v_p [(K_{s,p})^m \ln K_{s,p}]}{\int_{-\infty}^{\infty} D v_p (K_{s,p})^m}}. \quad (4.47)$$

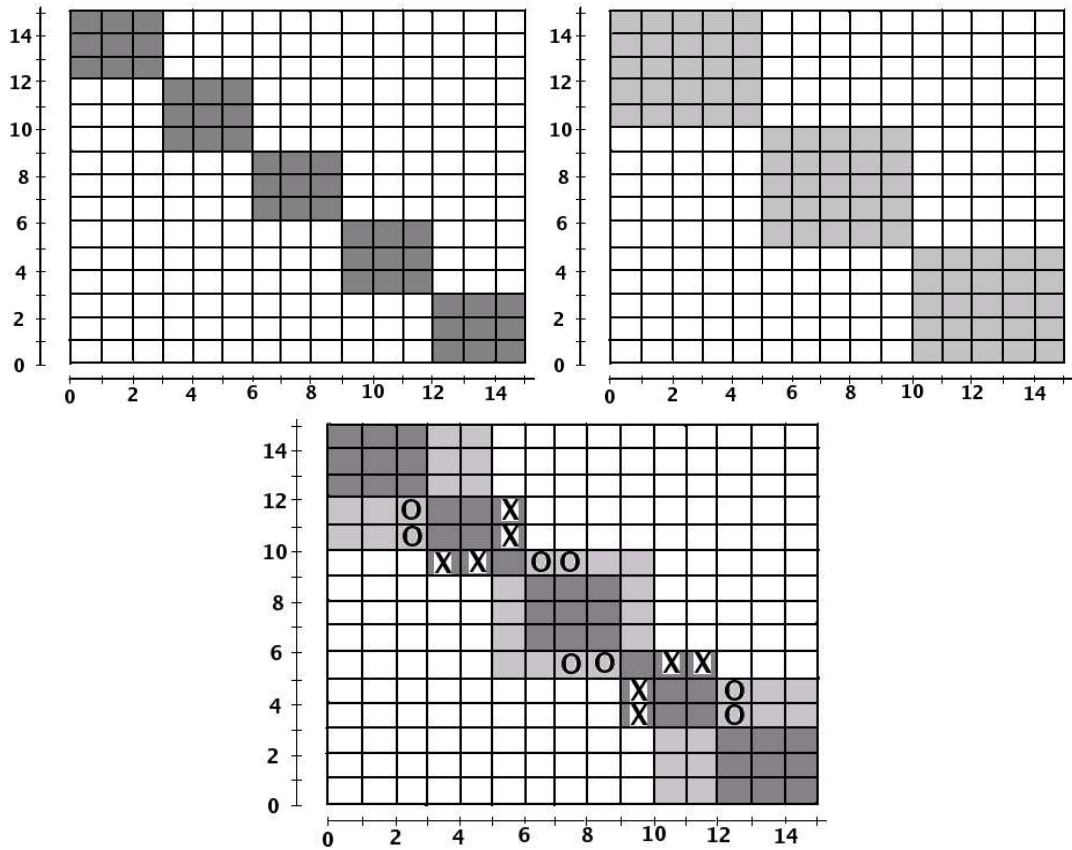


Figura 9: Os painéis superiores da esquerda e da direita são representações esquemáticas das matrizes  $\underline{Q}_a$  e  $\underline{Q}_b$  com 1P-QSR, respectivamente. Nessa representação hipotética,  $n = 15$ ,  $m_a = 3$  e  $m_b = 5$ . Os elementos dos blocos diagonais estão em tons de cinza. O painel inferior mostra a sobreposição das matrizes  $\underline{Q}_a$  e  $\underline{Q}_b$ .

Observa-se que, apesar da aproximação  $m = m_a = m_b$ , a energia livre (4.41) ainda mantém uma estrutura de duas sub-redes para os demais parâmetros de ordem em 1P-QSR.

Resultados numéricos obtidos, utilizando a Equação (4.41), são analisados na seção 5.1.2.

#### 4.1.2.2 Esquema modulado de quebra da simetria de réplicas

Neste segmento do trabalho, é apresentado um método de 1P-QSR que considera a parametrização de Parisi em ambas as sub-redes, entretanto, diferente da seção anterior, aqui  $m_a$  e  $m_b$  são parâmetros independentes ( $m_a \neq m_b$ ) (ver referência Oppermann, Sherrington e Kiselev (2004)). Nesse caso, no problema efetivo (4.16), o tratamento da interação entre spins de réplicas diferentes (ver último termo da Equação (4.18)) segue de modo análogo ao realizado no esquema de QSR de Parisi, pois esse termo não possui

um acoplamento entre elementos ( $q_p^{\alpha\gamma}$ ) de réplicas distintas. Logo, a expressão da parte funcional com 1P-QSR é análoga ao da Equação (4.39), porém deve-se distinguir entre  $m_a$  e  $m_b$ :

$$\Theta_p^{Mod}\{\mu\} = \int_{-\infty}^{\infty} Dz_p \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} Dv_p \left[ \int_{-\infty}^{\infty} D\xi_p \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} dx_p e^{-\mu_p \Lambda_p^{Mod}} \right]^{m_{p'}} \right\}^{n/m_{p'}} \quad (4.48)$$

com  $\Lambda_p^{Mod} = \Lambda_p^{QSR}$  usado na Equação (4.39).

Por outro lado, quando  $m_a \neq m_b$ , surgem dificuldades para encontrar uma expressão analítica para a soma sobre os índices de réplica do produto de elementos  $q_a^{\alpha\gamma} q_b^{\alpha\gamma}$  (ver Equação (4.16)), que representam uma sobreposição das matrizes  $\underline{Q}_a$  e  $\underline{Q}_b$ . Para efetuar essa soma com 1P-QSR e  $m_a \neq m_b$ , segue-se o trabalho de Oppermann, Sherrington e Kiselev (2004).

Primeiro, considera-se a sobreposição dos blocos diagonais das matrizes  $\underline{Q}_a$  e  $\underline{Q}_b$ , representadas na parametrização de Parisi com 1P-QSR (ver Equação (4.35)). Nesse caso, supõe-se que os blocos diagonais têm dimensões  $m_a \times m_a$  e  $m_b \times m_b$  para as matrizes  $\underline{Q}_a$  e  $\underline{Q}_b$ , respectivamente (ver painéis superiores da Figura (9)). Considera-se que há uma diferença na dimensão desses blocos, tal que  $m_a < m_b$ . Dessa forma, na sobreposição das matrizes  $\underline{Q}_a$  e  $\underline{Q}_b$ , devem existir blocos diagonais de  $\underline{Q}_a$  totalmente contidos (embebidos) nos blocos diagonais de  $\underline{Q}_b$  e regiões em que ocorrem interseções de elementos de blocos diagonais com elementos não pertencentes a blocos diagonais (ver painel inferior da Figura (9)). Um modo de quantificar essa diferença relacionada à sobreposição dos blocos diagonais é através do fator  $\vartheta$ , que conta o número de blocos diagonais da matriz  $\underline{Q}_a$ , que estão totalmente contidos nos blocos diagonais da matriz  $\underline{Q}_b$  e é normalizado pelo número de blocos diagonais  $m_b \times m_b$ . A atenção se volta para o caso particular em que a dimensão das matrizes  $\underline{Q}_a$  e  $\underline{Q}_b$  é  $n \times n$ , ou melhor,  $n$  é o menor múltiplo comum de  $m_a$  e  $m_b$ , que define o esquema de QSR com modulação simples. Para isso, assume-se, em princípio,  $n$ ,  $m_a$ ,  $m_b$ ,  $n/m_a$  e  $n/m_b$  inteiros com  $m_a < m_b$ . Assim, o fator  $\vartheta$  é dado por:

$$\vartheta = \frac{n/m_a - (n/m_b - 1)}{n/m_b} \quad (4.49)$$

onde  $n/m_a$  é o número total de blocos diagonais  $m_a \times m_a$  da matriz  $\underline{Q}_a$ ,  $n/m_b - 1$  representa o número de blocos  $m_a \times m_a$  que não estão contidos nos blocos diagonais da matriz  $\underline{Q}_b$ , e  $n/m_b$  o número total de blocos diagonais da matriz  $\underline{Q}_b$ . Por exemplo, na Figura (9),  $\vartheta = 1$ .

Uma análise preliminar da Equação (4.49) mostra que  $\vartheta$  não está bem definido no limite das réplicas ( $n \rightarrow 0$ ). Mesmo assim, ele vai ser utilizado com intuito de se obterem



expressões analíticas, em que o limite  $n \rightarrow 0$  é tomado explicitamente no último estágio dos cálculos.

Agora, dentro das condições impostas acima, a soma que contém o produto de elementos  $q_a^{\alpha\gamma}$  e  $q_b^{\alpha\gamma}$  pode ser expressa em termos de  $\vartheta$ , ou seja,

$$\sum_{\alpha\gamma} q_a^{\alpha\gamma} q_b^{\alpha\gamma} = n [r_a r_b + (m_a - 1)q_{a1}q_{b1} + (m_b - m_a)q_{a0}q_{b1} + (n - m_b)q_{a0}q_{b0}] + \Psi(\vartheta) [\text{elementos não considerados} - \text{elementos considerados para mais}]. \quad (4.50)$$

Na segunda linha da Equação (4.50), foi adicionada a função  $\Psi(\vartheta)$  para contemplar (ou desconsiderar) elementos presentes (não presentes) na sobreposição de blocos diagonais  $m_a \times m_a$  localizados entre dois blocos diagonais  $m_b \times m_b$  consecutivos. Por exemplo, os elementos não contados na primeira linha da Equação (4.50) estão marcados com um  $X$  ou  $O$  no painel inferior da Figura (9):  $q_{a1}q_{b0}$  e  $q_{a0}q_{b1}$ . Já os elementos contados a mais são:  $q_{a0}q_{b0}$  e  $q_{a1}q_{b1}$ . Logo,

$$\sum_{\alpha\gamma} q_a^{\alpha\gamma} q_b^{\alpha\gamma} = n [r_a r_b + (m_a - 1)q_{a1}q_{b1} + (m_b - m_a)q_{a0}q_{b1} + (n - m_b)q_{a0}q_{b0}] - \Psi(\vartheta) [(q_{a1} - q_{a0})(q_{b1} - q_{b0})]. \quad (4.51)$$

Para se obter uma expressão analítica de  $\Psi(\vartheta)$ , considera-se que, entre dois blocos diagonais  $m_b \times m_b$ , existem elementos da sobreposição  $q_a^{\alpha\gamma} q_b^{\alpha\gamma}$ , que pertencem a blocos diagonais de  $\underline{Q}_a$ , porém não satisfazem a condição de estarem totalmente contidos nas diagonais  $m_b \times m_b$  da matriz  $\underline{Q}_b$  (ver, por exemplo, elementos marcados com  $X$  no painel inferior da Figura (9)). Uma forma de contar esses elementos se dá através do fator embebido  $\vartheta$ , isto é, considera-se que existem  $c_i$  desses elementos nas linhas contidas em cada bloco diagonal  $i$  da matriz  $\underline{Q}_b$ , em que  $i$  ( $= 1, \dots, n/m_b$ ) representa a posição que o bloco diagonal  $m_b \times m_b$  se encontra na matriz  $(\underline{Q}_b)_{n \times n}$ :

$$\begin{aligned} c_1 &= [m_b - \vartheta m_a] \bar{X} \\ c_2 &= \bar{X} [m_b - \vartheta m_a] + 2\bar{X} [-2\bar{X} + m_a] \\ c_3 &= 2\bar{X} [-2\bar{X} + m_a] + 3\bar{X} [-3\bar{X} + m_a] \\ &\quad \vdots \\ c_i &= (i - 1)\bar{X} [-(i - 1)\bar{X} + m_a] + [i\bar{X}] [-i\bar{X} + m_a] \\ &\quad \vdots \\ c_{n/m_b} &= (n/m_b - 1)\bar{X} [(n/m_b - 1)\bar{X} + m_a] \end{aligned} \quad (4.52)$$

onde  $\bar{X} = (\vartheta + 1)m_a - m_b$ . Somando sobre todos os  $c_i$ , tem-se:

$$\Psi(\vartheta) = \sum_i^{n/m_b} c_i = -\bar{X}^2 \sum_{i=1}^{n/m_b-1} [(i-1)^2 + i^2] + m_a \bar{X} \sum_{i=1}^{n/m_b-1} (2i-1) + c_{n/m_b}. \quad (4.53)$$

Efetuada as somas acima, obtem-se:

$$\begin{aligned} \Psi(\vartheta) = & -\frac{n}{3m_b^3} \{ [(\vartheta + 1)m_a - m_b]^2 (m_b^2 - 3nm_b + 2n^2) \\ & - 3[(\vartheta + 1)m_a - m_b] m_a (nm_b - m_b^2) \}. \end{aligned} \quad (4.54)$$

Levando a Equação (4.54) em (4.51) e inserindo a resultante dessa operação em (4.16), junto com a Expressão (4.48) para a parte funcional, tem-se a seguinte fórmula para a energia livre com 1P-QSR modulada:

$$\begin{aligned} \beta F_s = & -\frac{\beta J_0}{2} M_a M_b + \frac{\beta^2 J^2}{2} [r_a r_b - q_{a1} q_{b1} + m_a q_{a1} q_{b1} - m_b q_{a0} q_{b0} + q_{a0} q_{b1} (m_b - m_a) \\ & + g(\vartheta)(q_{a1} - q_{a0})(q_{b1} - q_{b0})] - \sum_{p=a,b} \frac{1}{2m_{p'}} \int_{-\infty}^{\infty} Dz_p \ln \int_{-\infty}^{\infty} Dv_p (K_{s,p})^{m_{p'}} - \ln 2 \end{aligned} \quad (4.55)$$

sendo  $K_{s,p}$  definido na Equação (4.42) e

$$g(\vartheta) = \frac{1}{3m_b} [(\vartheta + 1)m_a - m_b][(\vartheta + 1)m_a - m_b + 3m_a], \quad (4.56)$$

onde  $\vartheta$  é tomado como parâmetro variacional que extremiza a energia livre (4.55) (Oppermann, Sherrington e Kiselev (2004)), visto que, no limite  $n \rightarrow 0$ ,  $\vartheta$  diverge (ver Equação 4.49):

$$\vartheta = \frac{m_b}{m_a} - \frac{5}{2} \implies g(\vartheta) = -\frac{3m_a^2}{4m_b}. \quad (4.57)$$

Os demais parâmetros  $m_p$ ,  $M_p$ ,  $q_{p0}$ ,  $q_{a1}$  e  $r_p$  também são obtidos da condição de extremo da Equação (4.55):

$$\begin{aligned} m_a = & \left\{ m_a^2 \beta^2 J^2 [q_{a1} q_{b1} - q_{a0} q_{b1} - \frac{3m_a}{2m_b} (q_{a1} - q_{a0})(q_{b1} - q_{b0})] \right. \\ & \left. + \int_{-\infty}^{\infty} Dz_b \ln \int_{-\infty}^{\infty} Dv_b (K_{s,b})^{m_a} \right\} / \int_{-\infty}^{\infty} Dz_b \frac{\int_{-\infty}^{\infty} Dv_b (K_{s,b})^{m_a} \ln K_{s,b}}{\int_{-\infty}^{\infty} Dv_b (K_{s,b})^{m_a}} \end{aligned} \quad (4.58)$$

$$\begin{aligned} m_b = & \left\{ m_b^2 \beta^2 J^2 [q_{a0} q_{b1} - q_{a0} q_{b0} + \frac{3m_a^2}{4m_b^2} (q_{a1} - q_{a0})(q_{b1} - q_{b0})] \right. \\ & \left. + \int_{-\infty}^{\infty} Dz_a \ln \int_{-\infty}^{\infty} Dv_a (K_{s,a})^{m_b} \right\} / \int_{-\infty}^{\infty} Dz_a \frac{\int_{-\infty}^{\infty} Dv_a (K_{s,a})^{m_b} \ln K_{s,a}}{\int_{-\infty}^{\infty} Dv_a (K_{s,a})^{m_b}}, \end{aligned} \quad (4.59)$$

$$M_p = \int_{-\infty}^{\infty} Dz_p w 1_{s,p}(z_p), \quad (4.60)$$

$$q_{a0} = \frac{q_{a1}g(\vartheta) + m_b \int_{-\infty}^{\infty} Dz_a w 1_{s,a}(z_a)}{(m_b - g(\vartheta))}, \quad (4.61)$$

$$q_{b0} = \frac{q_{b1}[m_b - m_a - g(\vartheta)] + m_a \int_{-\infty}^{\infty} Dz_b w 1_{s,b}(z_b)}{(m_b - g(\vartheta))}, \quad (4.62)$$

$$q_{a1} = \frac{q_{a0}[m_a - m_b + g(\vartheta)] + (m_b - 1) \int_{-\infty}^{\infty} Dz_a w 2_{s,a}(z_a)}{(m_a - 1 + g(\vartheta))}, \quad (4.63)$$

$$q_{b1} = \frac{q_{b0}g(\vartheta) + (m_a - 1) \int_{-\infty}^{\infty} Dz_b w 2_{s,b}(z_b)}{(m_a - 1 + g(\vartheta))} \quad (4.64)$$

e

$$r_p = \int_{-\infty}^{\infty} Dz_p \frac{\int Dv_p \left[ (K_{s,p})^{(m_{p'}-1)} \int D\xi_p \left( \frac{h_p^2 \cosh(\beta\sqrt{h_p^2+\Gamma^2})}{h_p^2+\Gamma^2} + \frac{\Gamma^2 \sinh(\beta\sqrt{h_p^2+\Gamma^2})}{\beta(h_p^2+\Gamma^2)^{3/2}} \right) \right]}{\int_{-\infty}^{\infty} Dv(K_{s,p})^{m_{p'}}}, \quad (4.65)$$

onde

$$w 1_{s,p}(z_p) = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} Dv_p \left( (K_{s,p})^{(m_{p'}-1)} \int D\xi_p \frac{h_p \sinh(\beta\sqrt{h_p^2+\Gamma^2})}{\sqrt{h_p^2+\Gamma^2}} \right)}{\int_{-\infty}^{\infty} Dv_p (K_{s,p})^{m_{p'}}} \quad (4.66)$$

e

$$w 2_{s,p}(z_p) = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} Dv_p \left[ (K_{s,p})^{(m_{p'}-2)} \left( \int D\xi_p \frac{h_p \sinh(\beta\sqrt{h_p^2+\Gamma^2})}{\sqrt{h_p^2+\Gamma^2}} \right)^2 \right]}{\int_{-\infty}^{\infty} Dv_p (K_{s,p})^{m_{p'}}}. \quad (4.67)$$

Na seção 5.1.2, os resultados dos métodos modulado e de Parisi (seção anterior) são comparados.

## 4.2 Modelo KS generalizado quântico: formulação fermiônica

Nesta seção, estuda-se uma versão quântica para o modelo KS generalizado (KSG), que corresponde a uma formulação fermiônica do modelo KSG em presença de um campo magnético transversal à direção Ising. Em específico, o modelo considera um conjunto de spins localizados em sítio de duas sub-redes idênticas  $a$  e  $b$ . Os spins de mesmas e distintas sub-redes podem interagir com um acoplamento aleatório de alcance infinito. Um campo

magnético paralelo ( $H$ ) e outro transverso ( $\Gamma$ ) ao acoplamento Ising são aplicados nas duas sub-redes. Portanto, a Hamiltoniana desse modelo é representada por:

$$\begin{aligned} \hat{H} = & - \sum_{i_a j_b} J_{i_a j_b} \hat{S}_{i_a}^z \hat{S}_{j_b}^z - \sum_{p=a,b} \sum_{i_p j_p} V_{i_p j_p} \hat{S}_{i_p}^z \hat{S}_{j_p}^z \\ & - 2 \sum_{i_a} \left( \Gamma \hat{S}_{i_a}^x + H \hat{S}_{i_a}^z \right) - 2 \sum_{j_b} \left( \Gamma \hat{S}_{j_b}^x + H \hat{S}_{j_b}^z \right) \end{aligned} \quad (4.68)$$

onde as somas sobre os sub-índices  $i_p$  e  $j_p$  são estendidas aos  $N$  sítios de cada sub-rede  $p$  ( $= a$  ou  $b$ ). As interações  $V_{i_p j_p}$  e  $J_{i_p j_p}$  são variáveis aleatórias que seguem distribuições de probabilidades Gaussianas:

$$P_V(V_{i_p j_p}) = \sqrt{\frac{N}{32\pi V^2}} \exp \left[ -\frac{(V_{i_p j_p} - \frac{2V_0}{N})^2}{32V^2} N \right] \quad (4.69)$$

e

$$P_J(J_{i_a j_b}) = \sqrt{\frac{N}{64\pi J^2}} \exp \left[ -\frac{(J_{i_p j_p} + \frac{4J_0}{N})^2}{64J^2} N \right]. \quad (4.70)$$

No modelo (4.68), os operadores de spin  $\hat{S}_{i_p}^z$  e  $\hat{S}_{i_p}^x$  são definidos como na Equação (4.3), em que eles são descritos por combinações bilineares de férmions com spins localizados. O penúltimo e o último termo da primeira linha da Equação (4.68) representam interações desordenadas entre spins situados em sub-redes distintas e entre spins de mesmas sub-redes, respectivamente. A interação média entre sub-redes diferentes pode ser anti-ferromagnética ( $J_0 > 0$ ) e spins de sub-redes idênticas podem apresentar uma interação média ferromagnética ( $V_0 > 0$ ). A segunda linha do modelo (4.68) representa as interações dos spins com os campos magnéticos aplicados.

A análise quantitativa do modelo (4.68) segue com a função de partição escrita no formalismo Lagrangeano das integrais de caminho fermiônicas, em que os operadores de spin são representados por variáveis de Grassmann dependentes do tempo  $\tau$  ( $\phi(\tau), \phi^*(\tau)$ ) (Negele e Orland (1988)). Como nas Seções 3.2.1 e 4.1, são utilizados dois modelos distintos: o modelo restrito de dois estados (2S) e o modelo de quatro estados (4S). Em linhas gerais, os procedimentos adotados aqui são semelhantes aos da seção 4.1. Assim, as quantidades dependentes do tempo são tratadas aplicando a decomposição de Fourier. As médias sobre as desordens “quenched” (distribuições (4.69) e (4.70)) são realizadas com o método das réplicas:  $\beta F = -1/(2N) \lim_{n \rightarrow 0} (Z(n) - 1)/n$ , onde  $Z(n) \equiv \langle Z^n \rangle_{J_{i_a j_b}, V_{i_p j_p}}$  representa a função de partição replicada, na qual são efetuadas as médias em relação a  $J_{i_a j_b}$  e  $V_{i_p j_p}$  ( $p = a$  e  $b$ ). Transformações de Hubbard-Stratonovich são usadas para desacoplar interações entre sítios. Na aproximação estática, o problema efetivo resultante

desse procedimento envolve condições ponto de sela para as magnetizações  $M_p$  de cada sub-rede  $p$ , correlações spin-spin  $r_p$  das diagonais das matrizes das réplicas e elementos não diagonais  $q_p^{\alpha\gamma}$  das matrizes das réplicas, que estão relacionados aos parâmetros de ordem vidro de spin. Há também campos auxiliares  $Q_3^{\alpha\gamma} = (q_a^{\alpha\gamma} + q_b^{\alpha\gamma})/2$ , que acoplam as matrizes das réplicas de sub-redes diferentes. Portanto, a expressão analítica para a função de partição replicada fica:

$$Z(n) = \beta \sum_{\alpha} \left[ -J_0 M_a^{\alpha} M_b^{\alpha} + \frac{V_0}{2} \sum_p (M_p^{\alpha})^2 \right] + \beta^2 \sum_{\alpha, \gamma} \left[ J^2 q_a^{\alpha\gamma} q_b^{\alpha\gamma} + \frac{V^2}{2} \sum_p (q_p^{\alpha\gamma})^2 \right] - \sum_p \ln \Theta_p\{y\} \quad (4.71)$$

onde  $\alpha$  e  $\gamma$  são índices de réplica que podem assumir valores de 1 até  $n$ ,

$$\Theta_p\{y\} = \prod_{\alpha} \int_0^{2\pi} \frac{dx_p^{\alpha}}{2\pi} e^{-y_p^{\alpha}} \int D[\phi_p^{\alpha*} \phi_p^{\alpha}] \exp [H_p^{eff}] \quad (4.72)$$

com

$$H_p^{eff} = \sum_{\alpha} [A_{M,p}^{\alpha} + 2\beta (V_0 M_p^{\alpha} - J_0 M_{p'}^{\alpha}) S_p^{\alpha}] + 4\beta^2 \sum_{\alpha\gamma} [V^2 q_p^{\alpha\gamma} + J^2 q_{p'}^{\alpha\gamma}] S_p^{\alpha} S_p^{\gamma}, \quad (4.73)$$

e  $p = a$  ( $p' = b$ ) ou  $p = b$  ( $p' = a$ ). Na Equação (4.73),

$$A_{M,p}^{\alpha} = \sum_{\omega} \Phi_p^{\alpha\dagger}(\omega) (i\omega + y_p^{\alpha} + \beta H \underline{\sigma}^z + \beta \Gamma \underline{\sigma}^x) \Phi_p^{\alpha}(\omega), \quad (4.74)$$

$$S_p^{\alpha} = \frac{1}{2} \sum_{\omega} \Phi_p^{\alpha\dagger}(\omega) \underline{\sigma}^z \Phi_p^{\alpha}(\omega), \quad (4.75)$$

$\Phi_p^{\alpha\dagger}(\omega) = (\phi_{p\uparrow}^{\alpha*}(\omega) \quad \phi_{p\downarrow}^{\alpha*}(\omega))$  é um vetor cujo elementos são variáveis de Grassmann,  $\underline{\sigma}^x$  e  $\underline{\sigma}^z$  são matrizes de Pauli e  $\omega = (2m + 1)\pi$  ( $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ ) denota frequências de Matsubara.

Neste estágio, trata-se o problema com teoria de quebra da simetria de réplicas (QSR) proposta por Parisi (1980), em que um passo de QSR (1P-QSR) é adotado na parametrização dos elementos  $q_p^{\alpha\gamma}$  das duas sub-rede, tal como na Equação (4.35).

Para um caso geral, quando  $J$  e  $V$  são não nulos (modelo KSG), o parâmetro  $m_p$  (ver Equação (4.35)) é aproximado por  $m$  em ambas sub-redes:  $m \equiv m_a = m_b$ . Essa aproximação, também usada na seção 4.1.2.1, é adotada para se seguir o procedimento padrão do esquema de QSR de Parisi. Entretanto, a situação com  $J = 0$  e  $V \neq 0$  (modelo KSGP) é analisada tomando  $m_a$  e  $m_b$  como parâmetros independentes ( $m_a \neq m_b$ ) na seção 5.2.2.

A parametrização (4.35) com  $m = m_a = m_b$  é usada para somar sobre os índices de réplica nas Equações (4.71) e (4.73). Esses cálculos seguem de modo análogo aos realizados na seção 4.1.2.1, porém com uma interação adicional proveniente da presença de desordem intra-sub-rede ( $V \neq 0$ ). O procedimento descrito acima produz termos quadráticos na Equação (4.73), que são linearizados através da introdução de novos campos auxiliares na Equação (4.72). Assim, o problema é reduzido ao problema efetivo de uma única réplica interagindo com um campo interno aleatório. A integral funcional nas variáveis de Grassmann é resolvida analiticamente e a soma sobre as frequências de Matsubara pode ser efetuada seguindo a referência Theumann et al. (2002). Esse procedimento resulta na seguinte expressão para a energia livre com 1P-QSR:

$$2F_s = -J_0 M_a M_b + \beta J^2 [m(q_{a1} q_{b1} - q_{a0} q_{b0}) + r_a r_b - q_{a1} q_{b1}] + \sum_{p=a,b} \left\{ \frac{V_0}{2} M_p^2 + \frac{\beta V^2}{2} [m(q_{p1}^2 - q_{p0}^2) + r_p^2 - q_{p1}^2] - \frac{1}{\beta m} \int_{-\infty}^{\infty} D z_p \ln \int_{-\infty}^{\infty} D v_p \Theta_{s,p}^m \right\} - \frac{\ln 4}{\beta} \quad (4.76)$$

com

$$\Theta_{s,p} = \frac{s-2}{2} + \int_{-\infty}^{\infty} D \xi_p \cosh(\beta \sqrt{\Delta_p}) \quad (4.77)$$

onde  $\Delta_p = h_p^2 + \Gamma^2$ ,  $h_p = \bar{h}_p + \sigma_{1p} v_p + \sigma_{2p}$ ,  $\bar{h}_p = H + V_0 M_p - J_0 M_{p'}$  ( $p \neq p'$ ),

$$\sigma_{1p} = \sqrt{2[V^2(q_{p1} - q_{p0}) + J^2(q_{p'1} - q_{p'0})]}, \quad (4.78)$$

$$\sigma_{2p} = \sqrt{2[V^2(r_p - q_{p1}) + J^2(r_{p'} - q_{p'1})]} \xi_p + \sqrt{2[V^2 q_{p0} + J^2 q_{p'0}]} z_p, \quad (4.79)$$

$Dx = dx e^{-x^2/2} / \sqrt{2\pi}$  ( $x = z_p, v_p$  or  $\xi_p$ ) e  $s$  representa o número de estados admitidos em cada modelo ( $s = 2$  ou  $4$ ). Os parâmetros  $q_{p0}$ ,  $q_{p1}$ ,  $M_p$ ,  $r_p$  e  $m$  são dados pela condição de extremo da energia livre (4.76):

$$M_p = \int_{-\infty}^{\infty} D z_p \frac{\int_{-\infty}^{\infty} D v_p \left( (\Theta_{s,p})^{m-1} \int D \xi_p \frac{h_p \sinh(\beta \sqrt{\Delta_p})}{\sqrt{\Delta_p}} \right)}{\int_{-\infty}^{\infty} D v_p (\Theta_{s,p})^m}, \quad (4.80)$$

$$q_{p0} = \int_{-\infty}^{\infty} D z_p \left[ \frac{\int_{-\infty}^{\infty} D v_p \left( (\Theta_{s,p})^{m-1} \int D \xi_p \frac{h_p \sinh(\beta \sqrt{\Delta_p})}{\sqrt{\Delta_p}} \right)}{\int_{-\infty}^{\infty} D v_p (\Theta_{s,p})^m} \right]^2, \quad (4.81)$$

$$q_{p1} = \int_{-\infty}^{\infty} D z_p \frac{\int_{-\infty}^{\infty} D v_p \left[ (\Theta_{s,p})^{m-2} \left( \int D \xi_p \frac{h_p \sinh(\beta \sqrt{\Delta_p})}{\sqrt{\Delta_p}} \right)^2 \right]}{\int_{-\infty}^{\infty} D v_p (\Theta_{s,p})^m}, \quad (4.82)$$

$$r_p = \int_{-\infty}^{\infty} Dz_p \frac{\int_{-\infty}^{\infty} Dv_p \left[ (\Theta_{s,p})^{m-1} \int D\xi_p \left( \frac{h_p^2 \cosh(\beta\sqrt{\Delta_p})}{\Delta_p} + \frac{\Gamma^2 \sinh(\beta\sqrt{\Delta_p})}{\beta(\Delta_p)^{3/2}} \right) \right]}{\int_{-\infty}^{\infty} Dv(\Theta_{s,p})^m} \quad (4.83)$$

e

$$m = \frac{m^2 \beta^2 [J^2 (q_{a1} q_{b1} - q_{a0} q_{b0}) + \frac{V^2}{2} \sum_p (q_{p1}^2 - q_{p0}^2)] + \sum_p \int_{-\infty}^{\infty} Dz_p \ln \int_{-\infty}^{\infty} Dv_p (\Theta_{s,p})^m}{\sum_p \int_{-\infty}^{\infty} Dz_p \frac{\int_{-\infty}^{\infty} Dv_p [(\Theta_{s,p})^m \ln \Theta_{s,p}]}{\int_{-\infty}^{\infty} Dv_p (\Theta_{s,p})^m}}. \quad (4.84)$$

O campo interno efetivo  $\sqrt{\Delta_p}$ , que atua sobre spins da sub-rede  $p$ , tem uma expressão complicada, a qual depende da relação de vários parâmetros, como, por exemplo,  $\Gamma$ ,  $V$ ,  $J$ ,  $V_0$ ,  $J_0$  e  $H$ . Em particular, para  $\Gamma = 0$ , o campo interno é dado por  $h_p$ . Nesse caso,  $h_p$  depende do campo interno médio  $\bar{h}_p$  e, em específico, da variância  $\sigma_{1p}$ . A variância  $\sigma_{1p}$  está diretamente relacionada ao grau de QSR ( $\delta_p \equiv q_{p1} - q_{p0}$ ) de ambas as sub-redes e das desordens  $V$  e  $J$ . Uma análise mais detalhada do comportamento do campo interno efetivo é realizada na seção 5.2, que também mostra resultados numéricos para o presente modelo.

A solução da energia livre com 1P-QSR (4.76) recupera os resultados com simetria de réplicas (SR) em temperaturas acima da temperatura de congelamento  $T_f$ , em que  $q_{p1} = q_{p0}$  ( $\sigma_{1p} = 0$ ) e  $m = 0$ . Nesse caso, a estabilidade em relação às flutuações transversais da solução com SR segue da análise de Almeida e Thouless (1978), a qual é estendida ao problema de duas sub-redes (ver Apêndice D). Assim,  $T_f$  é dado pela maior temperatura que satisfaz a expressão (Apêndice D):

$$(T_f^2 - V^2 d_a)(T_f^2 - V^2 d_b) - J^4 d_a d_b = 0 \quad (4.85)$$

em que

$$d_p = 2 \int_{-\infty}^{\infty} Dz_p \left\{ \left( \frac{\int D\xi_p \frac{h_p}{\sqrt{\Delta_p}} \sinh(\beta\sqrt{\Delta_p})}{\Theta_p} \right)^2 - \frac{\int D\xi_p \left[ \frac{h_p^2}{\Delta_p} \cosh(\beta\sqrt{\Delta_p}) + \frac{\Gamma^2}{\beta\Delta_p^{3/2}} \sinh(\beta\sqrt{\Delta_p}) \right]}{\Theta_p} \right\}^2 \quad (4.86)$$

com  $\sigma_{1p} = 0$  em  $h_p$ .

## 5 RESULTADOS

Neste capítulo, são apresentados resultados numéricos da competição entre vidro de spin (VS) e antiferromagnetismo (AF). Mais especificamente, na Seção 5.1, são mostrados os resultados obtidos da versão quântica do modelo KS (ver Equação (4.1) da Seção 4.1), na qual são usadas as soluções com simetria de réplicas (referência Zimmer e Magalhães (2006b)) e quebra da simetria de réplicas. A Seção 5.2 é reservada ao estudo detalhado dos resultados da formulação fermiônica para o modelo KS generalizado (ver modelo descrito pela Equação (4.68) na Seção 4.2) na presença de um campo magnético transversal  $\Gamma$  (referências Zimmer e Magalhães (2007b) e Zimmer e Magalhães (2007a)).

### 5.1 Resultados para o modelo KS em campo transversal

Nesta seção, são analisados resultados da formulação fermiônica para o modelo de Korenblit e Shender (1985) em um campo transversal (ver seção 4.1.1). Primeiro, apresentam-se resultados com simetria de réplicas (SR), nos quais são estudados basicamente os diagramas de fase do modelo em questão. Após, exibem-se resultados com um passo de quebra de simetria de réplicas, que permitem melhorar a descrição da região onde a SR é instável (ver seção 3.3 para uma rede).

#### 5.1.1 Resultados com simetria de réplicas

Nesse caso, encontram-se numericamente as soluções do conjunto de parâmetros de ordem dado pelas Equações (4.28), (4.29) e (4.30). Também avalia-se a estabilidade dessas soluções através do autovalor  $\lambda_{AT}$  (ver Equação (4.33)). Nesse contexto, são diferenciadas as soluções de dois casos:  $H = 0$  e  $H > 0$ . Para  $H = 0$ , a solução antiferromagnética (AF) é encontrada quando as sub-redes apresentam magnetizações espontâneas de sinais opostos, tal que:  $M_a = -M_b > 0$ ,  $q_a = q_b > 0$  e  $\lambda_{AT} > 0$ . A solução vidro de spin (VS) ocorre quando  $M_a = M_b = 0$ ,  $q_p > 0$  e  $\lambda_{AT} < 0$ . A fase mista (VS+AF) é caracterizada por:  $M_a = -M_b > 0$ ,  $q_a = q_b > 0$  e  $\lambda_{AT} < 0$ . Por outro lado, quando  $H > 0$ , os parâmetros  $M_p$  e  $q_p$  são sempre não nulos. Nesse caso, a fase AF é caracterizada pela magnetização “staggered”  $M_s \equiv (M_a - M_b)/(2) > 0$  com  $\lambda_{AT} > 0$ . A fase paramagnética



ocorre quando  $M_s = 0$  e  $\lambda_{AT} > 0$ . A fase VS é obtida quando  $M_s = 0$  e  $\lambda_{AT} < 0$ . Por fim, a fase mista é dada por  $M_s > 0$  com  $\lambda_{AT} < 0$ .

No tratamento fermiônico adotado neste trabalho, identificam-se duas situações para a componente diagonal da matriz das réplicas  $r_p$ . No modelo 2S com  $\Gamma = 0$ ,  $r_p = 1$  e no modelo 4S, ou no modelo 2S com  $\Gamma > 0$ , é necessário considerar o acoplamento entre elementos diagonais e não diagonais da matriz das réplicas. Conseqüentemente, o parâmetro  $r_p$  deve ser calculado simultaneamente com  $q_p$  e  $M_p$ . Portanto,  $r_p$  torna-se relevante na determinação das demais quantidades físicas do problema.

Em particular, para  $H = 0$ , calcula-se a temperatura de Néel  $T_{N0} = T_N(J_0, \Gamma, H = 0)$  usando uma expansão das equações ponto de sela (4.28)-(4.30) em potências de  $M_p$  ( $M_a = -M_b$  quando  $H = 0$ ). Na linha crítica de segunda ordem  $T_{N0}$ , pode-se tomar  $q_p = 0$ . Com isso, obtem-se  $r \equiv r_p = 1/(J_0\beta_N)$  e

$$M\left[1 - \beta_N J_0 \left( \frac{\frac{s-2}{2} + \int D\xi \xi^2 \cosh \beta_N \sqrt{\frac{2J\xi^2}{J_0\beta_N} + \Gamma^2}}{\frac{s-2}{2} + \int D\xi \cosh \beta_c \sqrt{\frac{2J\xi^2}{J_0\beta_N} + \Gamma^2}} \right)\right] = 0, \quad (5.1)$$

onde  $M \equiv M_a = -M_b$  e  $\beta_N = 1/T_{N0}$ . É importante salientar que o resultado (5.1) vale somente para  $H = 0$  e  $J_0 > 2\sqrt{2}J$ . Para  $\Gamma = 0$ , a temperatura de Néel é  $T_{N0} = J_0 / [\frac{s-2}{2} \exp(\frac{-J^2}{T_{N0}J_0}) + 1]$ , enquanto que para  $T_{N0}$  próxima de zero, o valor crítico do campo transversal é dado pela solução analítica da equação (5.1):  $\Gamma_N = J_0 + 2J^2/J_0$ , para os dois modelos.

A Figura (10) mostra diagramas de fase  $T/J$  versus  $J_0/J$  quando  $H$  e  $\Gamma$  são nulos. Para essa particular situação, os resultados são qualitativamente equivalentes aos obtidos no modelo KS com variáveis clássicas de spins de Ising. Especificamente, o modelo 2S reproduz exatamente os resultados da referência Korenblit e Shender (1985). Por exemplo, a fase paramagnética (PM) é encontrada em temperaturas elevadas e grau de frustração  $\eta \equiv [J_0/J]^{-1}$  alto.<sup>1</sup> Já a solução antiferromagnética (AF) pode ser obtida em ambos modelos na região onde o grau de frustração  $\eta$  é suficientemente baixo. Na Figura (10), aumentando  $\eta$  e diminuindo a temperatura, surge a linha de Almeida-Thouless em  $T_f$ , dando origem a uma região de quebra de ergodicidade complexa (fase vidro de spin VS). Também existe uma região intermediária conhecida como fase mista (VS+AF), em que as magnetizações das sub-redes permanecem finitas e de sinais opostos na região com quebra da simetria de réplicas ( $\lambda_{AT} < 0$ ). Os dois modelos apresentam temperaturas de transição em diferentes pontos, isto é,  $(T_f)_{2S} > (T_f)_{4S}$ ,  $(T_N)_{2S} > (T_N)_{4S}$  e  $(\partial T_N / \partial \eta)_{2S} <$

<sup>1</sup>As análises realizadas nesta seção consideram o grau de frustração definido por  $\eta \equiv [J_0/J]^{-1}$ .

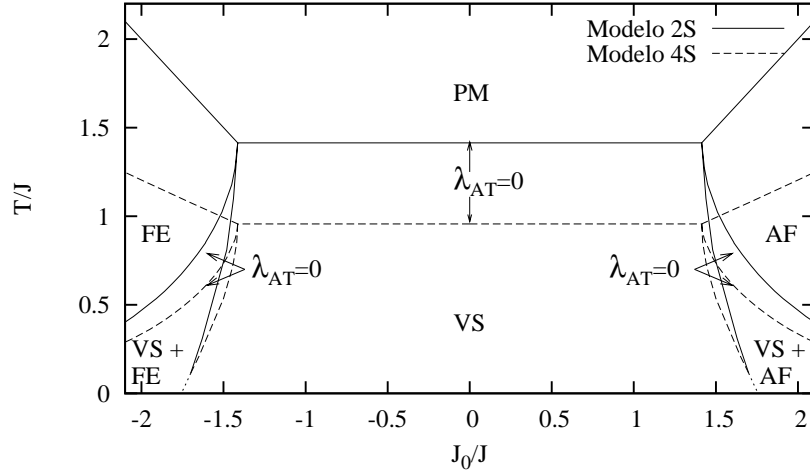


Figura 10: Diagrama de fase  $T/J$  versus  $J_0/J$  para  $H = \Gamma = 0$ . As linhas cheias correspondem às temperaturas críticas obtidos pelo modelo restrito 2S e as linhas tracejadas correspondem ao modelo não restrito 4S. As linhas pontilhadas são extrapolações conduzidas a temperaturas mais baixas. A linha de Almeida-Thouless é identificada por  $\lambda_{AT} = 0$ .

$(\partial T_N / \partial \eta)_{4S}$  ( $T_N$  é a temperatura de Néel). Esses comportamentos distintos ocorrem devido à diferença de sensibilidade aos acoplamentos magnéticos entre os dois modelos, visto que, no modelo 4S, pode haver sítios não magnéticos. Na Figura (10), também é exibida a região com  $J_0/J < 0$ , onde uma solução ferromagnética (FE) é encontrada com  $M_a = M_b$ . Assim, recupera-se essencialmente a competição VS/FE do problema SK de uma única rede (Kirkpatrick e Sherrington (1978)). Nos resultados mostrados acima, sem presença de campos magnéticos, existe uma simetria entre as duas sub-redes.

Quando  $H = 0$ , os efeitos causados pelo campo transversal  $\Gamma$  são exibidos na Figura (11). Nesse caso, identificam-se duas situações diferentes, as quais dependem do grau de frustração. Para  $\eta > 1/\sqrt{2}$  ( $0 \leq J_0/J < \sqrt{2}$ ), a magnetização de ambas as sub-redes é nula. Portanto, o problema se reduz ao problema efetivo de uma única rede na presença de um campo magnético transversal, reproduzindo os resultados da Figura (5) (ver Seção 3.2.2), isto é, para valores pequenos de  $\Gamma$ , a temperatura de congelamento  $T_f$  é diferente em cada modelo (ver Figura (11-a)). Entretanto, quando  $\Gamma$  cresce, os efeitos de “flip” nos spin aumentam e as temperaturas críticas dos dois modelos decrescem tendendo a valores idênticos. Em particular, quando  $\Gamma = \Gamma_c$ , ocorre um ponto crítico quântico (PCQ) para os modelos 2S e 4S. A Figura (11-b) mostra um diagrama de fase para um grau de frustração menor;  $\eta = 0,59$  ( $J_0/J = 1,7$ ). Com esse conjunto de parâmetros ( $J_0/J = 1,7$  e  $H = 0$ ), a solução PM ocorre em temperaturas elevadas para todos os valores de  $\Gamma$ . Considerando valores baixos de  $\Gamma$ , pode surgir a seguinte seqüência de transições de fase

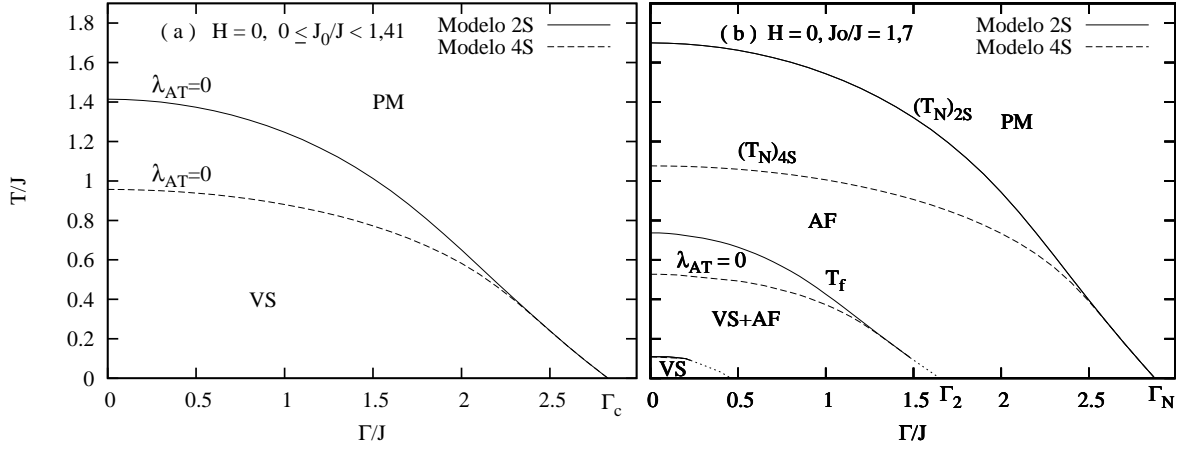


Figura 11: Diagramas de fases  $T/J$  versus  $\Gamma/J$  para  $H = 0$ : (a)  $0 \leq J_0/J < \sqrt{2}$  ( $\eta > 1/\sqrt{2}$ ) e (b)  $J_0/J = 1,7$  ( $\eta = 0,59$ ). A convenção para os tipos de linhas é a mesma adotada na Figura (10).

quando a temperatura diminui: uma transição à fase AF (com  $(T_N)_{2S} > (T_N)_{4S}$ ), então à fase mista (VS+AF) e, finalmente, na solução com simetria de réplicas, uma transição ao VS em temperaturas mais baixas. Essas transições são governadas, principalmente, por flutuações térmicas. Por outro lado, quando  $\Gamma$  aumenta, as temperaturas de Néel de ambos os modelos decrescem em direção a um PCQ em  $\Gamma = \Gamma_N$ . Semelhante ao comportamento de  $T_N$ , as temperaturas  $(T_f)_{2S}$  e  $(T_f)_{4S}$  também decrescem com aumento de  $\Gamma$ . Na Figura (11-b), as temperaturas críticas dos dois modelos convergem para valores idênticos quando  $\Gamma$  aumenta. As razões desse comportamento com  $\eta = 0,59$  são as mesmas encontradas quando o grau de frustração é mais elevado ( $\eta > 1/\sqrt{2}$  na Figura (11-a)). Analisando-se a Equação (4.27) para temperaturas muito baixas, verifica-se que o termo integrado em  $\xi_p$  é dominante no modelo 4S e, conseqüentemente, a diferença entre os modelos 2S e 4S se torna desprezível. Nesse sentido, a contribuição dos estados magnéticos dominam a energia livre do modelo 4S. Portanto, a principal diferença entre os dois modelos está na região onde as transições são essencialmente governadas por flutuações térmicas.

A Figura (12) mostra diagramas de fase  $T/J$  versus  $H/J$  para o modelo 2S quando  $\Gamma = 0$ . Esses diagramas de fase são estudados com quatro valores diferentes de graus de frustração  $\eta$ . O campo magnético paralelo  $H$  quebra a simetria entre as sub-redes, produzindo um efeito similar ao observado no modelo KS com spins clássicos (Korenblit e Shender (1985)). Nesse caso,  $H$  destrói a fase AF e a temperatura de Néel decresce rapidamente quando  $H$  aumenta na região  $0 < H < H_c$  ( $H_c$  é o valor de campo magnético  $H$  no qual  $T_f = T_N$ ). Entretanto, nas Figuras (12-b), (12-c) e (12-d), existe um intervalo de

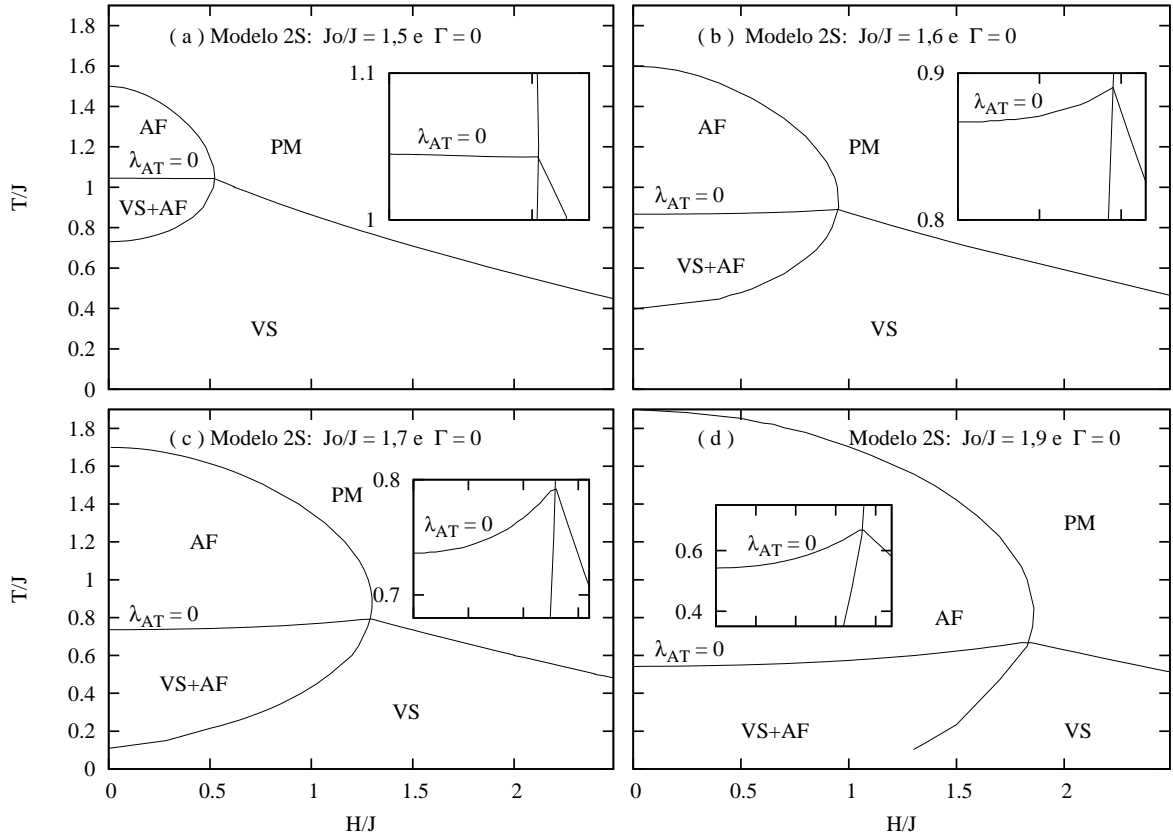


Figura 12: Diagramas de fase  $T/J$  versus  $H/J$  para o modelo 2S com  $\Gamma = 0$  e vários valores de grau de frustração: (a)  $\eta = 0,67$  ( $J_0/J = 1,5$ ), (b)  $\eta = 0,63$  ( $J_0/J = 1,6$ ), (c)  $\eta = 0,59$  ( $J_0/J = 1,7$ ) e (d)  $\eta = 0,53$  ( $J_0/J = 1,9$ ). Os gráficos inseridos nos painéis (a), (b), (c) e (d) representam um aumento na escala do eixo  $T/J$  e mostram em detalhes o comportamento de  $T_f$  ( $\lambda_{AT} = 0$ ).

campo  $H$  próximo a  $H_c$  ( $H < H_c$ ), em que a temperatura de congelamento  $T_f$  (associada à instabilidade de Almeida-Thouless) aumenta. Logo, a frustração pode ser favorecida com  $H$  no problema de duas sub-redes estudado aqui. Esse comportamento de  $T_f$  difere do observado no problema VS de uma única rede, no qual  $T_f$  decresce monotonicamente com  $H$  (Kirkpatrick e Sherrington (1978)). Contudo, para  $H > H_c$ , o comportamento da linha de Almeida-Thouless torna-se similar ao do problema de uma rede, decrescendo com  $H$ . O favorecimento da frustração em função de  $H$  poderia estar relacionado ao drástico decréscimo da temperatura de Néel para  $H$  próximo à  $H_c$ . Esse comportamento de  $T_f(H)$  é avaliado em maiores detalhes na seção seguinte, quando os resultados com um passo de quebra de simetria de réplicas são mostrados.

A Figura (13) exhibe diagramas de fase  $T/J$  versus  $H/J$  para o modelo 4S com  $\Gamma = 0$  e os mesmos valores de  $\eta$  da Figura (12). As Figuras (12) e (13) possuem as mesmas escalas nos eixos  $T/J$  e  $H/J$  com intuito de facilitar uma comparação entre os resultados

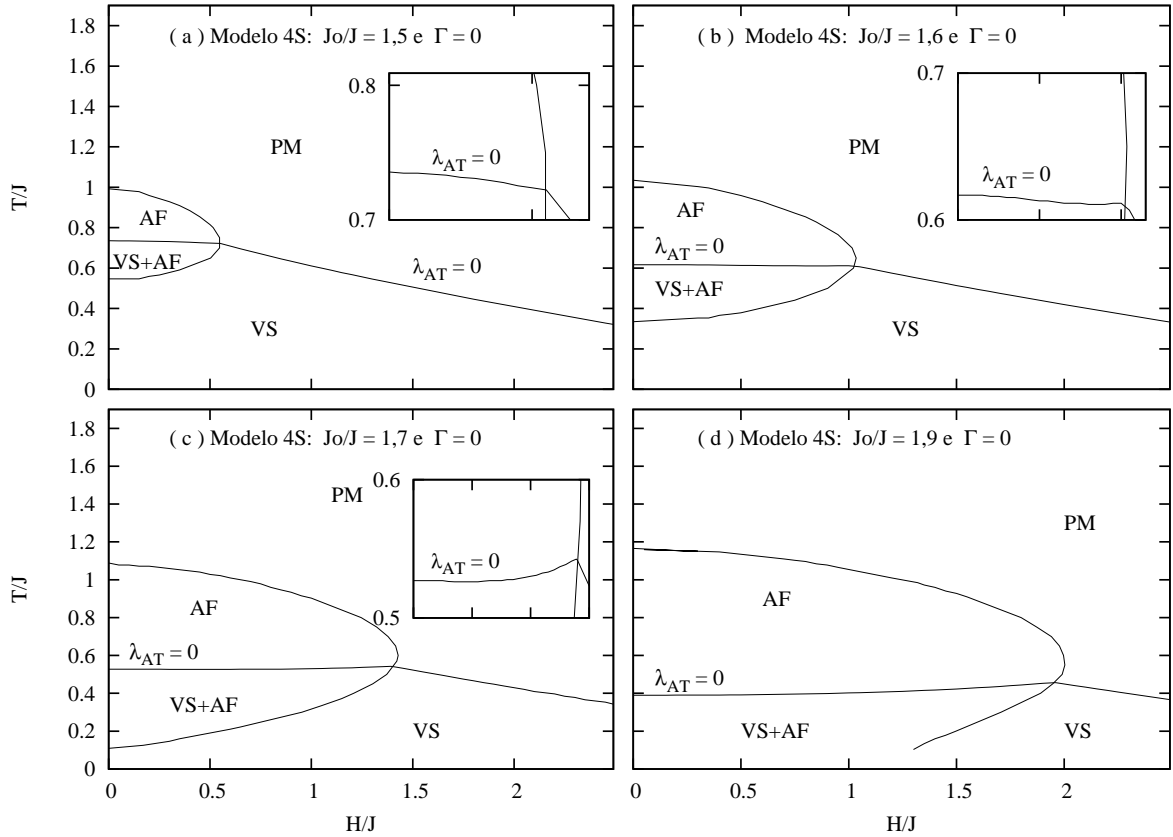


Figura 13: Diagramas de fase  $T/J$  versus  $H/J$  para o modelo 4S com  $\Gamma = 0$  e vários graus de frustração: (a)  $\eta = 0,67$  ( $J_0/J = 1,5$ ), (b)  $\eta = 0,63$  ( $J_0/J = 1,6$ ), (c)  $\eta = 0,59$  ( $J_0/J = 1,7$ ) e (d)  $\eta = 0,53$  ( $J_0/J = 1,9$ ). Os gráficos inseridos nos painéis (a), (b) e (c) representam um aumento na escala do eixo  $T/J$  e mostram em detalhes o comportamento de  $T_f$  ( $\lambda_{AT} = 0$ ).

dos dois modelos. A presença do campo magnético  $H$  produz efeitos levemente diferentes nos modelo 2S e 4S. Por exemplo, a temperatura  $T_f$ , dada pela instabilidade de Almeida-Thouless, cresce mais rápida no modelo 2S do que no modelo 4S quando  $H$  aumenta. Além disso, a solução AF é mais robusta no modelo 4S, pois a ordem AF pode ser encontrada em valores de  $H$  maiores que no modelo 2S.

Os efeitos produzidos quando os campos  $H$  e  $\Gamma$  são simultaneamente não nulos podem ser analisados na Figura (14), que mostra diagramas de fase  $T/J$  versus  $H/J$  para os modelos 2S e 4S com  $\Gamma/J = 1$ . Os valores de  $\eta$  são os mesmos utilizados nas Figuras (12) e (13). Nesse caso, ocorrem importantes diferenças se forem comparados os resultados de  $\Gamma = 1$  e  $\Gamma = 0$ . Quando  $\Gamma$  é aplicado, as temperaturas críticas  $(T_N)_{2S, 4S}$  e  $(T_f)_{2S, 4S}$  diminuem para todos os valores de  $H$ . Outro efeito importante está relacionado à linha  $\lambda_{AT} = 0$ , que, para os dois modelos, apresenta um comportamento diferente na região  $0 < H < H_c$  quando  $\Gamma > 0$ . Por exemplo, na Figura (14-a), com  $\eta = 0,67$  ( $J_0/J = 1,5$ ),

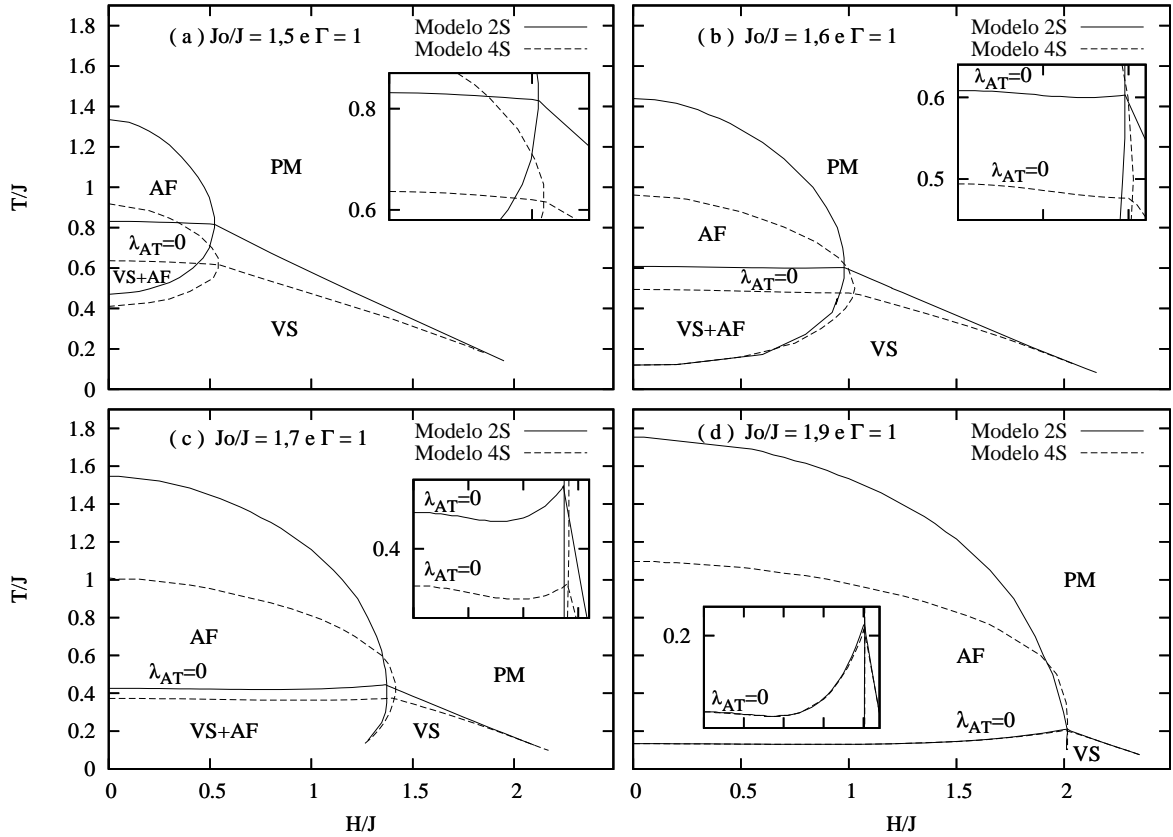


Figura 14: Diagramas de fase  $T/J$  versus  $H/J$  para os modelos 2S (linhas cheias) e 4S (linhas tracejadas) com  $\Gamma/J = 1$  e os seguintes valores  $\eta$ : (a)  $\eta = 0,67$  ( $J_0/J = 1,5$ ), (b)  $\eta = 0,63$  ( $J_0/J = 1,6$ ), (c)  $\eta = 0,59$  ( $J_0/J = 1,7$ ) e (d)  $\eta = 0,53$  ( $J_0/J = 1,9$ ). Os valores de frustração e as convenções para os gráficos inseridos são as mesmas adotadas nas Figuras (12) e (13).

quando  $H$  aumenta em direção a  $H_c$ ,  $T_f$  decresce mais rapidamente que nos diagramas equivalentes com  $\Gamma = 0$  (ver Figuras (12) e (13)). Aumentando  $\eta$ , como nas Figuras (14-b), (14-c) e (14-d), a linha  $\lambda_{AT} = 0$  exibe um delicado balanço entre os efeitos causados pelos mecanismos contidos em  $H$  e  $\Gamma$ . Para  $H \approx 0$ , a presença de  $\Gamma$  é dominante e o mecanismo quântico de “flip” nos spins tende a destruir a frustração ( $\partial T_f / \partial H < 0$ ). À medida que  $H$  aumenta, a frustração é novamente favorecida e, para  $H \approx H_c$ ,  $\partial T_f / \partial H > 0$ . Particularmente, próximo a  $H_c$ , existe um grande aumento de  $T_f$  quando  $\eta$  diminui (ver Figura (14-d)).

Aumentando ainda mais o valor de  $\Gamma$ , como nas Figuras (15-a) e (15-b) para  $\eta = 0,59$ , onde  $\Gamma/J = 1,7$  e  $\Gamma/J = 2,4$ , respectivamente, o caráter VS é totalmente suprimido. A temperatura de Néel decresce quando  $H \rightarrow H_1$  (ver Figura (15)). As diferenças entre os modelos 2S e 4S persistem em  $H \approx 0$ , mas o aumento de  $\Gamma$  leva  $(T_N)_{2S}$  e  $(T_N)_{4S}$  em direção a zero. Como consequência, a diferença  $(T_N)_{2S} - (T_N)_{4S}$  diminui.

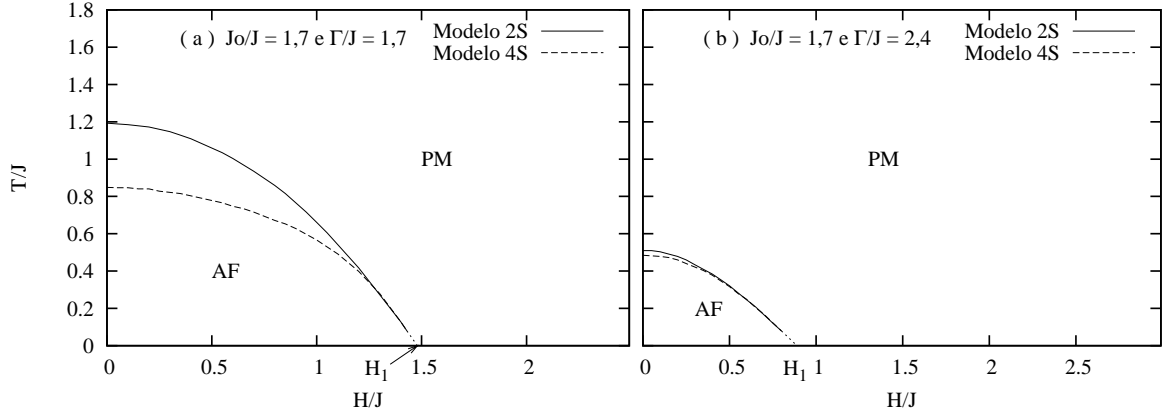


Figura 15: Diagramas de fase da  $T/J$  em função de  $H/J$  para os modelos 2S e 4S quando  $\eta = 0,59$  ( $J_0/J = 1,7$ ) e dois valores de  $\Gamma$ : (a)  $\Gamma/J = 1,7$  e (b)  $\Gamma/J = 2,4$ . As convenções dos tipos de linhas são idênticas aos da Figura (14).

Finalmente, apresenta-se a susceptibilidade magnética que permite confirmar a posição da temperatura de Néel e detalhar as diferenças entre os modelos 2S e 4S em temperaturas próximas de  $T_N$ . A susceptibilidade magnética  $\chi$  é obtida derivando as equações ponto de sela (4.28), (4.29) e (4.30) em relação a  $H$ . Essas equações determinam um sistema de seis equações independentes, que, no limite de  $H \rightarrow 0$ , reduz-se a um sistema de três equações independentes com as seguintes relações:  $M_a(H = 0) = -M_b(H = 0)$ ,  $q_a(H = 0) = q_b(H = 0)$  e  $r_a(H = 0) = r_b(H = 0)$ . Nesse caso, o sistema linear resultante de  $\partial M_p/\partial H$ ,  $\partial q_p/\partial H$  e  $\partial r_p/\partial H$  também é simplificado, tal que:  $\chi = \partial M_a/\partial H = \partial M_b/\partial H$ ,  $\partial q_a/\partial H = -\partial q_b/\partial H$  e  $\partial r_a/\partial H = -\partial r_b/\partial H$ . Logo,

$$\chi = \frac{\Pi}{T + J_0\Pi} \quad (5.2)$$

sendo  $\Pi$  definido na Equação (B.1) do Apêndice B.

Para temperaturas elevadas, na fase PM, a susceptibilidade possui a seguinte expressão:  $\chi = r/(T + J_0r)$ , em que  $r = r_p(H = 0)$ . Quando a temperatura decresce,  $\chi$  exibe uma mudança brusca na sua inclinação em  $T_N$ . Mais abaixo, ocorre, nesse mesmo  $\chi$ , um pico na temperatura  $T_g$  abaixo de  $T_f$  em que, novamente,  $M_a = M_b = 0$  (solução não estável com SR). Porém, na solução com SR,  $\chi$  não mostra anomalias em  $T_f$ , como na Figura (16). Para valores intermediários de  $J_0$ , a susceptibilidade no interior da fase AF e próximo de  $T_N$  não decresce com a temperatura (ver o detalhe inserido na Figura (16-a)), mas  $\chi$  exibe um pequeno aumento até atingir um valor máximo e, então, começa decrescer quando  $T$  diminui. Isso ocorre devido ao grande número de acoplamentos frustrados (Korenblit e Shender (1985)). Contudo, para um acoplamento médio AF de intensidade alta, por exemplo,  $J_0/J = 2,5$ ,  $\chi$  possui um máximo em  $T_N$  somente para o modelo 2S,

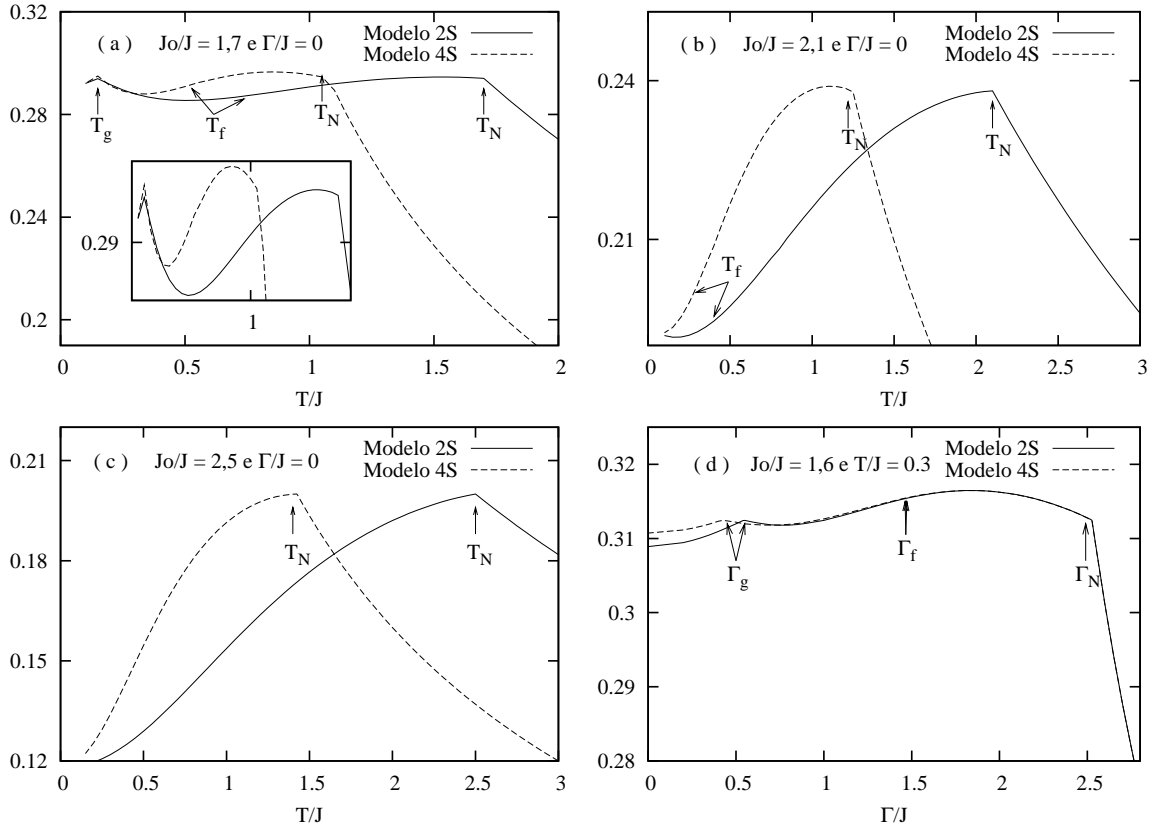


Figura 16: Os painéis (a), (b) e (c) são gráficos de  $\chi$  versus  $T/J$  para  $\Gamma = H = 0$  e vários valores de  $J_0$  ( $J_0/J = 1,7; 2,1; 2,5$ ). O painel (d) mostra  $\chi$  em função de  $\Gamma/J$  para  $H = 0$ ,  $T/J = 0,3$  e  $J_0/J = 1,6$ . O detalhe inserido no painel (a) representa um aumento na escala do eixo  $y$ . As convenções para os tipos de linhas são as mesmas da Figura (14).

enquanto que, para o modelo 4S,  $\chi$  ainda aumenta próximo a  $T_N$  no interior da fase AF. Portanto, a presença dos estados não magnéticos do modelo 4S torna seus acoplamentos frustrados menos sensíveis do que os do modelo 2S para valores intermediários de  $J_0$ . A Figura (16-d) mostra  $\chi$  em função de  $\Gamma$  para  $T/J = 0,3$ ,  $H = 0$  e  $\eta = 0.625$ . Novamente, os pontos críticos são marcados por descontinuidades em  $\chi$ , quando o campo transversal varia. Essas descontinuidades possuem as mesmas formas descritas acima.

### 5.1.2 Resultados com quebra da simetria de réplicas

Agora, apresentam-se alguns resultados com um passo de quebra de simetria de réplicas (1P-QSR) para o modelo de duas sub-redes (4.1). Primeiro, mostra-se o comportamento dos parâmetros de ordem obtidos através do método de Parisi com  $m = m_a = m_b$  (ver seção 4.1.2.1). Assim, estuda-se a fase mista na região com  $H \geq 0$ ,  $\Gamma = 0$  e  $\Gamma > 0$ . Após, exibe-se um comparativo entre os métodos de QSR de Parisi ( $m_a = m_b$ ) e o modulado  $m_a \neq m_b$  (ver Seção 4.1.2.2).



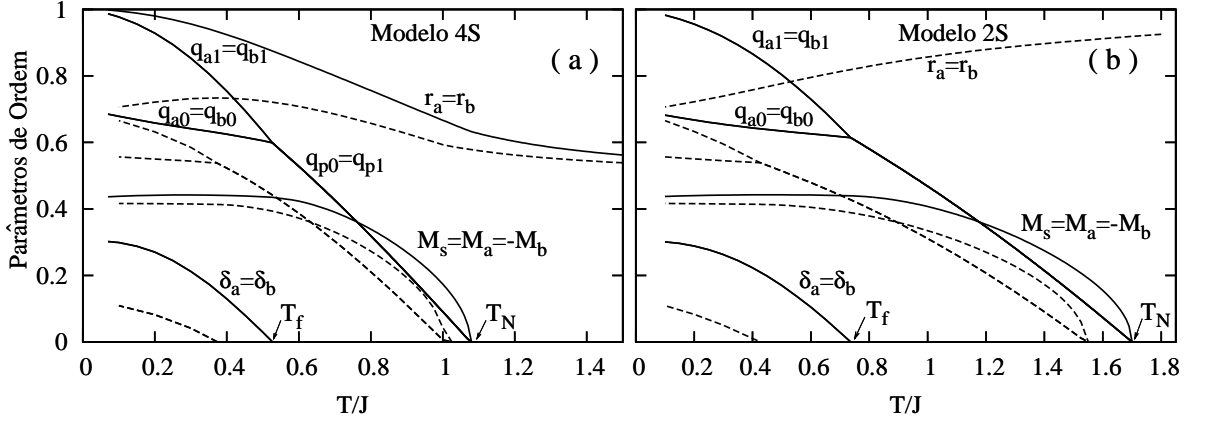


Figura 17: Parâmetros de ordem versus  $T/J$  para  $H = 0$ ,  $\eta = 0,59$  ( $J_0/J = 1,7$ ),  $\Gamma = 0$  (linhas cheias) e  $\Gamma/J = 1$  (linhas tracejadas). O painel (a) é para o modelo 4S e (b) para o modelo 2S.

A Figura (17) mostra os parâmetros de ordem com 1P-QSR ( $m = m_a = m_b$ ) em função da temperatura quando  $H = 0$ ,  $\eta = 0,59$  e dois valores de  $\Gamma$ :  $\Gamma/J = 0$  e 1. Para temperaturas elevadas, o conjunto de parâmetros de ordem caracteriza uma fase PM ( $q_p = 0$ ,  $M_p = 0$ ). Quando a temperatura decresce, a partir da temperatura de Néel  $T_N$ , as duas sub-redes exibem magnetizações espontâneas de sinais opostos, as quais definem uma magnetização “staggered”  $M_s \equiv (M_a - M_b)/2$ . Diminuindo ainda mais a temperatura, ocorre a quebra da simetria de réplicas em  $T_f$ , que é identificada pelo parâmetro de ordem  $\delta_p \equiv q_{p1} - q_{p0}$ . Obviamente,  $\delta_p$  deixa de ser zero exatamente na linha  $\lambda_{AT} = 0$ . Nesse caso, tem-se  $M_s > 0$  e  $\delta_p > 0$  ( $\lambda_{AT} < 0$ ), ou seja, uma fase mista em que a QSR acontece com magnetização  $M_s > 0$ . Nessa fase mista, a magnetização das duas sub-redes é fracamente dependente da temperatura visto que ela é acompanhada da QSR (“congelamento” de alguns spins). Assim, diferente do previsto pela solução com SR, a fase mista persiste para todo  $T < T_f$  (ver Figura (17)). Portanto, a linha que separa a fase mista da fase VS pode estar posicionada incorretamente nos diagramas de fase exibidos na seção 5.1 (resultados com SR). Porém, isso não invalida as conclusões da seção anterior, pois elas foram obtidas principalmente no estudo da região em que a SR produz soluções termodinamicamente estáveis ( $T \geq T_f$ ).

Os resultados dos modelos 4S e 2S são qualitativamente semelhantes (ver Figuras (17-a) e (17-b)). As principais diferenças estão nas localizações das temperaturas críticas e no comportamento de  $r_p$ , que, no modelo 2S, independe da temperatura quando  $\Gamma = 0$  ( $r_p(\Gamma = 0) = 1$ ). A presença de  $\Gamma$  introduz flutuações de natureza quântica, que reduzem os valores dos parâmetros de ordem, bem como as temperaturas críticas (ver linhas tracejadas da Figura (17)). Entretanto, assim como no problema de uma única

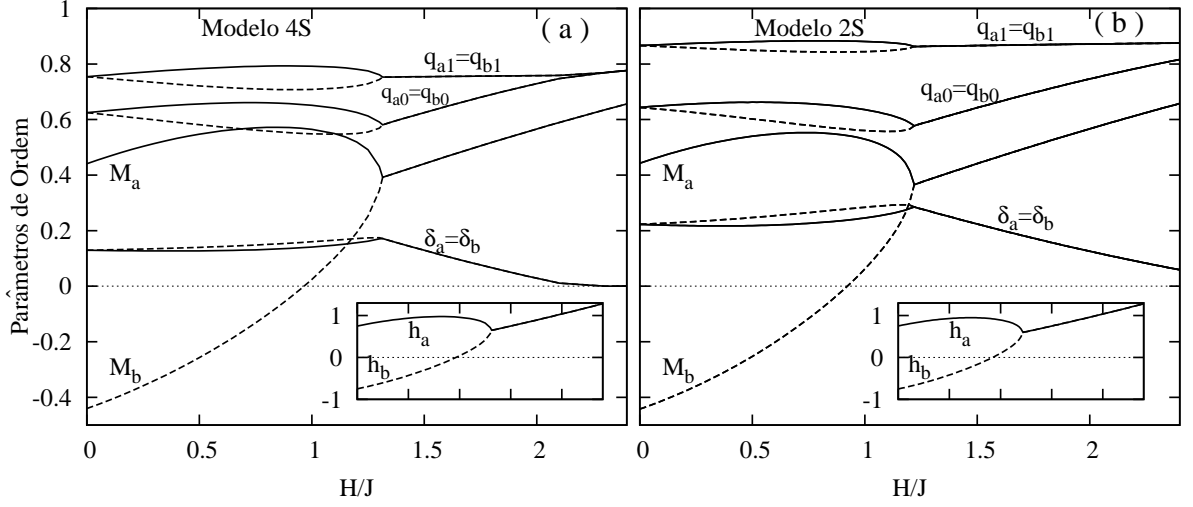


Figura 18: Parâmetros de ordem versus  $H/J$  para  $T/J = 0,4$ ,  $\eta = 0,59$  ( $J_0/J = 1,7$ ) e  $\Gamma = 0$ . As linhas cheias correspondem aos resultados da sub-rede  $a$  e as linhas tracejadas da sub-rede  $b$ . O painel (a) é para o modelo 4S e (b) para o modelo 2S. Os gráficos inseridos nos painéis (a) e (b) mostram o comportamento do campo interno médio  $\bar{h}_p = H - J_0 M_p'$  em função de  $H/J$ .

rede,  $\Gamma$  não é capaz de restaurar a simetria de réplicas quando  $T \rightarrow 0$ .

Na Figura (18), podem ser observados os efeitos causados pelo campo  $H$  nos parâmetros de ordem  $M_p$ ,  $q_{p0}$ ,  $q_{p1}$  e  $\delta_p$  na região  $T < T_f$ . Para  $H = 0$ , as sub-redes mostram resultados simétricos (ver também a Figura (17)). Aumentando  $H$ , ocorre uma quebra da simetria entre as sub-redes. Contudo, para valores de  $H$  suficientemente grandes, as sub-redes tornam-se simétricas novamente, sendo que a QSR acontece com  $M_s = 0$ , caracterizando a fase VS. Finalmente, a solução PM ( $\delta_p = 0$  e  $M_s = 0$ ) é encontrada para valores de  $H$  mais elevados. Como exposto acima, apesar da aproximação  $m = m_a = m_b$ , o método de Parisi ainda admite resultados assimétricos aos demais parâmetros de ordem ( $q_{p0}$ ,  $q_{p1}$ ,  $r_p$  e  $M_p$ ) de sub-redes diferentes quando  $H > 0$ .

Na Figura (18), a magnetização  $M_a$  tem um comportamento não monotônico com  $H$ . Inicialmente,  $M_a$  cresce, depois decresce e, finalmente, na região simétrica ( $M_a = M_b$ ),  $M_a$  cresce com  $H$ . Por outro lado, a magnetização  $M_b$  é negativa em  $H = 0$  e aumenta monotonicamente com  $H$ , assumindo valores positivos quando  $H$  cresce. Essa dependência das magnetizações  $M_a$  e  $M_b$  em relação a  $H$  se reflete no campo interno médio  $\bar{h}_p$  ( $\equiv H - J_0 M_p'$ ), que atua nos spins da sub-rede  $p$  (ver gráficos inseridos nas Figuras (18-a) e (18-b)). Nesse caso, existe um intervalo de  $H$  no qual  $\bar{h}_a$  decresce com  $H$ , da mesma forma que o valor absoluto  $|\bar{h}_b|$  pode ser menor do que o encontrado em  $H = 0$ . Como conseqüência, o grau de quebra de simetria de réplicas, medido pelos parâmetros  $\delta_a$  e  $\delta_b$ , pode aumentar com  $H$ . Nas Figuras (18-a) e (18-b)), pode-se ver claramente que

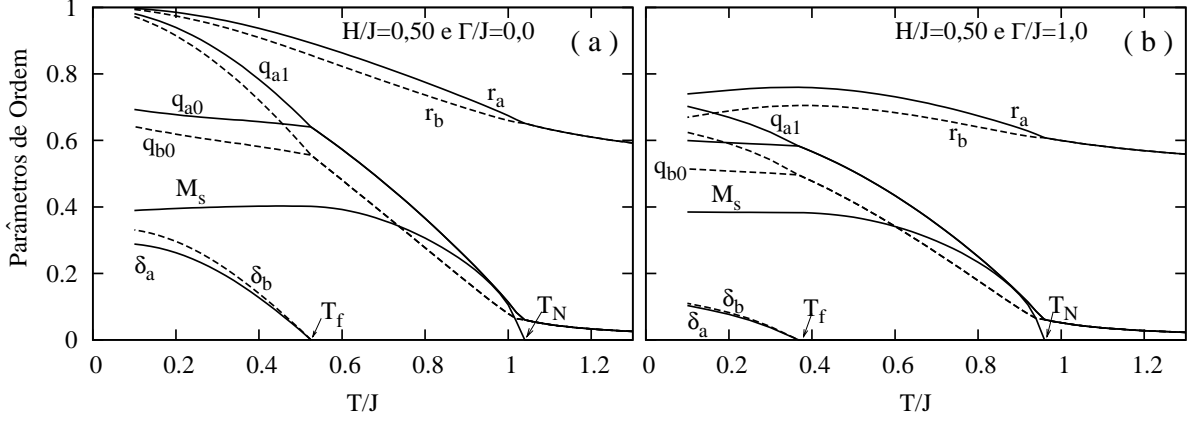


Figura 19: Parâmetros de ordem versus  $T/J$  para  $H/J = 0,5$ ,  $\eta = 0,59$  ( $J_0/J = 1,7$ ) e dois valores de  $\Gamma$ : (a)  $\Gamma/J = 0,0$  e (b)  $\Gamma/J = 1,0$ . As linhas cheias correspondem aos resultados da sub-rede  $a$  e as linhas tracejadas da sub-rede  $b$ .

$\delta_b > \delta_a$  na região assimétrica, pois o campo interno que atua sobre os spins da sub-rede  $a$  tem valor médio  $\bar{h}_a$  que é maior do que  $|\bar{h}_b|$ . Essa dependência do campo interno médio é uma das causas do comportamento não usual de  $T_f(H)$ , ou seja, qualitativamente, o aumento de  $T_f$  com  $H$  se deve à diminuição de  $\bar{h}_p$  em função de  $H$ .

A Figura (19) mostra a dependência dos parâmetros de ordem (1P-QSR) do modelo 4S com a temperatura na região de QSR assimétrica ( $H/J = 0,5$ ). Na Figura (19), os parâmetros de ordem das sub-redes  $a$  e  $b$  deixam de ser simétricos em  $T < T_N$ , onde  $M_s > 0$ . Em  $T = T_f$ , ocorre a QSR de modo assimétrico, isto é, com  $\delta_a \neq \delta_b$ . Novamente, para  $T < T_f$ , a magnetização  $M_s$  apresenta uma fraca dependência em  $T$ . Os efeitos do campo transversal na região de QSR assimétrica podem ser observados na Figura (19-b), onde  $\Gamma/J = 1,0$ . Esse resultado sugere que  $\Gamma$  não é capaz de restaurar a SR na região assimétrica (com  $H > 0$ ). Além disso, as duas sub-redes sentem da mesma forma os efeitos causados pelas flutuações quânticas. O modelo 2S apresenta resultados qualitativamente semelhantes aos expostos na Figura (19), portanto não são mostrados.

A Figura (20) exibe a dependência da energia livre  $F$  em relação à temperatura para a solução com 1P-QSR (linhas cheias) obtida através do método de Parisi com  $m_a = m_b$  e para a solução com SR (linhas pontilhadas). A solução com 1P-QSR melhora os resultados da energia livre<sup>2</sup>  $F$  e, conseqüentemente, das outras quantidades termodinâmicas derivadas de  $F$ , como, por exemplo, a entropia  $S = -\partial F/\partial T$ . A melhora em  $F$  não ocorre somente quando  $H = 0$  (ver Figura 20-a), mas também na região assimétrica (ver Figura 20-b), em que a aproximação  $m_a = m_b$  foi imposta. Portanto, o método de Parisi com  $m_a = m_b$  pode ser utilizado para melhorar os resultados do modelo (4.1) quando  $H > 0$ .

<sup>2</sup>A solução com 1P-QSR fornece um máximo à energia livre.

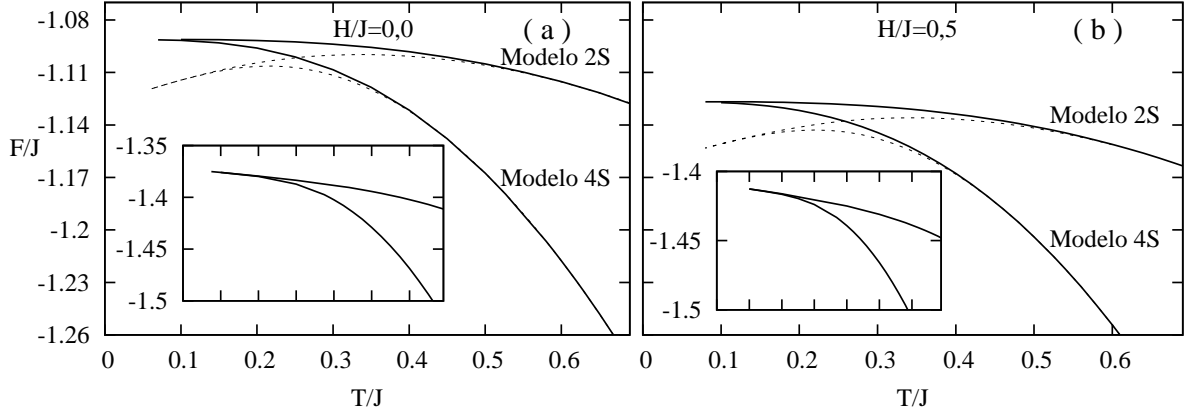


Figura 20: Energia livre versus  $T/J$  para  $\eta = 0, 59$  ( $J_0/J = 1, 7$ ),  $\Gamma = 0$  e dois valores de  $H/J$ : (a)  $H/J = 0$  e (b)  $H/J = 0,5$ . As linhas cheias correspondem aos resultados com 1P-QSR, enquanto as linhas tracejadas são para soluções com SR. Os gráficos inseridos nos painéis (a) e (b) mostram o comportamento da energia livre quando  $\Gamma/J = 1,0$ .

A Figura (21) mostra um comparativo entre as energias livres obtidas usando as seguintes soluções: SR; 1P-QSR com o método modulado; 1P-QSR com o método de Parisi ( $m_a = m_b$ ). Comparativamente, a solução com SR apresenta energia livre mais baixa em relação às outras duas aproximações. Além disso, como se verifica na Figura (21-a), a entropia ( $-\partial F/\partial T$ ) dessa solução é negativa para temperaturas pequenas. Por outro lado, o método modulado apresenta resultados melhores em relação a SR. Contudo, esses não superam os da energia livre obtida através da solução de Parisi com  $m_a = m_b$ , isto é, a solução VS termodinamicamente estável é dada pelo máximo da energia livre no método das réplicas (Kirkpatrick e Sherrington (1978)). Portanto, no modelo estudado neste capítulo, o método modulado produz resultados intermediários entre as soluções com SR e QSR com  $m_a = m_b$ .

O método modulado apresenta algumas desvantagens em relação ao método de Parisi com  $m_a = m_b$ : a primeira é em relação aos resultados para energia livre, os quais são inferiores aos obtidos pelo método de Parisi; a segunda diz respeito aos esforços computacionais, que são maiores no método modulado, pois o número de equações acopladas que compõem o sistema de equações ponto de sela (ver Equações (4.58)-(4.65)) é superior ao do método de Parisi (ver Equações (4.43)-(4.47)).

### 5.1.3 Discussão dos resultados

Para  $\Gamma = 0$ , os resultados do modelo KS com spins clássicos são totalmente reproduzidos no modelo 2S que representa um estudo no espaço de spins  $\pm 1/2$ . Nesse caso, a correlação spin-spin de réplicas idênticas  $r_p$  independe da temperatura e está restrita a

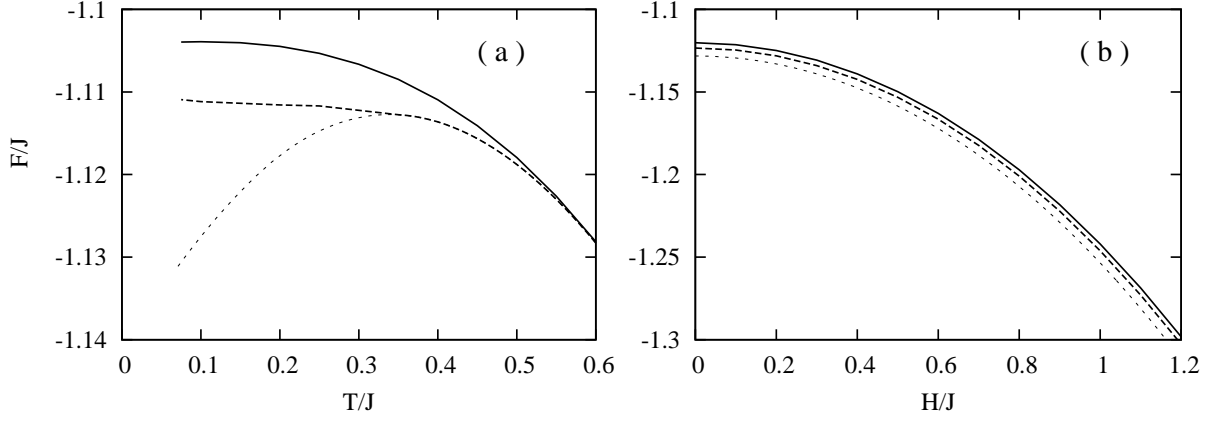


Figura 21: Energia livre em função de  $T/J$  com  $H/J = 0, 3$  no painel (a) e de  $H/J$  com  $T/J = 0, 1$  no painel (b). Estes resultados são para o modelo 2S com  $\eta = 0,59$  e  $\Gamma = 0$ . Eles mostram as energias livres obtidas nas aproximações de SR (linhas pontilhadas), 1P-QSR modulada (linhas tracejadas) e 1P-QSR usando o esquema de Parisi com  $m_a = m_b$  (linhas cheias).

$r_p = 1$ . Essa é uma diferença importante em relação ao modelo 4S, no qual  $r_p$  depende da temperatura. Portanto, o campo interno  $h_p$  (ver Equação (4.24)) comporta-se de modo ligeiramente distinto nos dois modelos, sendo que, no modelo 4S, deve-se considerar um acoplamento entre os elementos da diagonal da matriz das réplicas com os elementos não diagonais. Essa diferença pode ser facilmente verificada no diagrama de fase da temperatura versus  $J_0/J$  representados na Figura (10) com  $H = 0$ . O início da fase AF (em  $T_N$ ) e a região de quebra de ergodicidade complexa, marcada pela linha de Almeida-Thouless, aparecem em temperaturas mais baixas no modelo 4S quando comparado com o modelo 2S. Isso é consequência direta da distinção entre os campos internos aplicados em cada modelo. Na susceptibilidade magnética  $\chi$ , essas diferenças podem ser vistas mais detalhadamente (ver Figuras (16-a)- (16-c)).

Quando a componente  $\Gamma$  do campo magnético é aplicada com  $H = 0$  (ver Figuras (11)), ocorre uma importante mudança no comportamento crítico de ambos os modelos. Para um grau de frustração  $\eta = (J_0/J)^{-1} > 1/\sqrt{2}$  ( $0 < J_0/J < \sqrt{2}$ ), o problema reduz-se ao problema de uma única rede estudado na referência Theumann et al. (2002). Para  $\Gamma$  pequeno, os modelos 2S e 4S possuem temperaturas de transição entre as fases PM e VS, que diferem uma da outra. Essas temperaturas decrescem e convergem a um mesmo valor quando  $\Gamma$  aumenta, dando origem a um PCQ comum aos dois modelos em  $\Gamma_c$ . Para  $\eta < 1/\sqrt{2}$ , quando a temperatura decresce com  $\Gamma$  pequeno, ocorre a seguinte seqüência de transições de fases: PM/AF em  $T_N$ , com  $(T_N)_{2S} > (T_N)_{4S}$ ; AF/(VS+AF) em  $T_f$  (VS+AF representa a fase mista), com  $(T_f)_{2S} > (T_f)_{4S}$ . Na solução com simetria de réplicas, ainda pode haver uma transição (VS+AF)/VS em  $T_g$ , que desaparece quando

se quebra a simetria de réplicas em um passo. Aumentando  $\Gamma$ , as temperaturas de Néel dos dois modelos decrescem, convergindo para a mesma linha de transição. Esse efeito também é observado para  $T_f$ . Um PCQ para a transição PM/AF é encontrado em  $\Gamma_N/J = J_0/J + 2J/J_0$ .

Outro ponto importante surge quando o campo magnético paralelo está presente (com  $\Gamma = 0$ ). Conseqüentemente, a simetria entre as sub-redes é quebrada, que é fonte de efeitos não usuais, pois o campo interno que atua na sub-rede  $p$  ( $= a, b$ ) depende dos parâmetros de ordem da outra sub-rede  $p'$  ( $= b, a$ ). Em particular, para o modelo 2S, os resultados do modelo KS são reproduzidos (ver Figura 12). As temperaturas de Néel de ambos os modelos (as quais são diferentes) decrescem rapidamente com aumento de  $H$ . Por outro lado, a frustração pode ser favorecida em um particular intervalo de  $H$ , em que a linha  $\lambda_{AT} = 0$  cresce com  $H$  (ver Figuras (12) e (13)). Isso ocorre devido ao fato de a magnetização de uma particular sub-rede, por exemplo,  $p'$  ( $M_p > M'_p$ ), contribuir para a diminuição do valor absoluto do campo interno médio  $\bar{h}_p$  ( $= H - J_0 M'_p$ ), que atua sobre os sítios da sub-rede  $p$ . Logo, nesse intervalo de  $H$  onde  $\bar{h}_p$  decresce com  $H$ ,  $T_f$  pode crescer. Esse efeito torna-se mais evidente quando  $\eta$  diminui ( $J_0/J$  aumenta), visto que a contribuição de  $J_0 M'_p$  em  $\bar{h}_p$  é aumentada, como mostram as Figuras (12) e (13). Em virtude da presença dos estados não magnéticos, o modelo 4S possui respostas potencialmente mais fracas às interações magnéticas. Os resultados mostram que  $T_f$  pode aumentar com  $H$ , porém em uma taxa mais lenta do que no modelo 2S para o mesmo intervalo de  $H$ . Entretanto, para temperaturas mais baixas, a contribuição dos estados não magnéticos no modelo 4S torna-se menos significativa. Assim, as linhas críticas dos dois modelos exibem comportamentos muito similares.

Quando os campos  $\Gamma$  e  $H$  são simultaneamente ligados, o campo interno efetivo aplicado em uma particular sub-rede  $p$  torna-se  $\Delta_p = \sqrt{h_p^2 + \Gamma^2}$ . Portanto, os efeitos causados pela presença de  $\Gamma$  e  $H$  começam a competir. Por exemplo,  $\Gamma$  e  $H$  aparecem explicitamente e implicitamente através dos parâmetros de ordem no campo interno  $\Delta_p$ . Como conseqüência, existe um complexo balanço entre os efeitos discutidos nos parágrafos anteriores que dependem da relação  $H/\Gamma$ . Particularmente, para  $H$  pequeno, a contribuição de  $\Gamma$  é dominante e a frustração não é favorecida. À medida que  $H$  aumenta, aparece uma região nos diagramas de fase temperatura versus  $H$ , em que a frustração torna-se favorecida (ver Figura (14)). Portanto, a componente transversa do campo magnético produz o mesmo efeito em cada uma das sub-redes.  $\Gamma$  suprime as ordens magnéticas e a frustração. Já na região onde a estrutura de duas sub-redes é caracterizada, a componente paralela do campo magnético atua de maneira assimétrica em cada uma das sub-redes.

Nesse sentido,  $H$  é sempre contrário à ordem AF, porém pode favorecer a frustração num certo intervalo.

## 5.2 Resultados para o modelo KS generalizado em campo transverso

Nesta seção, são apresentados resultados numéricos para as quantidades termodinâmicas obtidas a partir do modelo KSG quântico (Seção 4.2). Os resultados mostram tipos diferentes de soluções, os quais dependem dos valores dos parâmetros contidos no modelo representado pela Equação (4.68). Por exemplo, de modo semelhante ao modelo KS quântico (4.1), as soluções paramagnética (PM:  $\delta_p \equiv q_{p1} - q_{p0} = 0$ ,  $M_s \equiv (M_a - M_b)/2 = 0$ ), vidro de spin (VS:  $\delta_p > 0$ ,  $M_s = 0$ ) e antiferromagnética (AF:  $\delta_p = 0$ ,  $M_s > 0$ ) podem ser encontradas. Uma fase mista (VS+AF), que representa a coexistência entre as fases VS e AF, também pode ser obtida quando há quebra da simetria de réplicas ( $\delta_p > 0$ ) com  $M_s > 0$ . Particularmente, a QSR está relacionada à quebra de ergodicidade não trivial, em que o espaço de fases pode ser descrito por uma estrutura de muitos vales (estados) separados por barreiras de energia, caracterizando um comportamento vidro de spin (ver seção 2.2). Nos modelos de duas sub-redes analisados neste trabalho, a QSR pode ocorrer com  $M_s = 0$  (corresponde à fase VS pura) ou com  $M_s > 0$ . A última situação (QSR com  $M_s > 0$ ) caracteriza uma fase reentrante, denominada de fase mista. Nesse caso, a QSR está relacionada ao comportamento vidro de spin e a ordem AF está associada à presença de magnetização espontânea nas duas sub-redes.

Primeiro, são analisados os resultados para  $H = 0$ . Nesse caso, o comportamento dos parâmetros de ordem em função da temperatura  $T$  está exibido na Figura (22) para o modelo 4S<sup>3</sup> e um dado grau de frustração  $\eta \equiv \sqrt{V^2 + J^2}/(V_0 + J_0)$ . Nesta seção, as quantidades  $T$ ,  $\Gamma$ ,  $H$ ,  $V_0$  e  $J_0$  são em unidades de  $\sqrt{V^2 + J^2}$ . Para propósitos numéricos, assume-se  $\sqrt{V^2 + J^2} = 1$  e  $\eta = 1/1,9$ . Quando  $T$  diminui, o parâmetro de ordem  $M_s$  surge continuamente na temperatura de Néel  $T_N$ . A QSR ocorre em  $T_f$ , na qual  $\delta_p$  torna-se maior que zero na presença da magnetização “staggered” finita, caracterizando a fase mista. A magnetização de cada sub-rede torna-se fracamente dependente da temperatura para  $T < T_f$ . Quando  $H = 0$ , as duas sub-redes apresentam resultados simétricos para os parâmetros de ordem, que são idênticos para qualquer conjunto de  $V_0$ ,  $J_0$ ,  $V$  e  $J$  que satisfaz o mesmo valor de  $\eta$ . Em particular, pode-se adotar  $V = V_0 = 0$  para reproduzir os resultados da seção 5.1.2 com  $H = 0$ .

---

<sup>3</sup>Os resultados do modelo 2S são qualitativamente semelhantes (ver seção 5.1). Portanto, nesta seção, são analisados somente os resultados do modelo 4S.

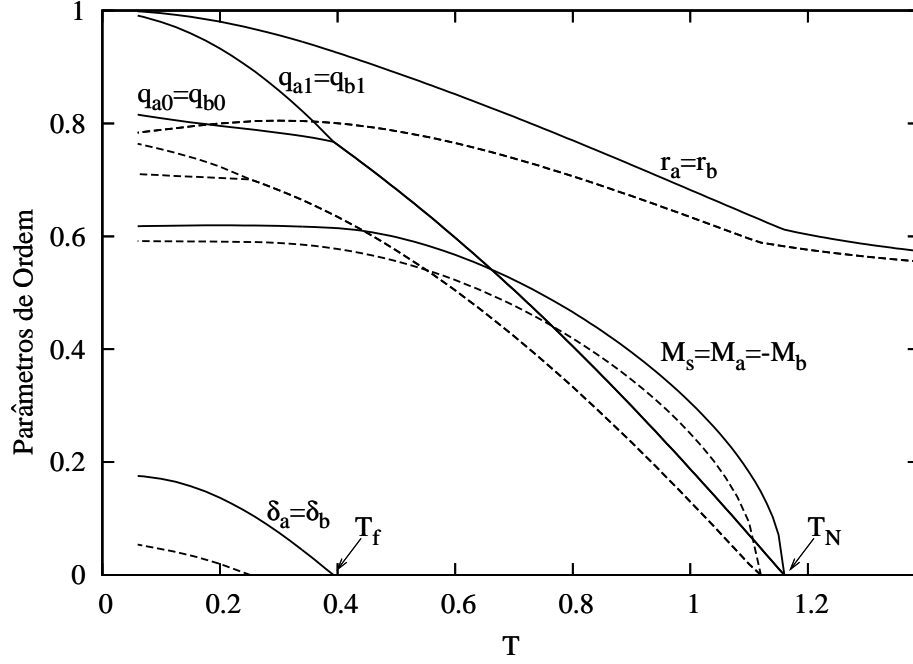


Figura 22: Parâmetros de ordem versus  $T$  para  $H = 0$ ,  $\eta = 0,53$  e dois valores de  $\Gamma$ :  $\Gamma = 0$  (linhas cheias) e  $\Gamma = 0.8$  (linhas tracejadas).

O campo transversal diminui os valores dos parâmetros de ordem bem como as temperaturas críticas (ver linhas pontilhadas da Figura (22)). Seus efeitos são mais pronunciados a temperaturas baixas; entretanto, a solução com simetria de réplicas não é restaurada pelos efeitos causados pelo  $\Gamma$ .

Na Figura (23), a energia livre com 1P-QSR pode ser comparada com a obtida usando SR. A diferença entre essas duas aproximações aumenta à medida que  $T$  diminui. A entropia ( $S = -\partial F/\partial T$ ) da solução com 1P-QSR permanece positiva em toda a extensão de temperatura analisada na Figura (23).

Os resultados para  $H > 0$  dependem do conjunto de parâmetros  $V_0$ ,  $J_0$ ,  $V$  e  $J$  adotado. Entretanto, não é intenção deste trabalho fazer um estudo minucioso de todas as possíveis configurações de interações. Porém, escolhe-se um grau de frustração específico, no qual o papel de cada parâmetro é estudado. Nesse caso, a razão  $T_N(H = 0)/T_f(H = 0)$  permanece constante em todos os resultados. For exemplo, analisa-se o comportamento da solução com QSR e dos diagramas de fase quando o acoplamento médio ferromagnético  $V_0$  entre spins de sub-redes idênticas muda, ou quando a desordem das interações dentro das sub-redes aumenta. Além disso, o principal foco desta seção é estudar os efeitos das flutuações quânticas na região de quebra da simetria de réplicas assimétrica (QSR com  $M_s > 0$  e  $H > 0$ ). Para esse propósito, são levados em conta dois tipos de acoplamento entre spins: o primeiro admite interações do tipo SK entre spins de mesmas e distintas



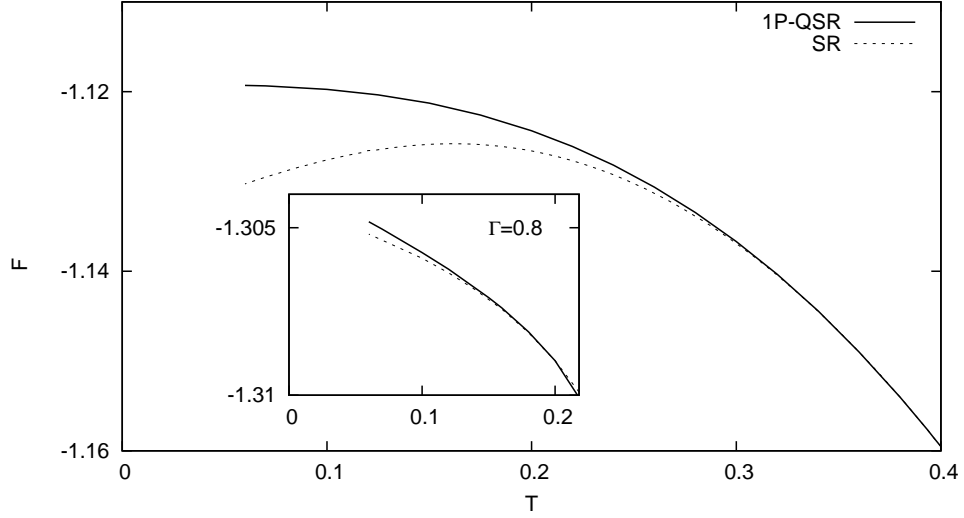


Figura 23: Energia livre versus  $T$  para  $H = 0$  e  $\Gamma = 0$ . O detalhe inserido mostra resultados com  $\Gamma = 0.8$ .

sub-redes ( $J, V \neq 0$ ); o segundo considera somente um acoplamento antiferromagnético ( $J = 0, J_0 > 0$ ) entre as sub-redes com interações do tipo SK dentro das sub-redes.

### 5.2.1 Quebra da simetria de réplicas assimétrica com $J \neq 0$ e $V \neq 0$

Nesta seção, os resultados dos parâmetros de ordem com 1P-QSR são discutidos para o primeiro tipo de acoplamento na região de QSR assimétrica. Para tal, são estudados três configurações de interações entre spins de mesmas e diferentes sub-redes, as quais satisfazem o mesmo  $\eta$ : (i)  $J = V$  e  $V_0 = J_0 = 0.95$ , (ii)  $J = V$ ,  $V_0 = 1.56$  e  $J_0 = 0.34$  e (iii)  $J = 0.24$ ,  $V = 0.97$  e  $V_0 = J_0 = 0.95$ . Nesses casos, analisam-se os principais efeitos causados pelo aumento de  $V_0/J_0$  (considerar casos (i) e (ii)) e pelo aumento de  $V/J$  (considerar casos (i) e (iii)).

A dependência em  $H$  dos parâmetros de ordem  $q_{p1}$ ,  $\delta_p$ ,  $M_p$  e  $M_s$  está exposta na Figura (24) para  $T = 0, 3$  e  $\Gamma = 0$ . Na Figura (24), a seqüência de painéis (a), (b) e (c) representa os casos (i), (ii) e (iii), respectivamente. O campo  $H$  quebra a simetria entre as sub-redes na região com  $M_s > 0$ . Porém, os resultados de ambas as sub-redes tornam-se simétricos novamente para valores altos de  $H$  ( $M_s = 0$ ). Um ponto importante na presente análise diz respeito à dependência em  $H$  de  $\delta_b$ . Por exemplo,  $\delta_b$  pode aumentar com  $H$  na fase mista ( $M_s > 0, \delta_p > 0$ ), caracterizando um aumento da QSR. Esse comportamento ímpar de  $\delta_b$  pode ser associado qualitativamente à dependência em  $H$  do campo interno médio  $\bar{h}_b (= H + V_0 M_b - J_0 M_a)$ , que atua sobre os spins da sub-rede  $b$ . Especificamente, existe uma região de  $H$  ( $H$  pequeno) em que o valor absoluto da magnetização  $|M_b|$  decresce

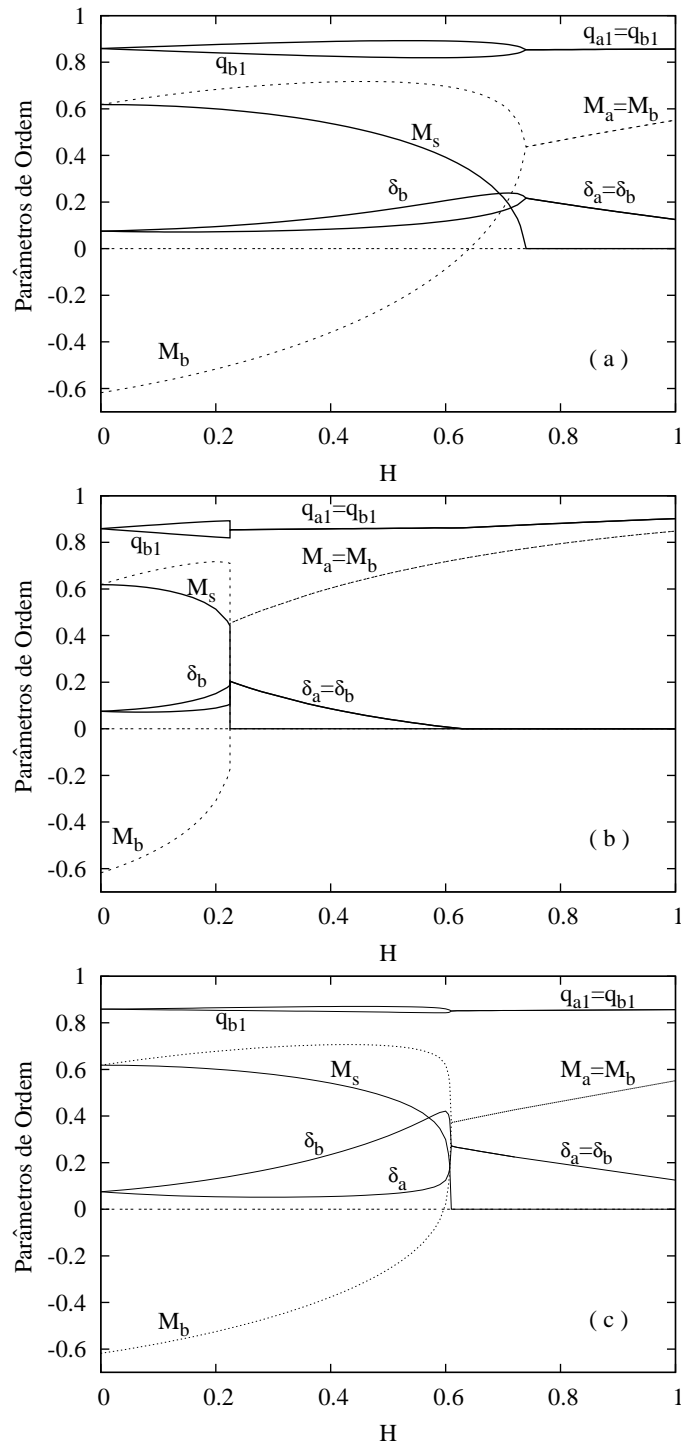


Figura 24: Parâmetros de ordem versus  $H$  para  $T = 0, 3$  e  $\Gamma = 0$ . Os resultados são para os seguintes parâmetros: (a)  $J = V$  e  $V_0 = J_0 = 0.95$ ; (b)  $J = V$ ,  $V_0 = 1.56$  e  $J_0 = 0.34$ ; (c)  $J = 0.24$ ,  $V = 0.97$  e  $V_0 = J_0 = 0.95$ .

com  $H$ , enquanto  $M_a$  tem uma fraca dependência com  $H$  se comparado a  $|M_b|$  (ver Figura (24)). Conseqüentemente,  $|\bar{h}_p|$  diminui com  $H$ , favorecendo um aumento de  $\delta_b$ . Agora,  $|\bar{h}_p|$  está relacionado diretamente a  $V_0/J_0$ . Um aumento de  $V_0$ , como no caso (ii), causa um decréscimo na região com solução  $M_s > 0$  (ver Figura (24-b)). Os parâmetros de

ordem podem mostrar uma descontinuidade quando  $H$  passa da solução  $M_s > 0$  à solução  $M_s = 0$ , em que  $\delta_b$  salta para valores mais elevados.

Por outro lado, as relações em  $\bar{h}_p$  não são diretamente afetadas pela desordem dentro das sub-redes ( $V$ ). Entretanto, comparando os casos (i) e (iii) nas Figuras (24-a) e (24-c), observa-se que  $\delta_b$  aumenta com  $V$  no interior da fase mista. Uma explicação qualitativa desse comportamento vem do campo interno aleatório  $h_p$ , que age sobre os spins da sub-rede  $p$ , e depende da variância  $\sigma_{1p}$  (ver Equação (4.78)). A variância  $\sigma_{1p}$  aumenta (diminui) para a sub-rede  $b$  ( $a$ ) na região de QSR assimétrica quando  $V/J$  cresce. Conseqüentemente,  $\delta_b$  ( $\delta_a$ ) pode aumentar (diminuir) com  $V/J$  (Figura (24-c)). Assim, o comportamento da solução com 1P-QSR também é afetado pela relação  $V/J$ . Nesse caso, a diferença entre o grau de QSR das duas sub-redes aumenta com  $V/J$ , mas a QSR ainda ocorre simultaneamente em ambas as sub-redes para  $J \neq 0$ . Na próxima seção, esse resultado pode ser contrastado com o limite  $J = 0$ .

A Figura (25) mostra os efeitos do tunelamento quântico na região de QSR assimétrica. Ela exhibe os parâmetros de ordem versus  $T$  para o caso (i) com  $H = 0, 4$  e três valores de  $\Gamma$ : (a)  $\Gamma = 0$ , (b)  $\Gamma = 0, 8$  e (c)  $\Gamma = 1$ . O campo  $\Gamma$  diminui os valores dos parâmetros  $\delta_a$  e  $\delta_b$ , mas a QSR ainda aparece em ambas as sub-redes simultaneamente. Isso significa que as flutuações quânticas agem com a mesma intensidade na solução de QSR das sub-redes  $a$  e  $b$ , as quais permanecem assimétricas. Além disso, na região de QSR assimétrica, os resultados sugerem que o tunelamento quântico não é capaz de restaurar a solução com SR de nenhuma das sub-redes. Os efeitos quânticos sobre os parâmetros de ordem dos casos (ii) e (iii) são qualitativamente os mesmos do que esses obtidos no caso (i).

### 5.2.2 Quebra da simetria de réplicas assimétrica com $J = 0$ e $V \neq 0$

Neste estágio, o estudo é restringido ao segundo tipo de acoplamento, em que as interações de troca entre as sub-redes são somente antiferromagnéticas sem desordem e as interações dentro das sub-redes permanecem desordenadas ( $J_0 \neq 0, J = 0, V \neq 0$ ). Nesse caso, a estrutura das matrizes das réplicas  $\{Q_a\}$  e  $\{Q_b\}$  são independentes uma da outra. O esquema de QSR de Parisi (1980) pode, então, ser aplicado nas duas sub-redes sem qualquer tipo de aproximação sobre  $m_p$ . Portanto, a parametrização (4.35) é usada para obter a energia livre com 1P-QSR como na Equação (4.76). Entretanto, agora,  $m_a$

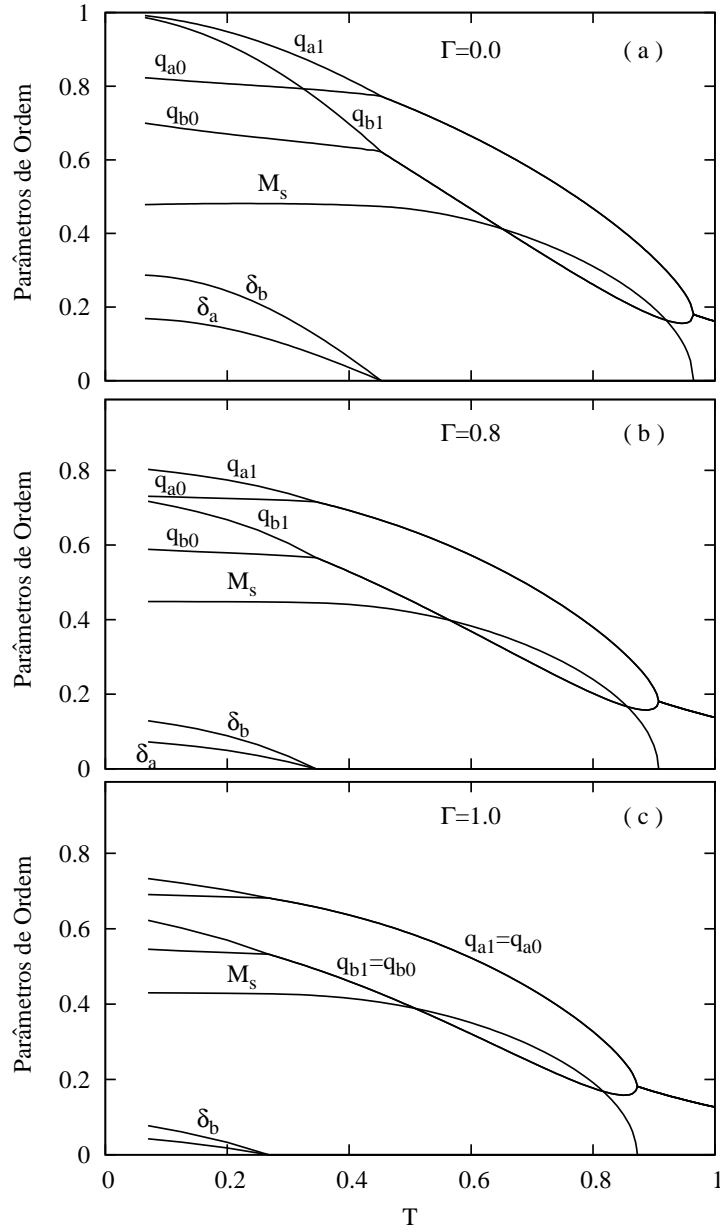


Figura 25: Parâmetros de ordem como uma função de  $T$  para  $H = 0.5$  e três valores de  $\Gamma$  ( $=0,0, 0,8$  e  $1,0$ ). As interações são dadas pelo caso:  $J = V$  e  $V_0 = J_0 = 0.95$ .

e  $m_b$  são tidos como parâmetros variacionais da energia livre dada por

$$\begin{aligned}
 2F = & -J_0 M_a M_b + \sum_{p=a,b} \left\{ \frac{V_0}{2} M_p^2 + \frac{\beta V^2}{2} [m_p (q_{p1}^2 - q_{p0}^2) \right. \\
 & \left. + r_p^2 - q_{p1}^2] - \frac{1}{\beta m_p} \int_{-\infty}^{\infty} D z_p \ln \int_{-\infty}^{\infty} D v_p \Theta_p^{m_p} \right\} - \frac{\ln 4}{\beta}
 \end{aligned} \tag{5.3}$$

com  $\Theta_p$  definido na Equação (4.77). Nessa aproximação,  $m_a \neq m_b$  na região de QSR assimétrica.

Na região simétrica ( $M_a = M_b$  ou  $M_s = 0$ ), as duas sub-redes apresentam QSR na

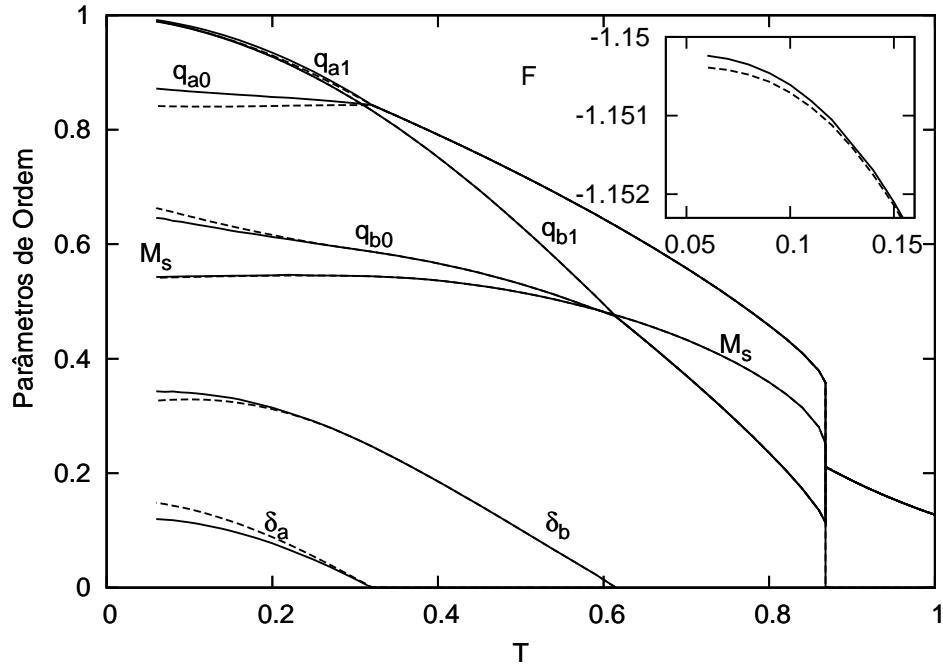


Figura 26: Parâmetros de ordem versus  $T$  para  $H = 0, 4$ ,  $\Gamma = 0, 0$ ,  $J_0 = V_0 = 0, 95$ ,  $J = 0$  e  $V = 1, 0$ . As linhas tracejadas representam resultados para a solução com 1P-QSR quando  $m = m_a = m_b$ . O detalhe mostra a energia livre versus  $T$ .

mesma temperatura crítica e com resultados idênticos àqueles obtidos através da Equação (4.26). Contudo, na região assimétrica ( $H > 0$  e  $M_s > 0$ ), a QSR ocorre primeiro na sub-rede  $b$ , enquanto a sub-rede  $a$  ainda pode apresentar solução com SR estável, como mostra a Figura (26) para a interação particular:  $J_0 = V_0 = 0, 95$ ,  $J = 0$  e  $V = 1$  (caso (iv)). Entretanto, a temperaturas mais baixas, ambas as sub-redes têm solução com QSR quando  $\Gamma = 0$ . Na Figura (26), a fase mista caracteriza-se quando a simetria de réplicas é quebrada na sub-rede  $b$ , mesmo que os efeitos do processo de congelamento dos spins tornam-se mais forte quando as duas sub-redes exibem soluções com QSR. Por exemplo,  $M_s$  tem uma dependência mais fraca em  $T$  na região onde as sub-redes  $a$  e  $b$  possuem solução com QSR (ver Figura (26)). Portanto, podem ser identificadas duas regiões de QSR: uma com um número mais baixo de spins frustrados, na qual somente o conjunto de spins pertencentes à sub-rede  $b$  mostra solução com QSR; a outra apresenta solução com QSR em ambas as sub-redes. Isso ocorre devido a dois fatores principais: 1) a diferença entre os campos internos que atuam sobre as sub-redes  $a$  e  $b$ ; 2) as duas sub-redes que podem apresentar frustração independentemente ( $J = 0$ ).

As energias livres dadas pelas Equações (4.76) e (5.3) são comparadas no detalhe inserido na Figura (26). A diferença entre elas é relativamente pequena quando comparada com a diferença entre as soluções com SR e com QSR considerando  $m = m_a = m_b$  (ver

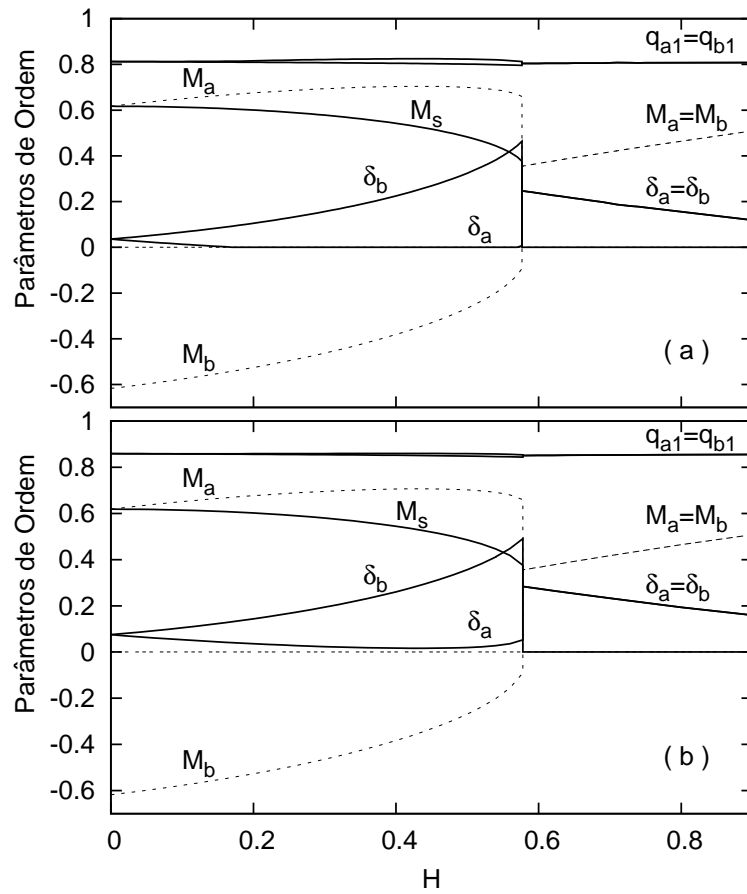


Figura 27: Parâmetros de ordem em função de  $H$  para  $\Gamma = 0.0$  e dois valores de  $T$ : (a)  $T = 0,35$  e (b)  $T = 0,3$ . A desordem é a mesma usada na Figura (26).

Figura (23)). Nesse sentido, pode-se esperar que a aproximação  $m = m_a = m_b$  produza bons resultados com 1P-QSR na região onde a QSR é assimétrica e com  $J \neq 0$ .

Considerando  $\Gamma = 0$ , os parâmetros de ordem em função de  $H$  são mostrados na Figura (27) para dois valores fixos de temperatura:  $T = 0,35$  e  $T = 0,3$ . A QSR acontece nas duas sub-redes para  $H = 0$ . Quando  $H$  aumenta, na região de QSR assimétrica,  $\delta_b$  cresce e  $\delta_a$  decresce anulando-se em um determinado intervalo de  $H$ , onde somente a sub-rede  $b$  apresenta solução com QSR. Sendo assim, o campo  $H$  pode diminuir a temperatura na qual a sub-rede  $a$  exibe QSR. Entretanto, os efeitos causados por  $H$  não são suficientemente fortes a ponto de produzir uma solução estável com SR para uma particular sub-rede a temperaturas mais baixas, como mostra a Figura (27-b) para  $T = 0,3$ , onde  $\delta_a$  e  $\delta_b$  são sempre maiores que zero.

Os efeitos do campo  $\Gamma$  sobre os parâmetros de ordem são mostrados na Figura (28), que considera  $H = 0,4$ ,  $\Gamma = 0,8$  e  $\Gamma = 1$ . A região com QSR da sub-rede  $a$  decresce mais rapidamente do que a da sub-rede  $b$  quando  $\Gamma$  é aplicado na região com QSR assimétrica. Portanto, para  $\Gamma$  suficientemente alto ( $\Gamma = 1$ ), a solução com QSR aparece

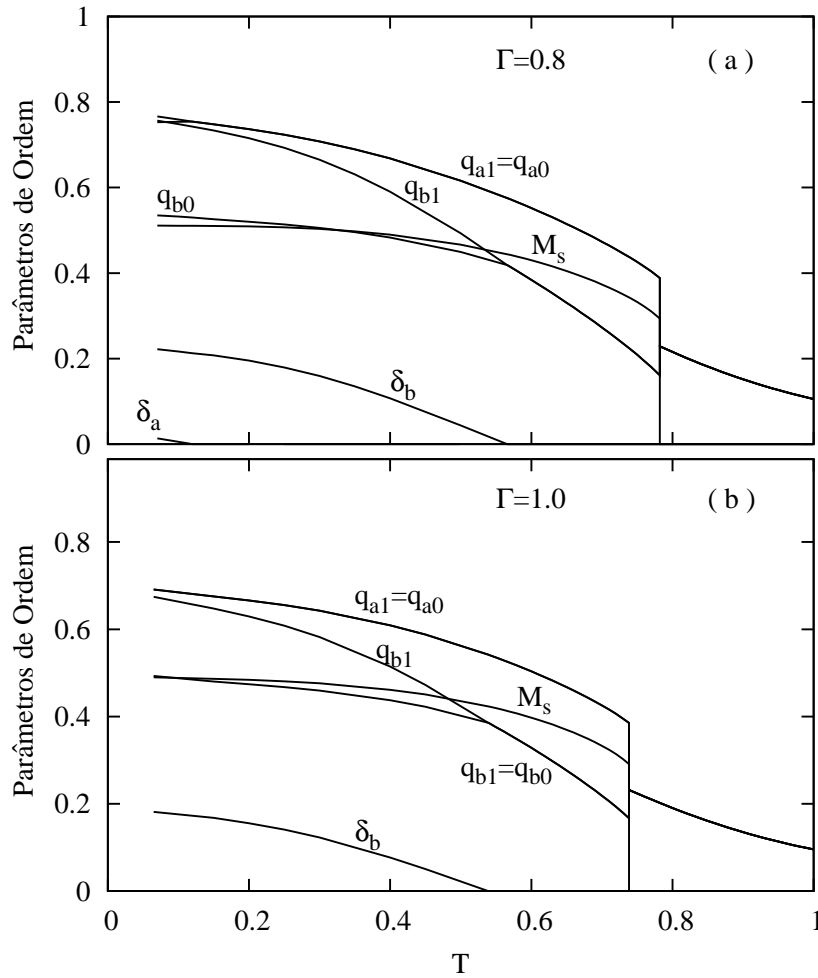


Figura 28: Parâmetros de ordem versus  $T$  para  $H = 0, 4$ ,  $J_0 = V_0 = 0, 95$ ,  $J = 0$  e  $V = 1$  com: (a)  $\Gamma = 0, 8$  e (b)  $\Gamma = 1$ .

somente na sub-rede  $b$ , enquanto a sub-rede  $a$  exibe solução com SR em toda extensão de temperatura analisada na Figura (28-b). Embora esses resultados ( $\Gamma > 0$ ) sejam limitados pela aproximação estática, da qual se esperam resultados quantitativamente imprecisos a temperaturas muito baixas, eles poderiam produzir evidências qualitativas em relação ao comportamento da QSR pelo menos para  $T > 0$ . Assim, quando a intensidade de  $\Gamma$  aumenta, as flutuações quânticas assumem um papel relevante induzindo tunelamento entre os muitos vales meta-estáveis que caracterizam a forma (“landscape”) da energia livre na fase vidro de spin. Com isso, a importância da QSR pode diminuir, mas a solução com SR não é restaurada na sub-rede  $b$ . As flutuações quânticas decrescem a região em que as duas sub-redes apresentam solução com QSR, ao mesmo tempo em que podem aumentar a região onde somente a sub-rede  $b$  exibe QSR. Nesse caso, as flutuações quânticas podem diminuir o número de sítios frustrados na região de QSR assimétrica.

### 5.2.3 Diagramas de fase

Após um estudo detalhado da região com QSR assimétrica, são analisados os diagramas de fase  $T$  versus  $H$  para os dois tipos de acoplamentos discutidos previamente nas seções 5.2.1 e 5.2.2. Apresentam-se os principais efeitos causados pelas flutuações quânticas sobre os contornos das fases (linhas críticas) e o papel das interações desordenadas sobre os diagramas de fase.

Primeiramente, analisa-se o comportamento termodinâmico das temperaturas críticas na região de solução com SR estável ( $T > T_f$ ). Nesse caso, as expressões analíticas da energia livre (4.76) e dos respectivos parâmetros de ordem são obtidas assumindo  $q_p \equiv q_{p0} = q_{p1}$  ( $\sigma_{1p} = 0$  na Equação (4.78)) com  $m = 0$ . A transição da fase paramagnética (PM) para a ordem antiferromagnética (AF) pode ser caracterizada pelo surgimento da magnetização “staggered”  $M_s$ . Se essa transição for contínua (segunda ordem), é possível expandir o conjunto de equações ponto de sela em potências de  $M_s$ . Esse cálculo envolve longas expressões que estão contidas no Apêndice C, no qual se encontra o seguinte resultado compacto:

$$M_s = AM_s + BM_s^3 + CM_s^5 + \dots \quad (5.4)$$

com os coeficientes  $A$  e  $B$  definidos no Apêndice C. A transição de segunda ordem entre as fases PM e AF é encontrada quando a condição  $A = 1$ ,  $B < 0$  e  $C < 0$  é satisfeita. Pontos tricríticos podem ser obtidos pela condição  $A = 1$ ,  $B = 0$  e  $C < 0$ . Não foi calculado o coeficiente  $C$ , logo, não se checkou a condição  $C < 0$ .

Os gráficos das Figuras (29-a), (29-b), (29-c) e (29-d) mostram diagramas de fase para interações como nos casos (i), (ii), (iii) e (iv), respectivamente. Os diagramas de fase exibem uma característica geral: a ordem AF é destruída pelo campo  $H$ , ao mesmo tempo em que a fase mista aumenta quando  $H$  cresce em direção a  $H_c$ . Aqui,  $H_c$  corresponde ao valor do campo magnético paralelo, no qual  $T_f$  encontra-se com  $T_N$ . Para  $H > H_c$ , o sistema comporta-se como no modelo de uma única rede, em que  $T_f$  decresce monotonicamente com  $H$  (ver Kirkpatrick e Sherrington (1978)). Particularmente, as transições de fase são de segunda ordem no caso (i) e o diagrama de fase da Figura (29-a) é similar àqueles obtidos na seção (5.1) (referência Zimmer e Magalhães (2006b)) para uma formulação fermiônica do modelo KS.

Interações desordenadas entre spins pertencentes à mesma sub-rede têm um papel relevante na região de QSR assimétrica. Agora, a influência dessas interações sobre os diagramas de fase é estudada, ou melhor, analisa-se o papel de  $V_0$  e  $V$  sobre as transições de fase comparando os casos (i) e (ii) (Figuras (29-a) e (29-b)) e os casos (i), (iii) e



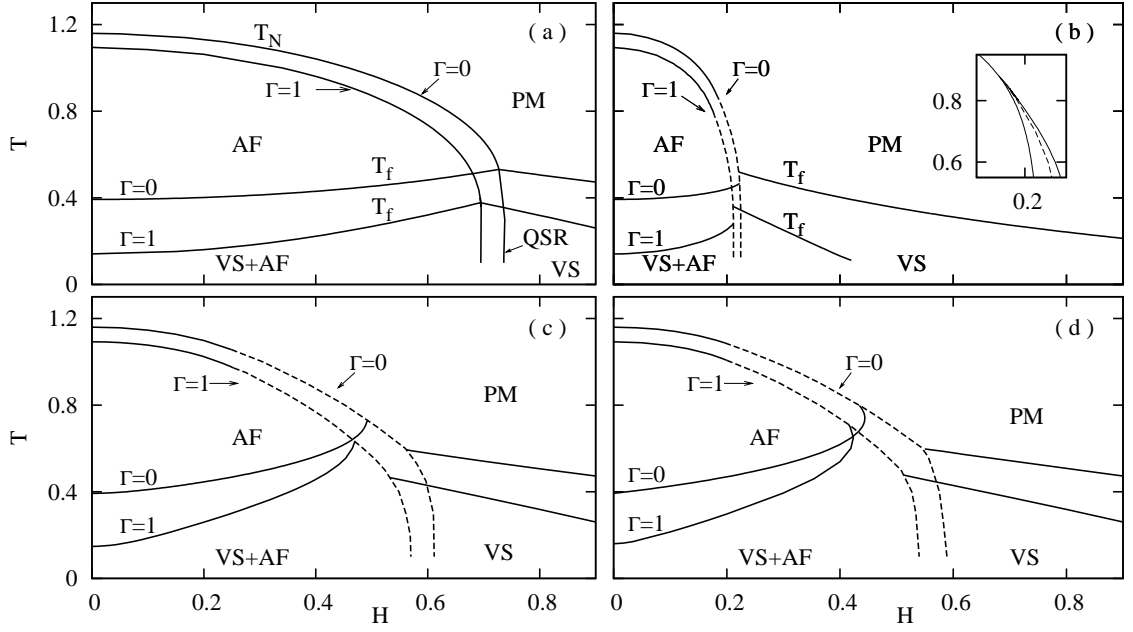


Figura 29: Diagramas de fase  $T$  versus  $H$  para  $\Gamma = 0$ ,  $\Gamma = 1$  e as seguintes interações: (a)  $J = V$  e  $V_0 = J_0 = 0.95$ , (b)  $J = V$ ,  $V_0 = 1.56$  e  $J_0 = 0.34$ , (c)  $J = 0.24$ ,  $V = 0.97$  e  $V_0 = J_0 = 0.95$ , e (d)  $J = 0$ ,  $V = 1$  e  $V_0 = J_0 = 0.95$ . As linhas cheias (tracejadas) correspondem a transições de segunda ordem (primeira ordem). O detalhe inserido no painel (b) mostra o limite da estabilidade das soluções PM e AF quando  $\Gamma = 0$ .

(iv) (Figuras (29-a), (29-c) e (29-d)), respectivamente. No caso (ii),  $V_0$  aumenta, porém  $J_0$  decresce para manter  $\eta$  ( $T_N(H = 0)/T_f(H = 0)$ ) constante. Como consequência, a região AF diminui e surge uma transição de primeira ordem (ver Figura (29-b)), em que o ponto tri-crítico é calculado pela expansão (5.4). A linha de transição de primeira ordem é localizada escolhendo a solução (entre as soluções possíveis: PM, AF, mista ou VS) que minimiza a energia livre. Na transição da solução com SR para a solução com QSR, aparece uma descontinuidade em  $H_c$ , que se manifesta por meio de um salto em  $T_f$  quando este cruza a região  $H < H_c$  para  $H > H_c$ . Assim, aumentando  $H$ , surge uma transição descontínua entre as fases AF e VS. Em particular para  $\Gamma = 0$ , o campo interno médio  $\bar{h}_p$  ( $= H + V_0 M_p - J_0 M_{p'}$ ), que atua sobre a sub-rede  $p$ , é diretamente afetado pela relação  $V_0/J_0$ . O campo  $\bar{h}_p$ , no qual a solução PM torna-se estável, é alcançado com valores menores de  $H$  quando  $V_0/J_0$  aumenta. Além disso, na transição de primeira ordem, a solução PM pode ser obtida com valores de  $H$  que ainda permitem uma solução AF energeticamente favorável (ver detalhe da Figura (29-b)). Na aproximação com 1P-QSR, existem evidências numéricas indicando que a transição fase mista/Vs também pode ser de primeira ordem (ver Figura (24-b)). Logo, uma transição de primeira ordem pode ocorrer aumentando a razão  $V_0/J_0$ .

A desordem dentro das sub-redes também afeta a interação AF efetiva entre as duas sub-redes, como verifica-se comparando a Figura (29-a) às Figuras (29-c) e (29-d). O aumento de  $V$ , ao mesmo tempo em que  $J$  decresce para manter  $\sqrt{V^2 + J^2}$  constante, reduz a região AF. Desse modo, um valor menor de  $H$  é capaz de destruir a ordem AF. Na região de QSR, o grau de QSR  $\delta_p$  depende da relação  $V/J$ , como mostrado nas seções anteriores. Por exemplo, desde que  $H > 0$ ,  $\delta_b$  aumenta com  $V/J$  na fase mista. Conseqüentemente, a derivada  $|\partial T_f / \partial H|$  é maior na transição AF/fase mista quando  $V$  cresce (ver Figuras (29-c) e (29-d)). O caso (iii) exhibe um diagrama de fase similar ao do caso (iv). No entanto, as propriedades da QSR desses dois casos são muito diferentes (ver seções 5.2.1 e 5.2.2). Uma transição de primeira ordem também aparece nos casos (iii) e (iv), mas, diferente da Figura (29-b), a temperatura de congelamento  $T_f$  na região assimétrica (transição AF/fase mista) é maior do que na região simétrica (transição PM/VS) para  $H$  próximo a  $H_c$ . Logo, uma transição descontínua da fase mista para a fase PM pode surgir com o aumento de  $H$  (ver Figuras (29-c) e (29-d)). Portanto, a interação média ferromagnética entre spins de mesma sub-rede pode introduzir uma transição de primeira ordem nesse problema de duas sub-redes. Por outro lado, a desordem do tipo SK dentro das sub-redes muda o comportamento de  $T_f$  que apresenta um aumento mais acentuado com  $H$  na região assimétrica quando esta desordem aumenta.

O campo interno torna-se ainda mais complexo quando  $\Gamma > 0$ . Aumentando  $\Gamma$ , as linhas críticas e os pontos tricríticos diminuem como mostra a Figura (29) para os diagramas de fase com  $\Gamma = 1$ . Os efeitos quânticos são mais pronunciados a temperaturas baixas. Em particular, o comportamento de  $T_f$  é alterado pelas flutuações quânticas. Nesse caso, a derivada  $|\partial T_f / \partial H|$  aumenta com  $\Gamma$  quando  $H$  está próximo de  $H_c$ . As regiões de transições descontínuas entre as fases AF/VS e PM/fase mista aumentam com  $\Gamma$ . Esse comportamento de  $T_f$  ocorre devido à competição entre flutuações quânticas (importantes em temperaturas baixas) e a assimetria causada pelo campo  $H$ , que depende das interações desordenadas das sub-redes.

## 6 CONSIDERAÇÕES FINAIS

Neste trabalho, estudou-se uma versão fermiônica para o problema de vidro de spin (VS) quântico representado pelo modelo de Ising em presença de um campo magnético transversal  $\Gamma$  ao acoplamento dos spins, no qual as interações de troca são de longo alcance e seguem distribuições de probabilidade gaussianas (interações do tipo SK). O modelo de VS quântico é analisado tanto na estrutura de uma única rede, quanto na estrutura de duas sub-redes. O problema de duas sub-redes é dividido em dois modelos: o primeiro é uma versão quântica do modelo introduzido por Korenblit e Shender (1985) para estudar a competição VS/antiferromagnetismo (AF), em que somente os spins pertencentes a diferentes sub-redes possuem uma interação do tipo SK (modelo KS). O segundo considera interações desordenadas do tipo SK entre spins de distintas sub-redes e entre spins de mesmas sub-redes (modelo KSG). A representação fermiônica para os operadores de spin, o formalismo das integrais de caminho com campos de Grassmann e a aproximação estática têm sido usados para tratar desses modelos de VS quântico. O método das réplicas é adotado para lidar com a desordem, no qual as aproximações com simetria de réplicas (SR) e com um passo de quebra da simetria de réplicas (1P-QSR) são analisadas.

No modelo fermiônico de VS quântico em uma rede, o esquema de quebra da simetria de réplicas (QSR) proposto por Parisi (1980) foi empregado para estudar a fase VS quântica (ver Seção 3.2.3). Os resultados com 1P-QSR sugerem que a SR não é restaurada em  $T \rightarrow 0$  quando  $\Gamma > 0$ . Além disso, esse esquema de QSR, originalmente adotado para analisar modelos clássicos de VS, pode ser usado para melhorar a descrição física da fase VS quando as flutuações quânticas tornam-se relevantes (Zimmer e Magalhães (2006a)).

Os modelos de VS quântico em duas sub-redes KS e KSG exibem uma complexa relação entre a desordem (inter e intra-sub-rede), a assimetria causada por um campo magnético paralelo ( $H$ ) e os efeitos das flutuações quânticas ( $\Gamma > 0$ ). Por exemplo, em  $H = 0$ , as duas sub-redes mostram resultados simétricos para os parâmetros de ordem com 1P-QSR, os quais são idênticos para todas as configurações de interações inter e intra-sub-rede que satisfazem o mesmo grau de frustração  $\eta$ . Entretanto, o campo  $H$  introduz uma região de QSR assimétrica, onde as sub-redes exibem diferentes resultados com 1P-QSR, que dependem das configurações das desordens inter e intra-sub-redes, isso é, o grau

de QSR da sub-rede  $b$  ( $\delta_b$ ) é maior do que  $\delta_a$ . Essa diferença e o valor de  $\delta_b$  aumentam quando a desordem intra-sub-rede ( $V$ ) aumenta. Contudo, para um caso geral, a QSR ocorre na mesma temperatura em ambas as sub-redes quando as interações inter-sub-rede são desordenadas ( $J > 0$ ). Ainda, os resultados na aproximação estática sugerem que os efeitos do tunelamento quântico ( $\Gamma > 0$ ) não restauram a SR em nenhuma das sub-redes, as quais permanecem assimétricas ( $H > 0$ ), mesmo quando  $\Gamma > 0$ . Logo,  $\Gamma$  age com a mesma intensidade nas regiões de QSR das sub-redes  $a$  e  $b$ , diminuindo as temperaturas críticas, bem como, o valor dos parâmetros de ordem com 1P-QSR.

O comportamento assimétrico da região de QSR em relação ao campo  $H$  pode ser associado ao campo interno aleatório ( $\Delta_p = \sqrt{h_p + \Gamma^2}$ ), que atua nos spins das sub-redes  $a$  e  $b$ . Em particular, para  $\Gamma = 0$ , o campo interno é dado por  $h_p (= \bar{h}_p + \sigma_{p1}v_p + \sigma_{p2})$  (ver Equação (4.78)). Nesse caso,  $h_p$  depende de um valor médio  $\bar{h}_p (= H + V_0M_p - J_0M_{p'})$  que, na região assimétrica ( $M_p \neq M_{p'}$ ), é diferente para cada sub-rede  $p$  e pode decrescer com aumento de  $H$ . Esse campo interno também é influenciado pela variância  $\sigma_{p1}(= \sqrt{2(V^2\delta_p + J^2\delta_{p'})})$ , a qual depende das configurações das desordens ( $V$  e  $J$ ) e dos graus de QSR  $\delta_p$  e  $\delta_{p'}$ . Logo, o comportamento de  $\delta_p$  e, conseqüentemente  $T_f(H)$ , pode ser explicado qualitativamente pela dependência do campo interno com  $H$ . Essa dependência torna-se ainda mais complexa quando  $\Gamma > 0$ , sugerindo um balanço complicado entre os efeitos causados por  $\Gamma$  e  $H$  (ver Seções 5.2).

Para o caso particular, que considera interações desordenadas entre spins de mesmas sub-rede e somente um acoplamento antiferromagnético entre spins de sub-redes distintas (sem desordem:  $J = 0$ ), a QSR aparece em cada sub-rede independentemente (Seção 5.2.2). Assim, na região de QSR assimétrica, a sub-rede  $b$  pode apresentar solução com QSR enquanto a sub-rede  $a$  ainda possui solução com SR. Entretanto, no estado fundamental, ambas as sub-redes apresentam solução com QSR quando  $\Gamma = 0$ . Contudo, os resultados com 1P-QSR sugerem que a frustração na fase mista é mudada pela ação do campo  $\Gamma$ . Nesse caso, as flutuações quânticas afetam com mais intensidade a região com QSR da sub-rede  $a$  do que da sub-rede  $b$  na região de QSR assimétrica. Para um valor de  $\Gamma$  suficientemente elevado, a sub-rede  $a$  pode mostrar uma solução com SR estável em qualquer temperatura finita, com a sub-rede  $b$  ainda apresentando solução com QSR.

Em particular, para o modelo KS, foram comparados resultados de dois métodos de QSR: o método de Parisi (1980) adaptado ao problema de duas sub-redes com  $m = m_a = m_b$  ( $m_p$  corresponde ao tamanho dos blocos diagonais da matriz das réplicas com 1P-QSR) e o método modulado, que é um esquema alternativo de 1P-QSR proposto por Oppermann, Sherrington e Kiselev (2004). Esse método alternativo considera a parametrização

de Parisi com  $m_a \neq m_b$ , mais uma relação entre  $m_a$  e  $m_b$  que é dada por um novo parâmetro variacional da energia livre no limite das réplicas (ver Seção 4.1.2.2). Verificou-se que o método modulado, além de apresentar um conjunto maior de equações ponto de sela, não melhora os resultados da energia livre com 1P-QSR em relação aos obtidos pelo esquema de Parisi com  $m = m_a = m_b$  para temperatura finita (Figura 21). Logo, o método modulado não foi usado no modelo KSG quântico.

Os diagramas de fase da versão fermiônica do VS quântico em duas sub-redes mostram a seguinte característica geral: uma transição da fase paramagnética (PM) à ordem anti-ferromagnética (AF) e, então, para uma região de QSR quando a temperatura decresce para  $H$  baixo. A QSR ocorre na temperatura  $T_f$  com uma magnetização “staggered” ( $M_s$ ) finita, que caracteriza uma fase mista (VS+AF). Uma transição da fase PM ao VS (solução com QSR e  $M_s = 0$ ) é observada para  $H$  alto. O campo  $H$  quebra a simetria entre as sub-redes destruindo a fase AF, mas  $H$  pode favorecer a região de QSR em um certo intervalo, onde  $T_f(H)$  aumenta com  $H$ . A interação intra-sub-rede afeta o comportamento de  $T_f(H)$ , que apresenta um aumento mais acentuado com  $H$  ( $|\partial T_f / \partial H|$ ) quando a desordem intra-sub-rede cresce. A presença de uma interação média de longo alcance ferromagnética intra-sub-rede pode introduzir uma transição de primeira ordem entre as soluções com SR e QSR quando  $H$  aumenta. Por outro lado, o campo  $\Gamma$  introduz mecanismos de “flip” nos spins, que sempre suprimem as ordens magnéticas, conduzindo suas temperaturas críticas a pontos críticos quânticos. Portanto, os campos  $\Gamma$  e  $H$  produzem efeitos opostos sobre a frustração. Porém, os efeitos de  $\Gamma$  são mais evidentes para valores baixos de  $H$ , em que a assimetria entre as sub-redes é pequena.

Com uma possível continuação deste trabalho, pretende-se utilizar esses modelos VS/AF na representação fermiônica para sistemas fortemente correlacionados, em que existe uma competição VS/AF associada com um ponto crítico quântico, como, por exemplo, nas ligas de  $Ce_2Au_{1-x}Co_xSi_3$  (Majumdar et al. (2002)). Outra continuação pode ser realizada estendendo-se o presente estudo do VS/AF quântico para uma estrutura de multi-sub-redes (de Almeida (2000)). Por outro lado, como trabalho futuro, métodos da teoria de campo médio dinâmico estendido (Tanaskovic, Dobrosavljevic e Miranda (2005)) poderiam ser combinados com a presente abordagem desta tese, permitindo a obtenção de resultados que vão além da aproximação estática.

## APÊNDICE A – ESTADOS COERENTES

Este Apêndice introduz uma noção de estados coerentes e é fundamentado na referência Negele e Orland (1988).

Estados coerentes são auto-estados dos operadores de destruição. Na obtenção dos estados coerentes fermiônicos, são importantes as propriedades de anticomutação apresentadas pelos operadores fermiônicos (ver equações (3.5), (3.6) e (3.7)). Devido a essas propriedades, é conveniente usar variáveis com as mesmas características, isto é, variáveis que anticomutam (denominadas variáveis de Grassmann<sup>1</sup>). Neste caso, os operadores de criação e destruição com geradores da álgebra de Grassmann  $\{\phi_\alpha, \phi_\alpha^*\}$  do seguinte modo:

$$c_\alpha \leftrightarrow \phi_\alpha \quad ; \quad c_\alpha^\dagger \leftrightarrow \phi_\alpha^* . \quad (\text{A.1})$$

Também se exigem relações de anticomutação entre as variáveis de Grassmann e os operadores fermiônicos, bem como as operações de conjugação

$$(\phi_\alpha c_\alpha)^\dagger = c_\alpha^\dagger \phi_\alpha^* \quad ; \quad (\phi_\alpha^* c_\alpha^\dagger)^\dagger = c_\alpha \phi_\alpha . \quad (\text{A.2})$$

Através do conhecimento das variáveis de Grassmann, é possível definir o espaço generalizado de Fock como o espaço constituído pela combinação linear de estados pertencentes ao espaço de Fock, tendo como coeficientes as variáveis de Grassmann. Portanto, considerando  $|\psi\rangle$  um vetor qualquer do espaço generalizado de Fock, este pode ser escrito como

$$|\psi\rangle = \sum_\alpha \eta_\alpha |\phi_\alpha\rangle, \quad (\text{A.3})$$

com  $\eta_\alpha$  representando variáveis de Grassmann e  $|\phi_\alpha\rangle$  vetores do espaço de Fock.

Seja o seguinte estado pertencente ao espaço generalizado de Fock:

$$|\phi\rangle = e^{-\sum_\alpha \phi_\alpha c_\alpha^\dagger} |0\rangle = \prod_\alpha (1 - \phi_\alpha c_\alpha^\dagger) |0\rangle, \quad (\text{A.4})$$

---

<sup>1</sup>A Álgebra de Grassmann trata de quantidades que possuem a propriedade de anticomutação:  $\phi_\alpha \phi_\beta + \phi_\beta \phi_\alpha = 0$ , onde  $\phi_\alpha$  e  $\phi_\beta$  representam geradores desta álgebra (ver páginas 25, 26, 27 e 28 da referência Negele e Orland (1988) para um breve revisão das propriedades da Álgebra de Grassmann).

sendo os  $\phi_\alpha$  variáveis de Grassmann. Para obter a segunda igualdade da equação acima foi utilizado o fato de que qualquer função analítica definida sobre a álgebra de Grassmann é linear. O estado  $|\phi\rangle$  representa um estado coerente se a igualdade  $c_\beta|\phi\rangle = \phi_\beta|\phi\rangle$  for confirmada. A demonstração de que a equação (A.4) define um estado coerente é feita a seguir. Considerando

$$c_\beta|\phi\rangle = c_\beta \prod_{\alpha} (1 - \phi_\alpha c_\alpha^\dagger)|0\rangle, \quad (\text{A.5})$$

e usando a relação  $\phi_\alpha c_\alpha^\dagger \phi_\beta c_\beta^\dagger = \phi_\beta c_\beta^\dagger \phi_\alpha c_\alpha^\dagger$  quando  $\alpha \neq \beta$  juntamente com as propriedades de anticomutação, pode-se reescrever  $c_\beta|\phi\rangle$  como

$$c_\beta|\phi\rangle = \prod_{\alpha \neq \beta} (1 - \phi_\alpha c_\alpha^\dagger) c_\beta (1 - \phi_\beta c_\beta^\dagger) |0\rangle. \quad (\text{A.6})$$

Os últimos termos da equação (A.6) podem ser organizados tal que

$$c_\beta (1 - \phi_\beta c_\beta^\dagger) |0\rangle = 0 + \phi_\beta c_\beta c_\beta^\dagger |0\rangle = \phi_\beta |0\rangle, \quad (\text{A.7})$$

que pode ser expresso como

$$c_\beta (1 - \phi_\beta c_\beta^\dagger) |0\rangle = \phi_\beta (1 - \phi_\beta c_\beta^\dagger) |0\rangle, \quad (\text{A.8})$$

sendo utilizada a relação  $\phi_\beta \phi_\beta = 0$ . Desse modo, o vetor definido por (A.4) representa um estado coerente, pois, substituindo a expressão (A.8) em (A.6), obtém-se

$$\begin{aligned} c_\beta|\phi\rangle &= \prod_{\alpha \neq \beta} (1 - \phi_\alpha c_\alpha^\dagger) \phi_\beta (1 - \phi_\beta c_\beta^\dagger) |0\rangle \\ c_\beta|\phi\rangle &= \phi_\beta \prod_{\alpha} (1 - \phi_\alpha c_\alpha^\dagger) |0\rangle = \phi_\beta |\phi\rangle. \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

No sentido de melhorar o ferramental matemático para acompanhar a dedução das integrais de caminho fermiônicas, utiliza-se o operador unitário  $\mathcal{I}$ , dado pela equação:

$$\mathcal{I} = \int \prod_{\alpha} d\phi_\alpha^* d\phi_\alpha e^{-\sum_{\alpha} \phi_\alpha^* \phi_\alpha} |\phi\rangle \langle \phi|, \quad (\text{A.10})$$

onde  $\phi_\alpha^*$ ,  $\phi_\alpha$  são variáveis de Grassmann e  $|\phi\rangle$  e  $\langle \phi|$  são estados coerentes. Isso permite expandir qualquer vetor do espaço generalizado de Fock em termos dos estados coerentes.

Para verificar que  $\mathcal{I}$  representa um operador unitário no espaço generalizado de Fock, são usados dois vetores quaisquer da base  $\mathcal{F}$ . Ocorrendo a igualdade

$$\langle \alpha_1 \cdots \alpha_n | \mathcal{I} | \beta_1 \cdots \beta_m \rangle = \langle \alpha_1 \cdots \alpha_n | \beta_1 \cdots \beta_m \rangle \quad (\text{A.11})$$

significa que  $\mathcal{I}$  é unitário, pois a identidade (A.11) valerá para os demais vetores do espaço em questão, os quais são combinações lineares dos elementos da base  $\mathcal{F}$ .

Inicialmente, calculando o lado esquerdo da equação (A.11), encontra-se a expressão:

$$\langle \alpha_1 \cdots \alpha_n | \mathcal{I} | \beta_1 \cdots \beta_m \rangle = \int \prod_{\alpha} d\phi_{\alpha}^* d\phi_{\alpha} e^{-\sum_{\alpha} \phi_{\alpha}^* \phi_{\alpha}} \langle \alpha_1 \cdots \alpha_n | \phi \rangle \langle \phi | \beta_1 \cdots \beta_m \rangle \quad (\text{A.12})$$

com a sobreposição  $\langle \alpha_1 \cdots \alpha_n | \phi \rangle$  podendo ser escrita com o auxílio do adjunto da equação (3.4), levando a

$$\langle \alpha_1 \cdots \alpha_n | \phi \rangle = \langle 0 | c_{\alpha_n} \cdots c_{\alpha_1} | \phi \rangle = \phi_{\alpha_n} \cdots \phi_{\alpha_1}, \quad (\text{A.13})$$

onde foi utilizado o fato de  $|\phi\rangle$  ser um estado coerente em conjunto com a equação (A.7). Analogamente, através do adjunto da equação (A.13), tem-se

$$\langle \phi | \beta_1 \cdots \beta_m \rangle = \phi_{\beta_1}^* \cdots \phi_{\beta_m}^*. \quad (\text{A.14})$$

Assim, a equação (A.12) assume a forma

$$\langle \alpha_1 \cdots \alpha_n | \mathcal{I} | \beta_1 \cdots \beta_m \rangle = \int \prod_{\alpha} d\phi_{\alpha}^* d\phi_{\alpha} (1 - \phi_{\alpha}^* \phi_{\alpha}) \phi_{\alpha_n} \cdots \phi_{\alpha_1} \phi_{\beta_1}^* \cdots \phi_{\beta_m}^*. \quad (\text{A.15})$$

O cálculo das integrais propostas na expressão (A.15) pode ser efetuado distinguindo os casos  $n \neq m$  e  $n = m$ . Para  $n \neq m$  existem integrais que resultam em um valor nulo, pois elas são semelhantes a

$$\int d\phi_{\delta}^* d\phi_{\delta} (1 - \phi_{\delta}^* \phi_{\delta}) \begin{cases} \phi_{\delta}^* \\ \phi_{\delta} \end{cases} = \begin{cases} 0 \\ 0 \end{cases}, \quad (\text{A.16})$$

logo  $\langle \alpha_1 \cdots \alpha_n | \mathcal{I} | \beta_1 \cdots \beta_m \rangle = 0$  se  $n \neq m$ . No caso de  $n = m$ , as possíveis integrais a serem solucionadas para um estado particular  $\delta$  são da forma

$$\int d\phi_{\delta}^* d\phi_{\delta} (1 - \phi_{\delta}^* \phi_{\delta}) \begin{cases} \phi_{\delta}^* \phi_{\delta} \\ \phi_{\delta} \phi_{\delta}^* \\ 1 \end{cases} = \begin{cases} 1 \\ 0 \\ 1 \end{cases}. \quad (\text{A.17})$$

Na análise das equações (A.16) e (A.17), percebe-se que a expressão (A.15) é distinta de zero somente quando  $n = m$ . Além disso, cada estado  $\delta$  deve estar ocupado ou vazio simultaneamente em  $\langle \alpha_1 \cdots \alpha_m |$  e  $|\beta_1 \cdots \beta_n\rangle$ , exigindo que  $\{\alpha_1 \cdots \alpha_n\}$  seja alguma permutação  $P$  de  $\{\beta_1 \cdots \beta_n\}$ . Permite-se, então, escrever  $\phi_{\alpha_n} \cdots \phi_{\alpha_1} \phi_{\beta_1}^* \cdots \phi_{\beta_n}^* = (-1)^P \phi_{\alpha_n} \cdots \phi_{\alpha_1} \phi_{\alpha_1}^* \cdots \phi_{\alpha_n}^*$ , onde  $(-1)^P$  foi acrescentado para satisfazer as permutações



ocorridas em  $\phi_{\beta_1}^* \cdots \phi_{\beta_n}^*$ . Para deixar  $\phi_{\alpha_n} \cdots \phi_{\alpha_1} \phi_{\alpha_1}^* \cdots \phi_{\alpha_n}^*$  em uma forma equivalente a (A.17), deve-se anticomutar as variáveis um número par de vezes, tal que  $\phi_{\alpha_n} \cdots \phi_{\alpha_1} \phi_{\alpha_1}^* \cdots \phi_{\alpha_n}^* = \phi_{\alpha_1} \phi_{\alpha_1}^* \phi_{\alpha_2} \phi_{\alpha_2}^* \cdots \phi_{\alpha_n} \phi_{\alpha_n}^*$ , tendo como consequência o resultado:

$$\langle \alpha_1 \cdots \alpha_n | \mathcal{I} | \beta_1 \cdots \beta_m \rangle = \begin{cases} (-1)^P & \text{se } n = m \text{ e } \{\alpha_1 \cdots \alpha_n\} = \{\beta_{P1} \cdots \beta_{Pn}\} \\ 0 & \text{caso contrário.} \end{cases} \quad (\text{A.18})$$

De acordo com a expressão (3.8), o lado direito da equação (A.11) pode ser calculado e, quando considerada a ortonormalidade dos vetores da base  $\mathcal{F}$ , encontra-se

$$\langle \alpha_1 \cdots \alpha_n | \beta_1 \cdots \beta_m \rangle = \begin{cases} (-1)^P & \text{se } n = m \text{ e } \{\alpha_1 \cdots \alpha_n\} = \{\beta_{P1} \cdots \beta_{Pn}\} \\ 0 & \text{caso contrário.} \end{cases} \quad (\text{A.19})$$

Comparando as equações (A.18) e (A.19), obtém-se uma identidade; logo,  $\mathcal{I}$  é um operador unitário.

O cálculo do elemento de matriz de um operador  $A(c_\alpha^\dagger, c_\alpha)$  em ordem normal (operadores de criação à esquerda dos de destruição) é um resultado importante e dado por

$$\langle \phi | A(c_\alpha^\dagger, c_\alpha) | \phi' \rangle = \langle \phi | \phi' \rangle A(\phi_\alpha^*, \phi'_\alpha), \quad (\text{A.20})$$

onde foi usado que  $\langle \phi |$  e  $|\phi' \rangle$  são estados coerentes. Através da equação (A.4), tem-se

$$\langle \phi | A(c_\alpha^\dagger, c_\alpha) | \phi' \rangle = e^{\sum_\alpha \phi_\alpha^* \phi'_\alpha} A(\phi_\alpha^*, \phi'_\alpha), \quad (\text{A.21})$$

que possibilitou obter o elemento de matriz do operador  $A(c_\alpha^\dagger, c_\alpha)$  em termos das variáveis  $\phi_\alpha^*$  e  $\phi'_\alpha$ , pertencentes à álgebra de Grassmann.

## APÊNDICE B – SUSCEPTIBILIDADE MAGNÉTICA

### B.1 Simetria de réplicas

Neste Apêndice, a função  $\Pi$  (ver equação (5.2)) é escrita explicitamente:

$$\Pi = r - q + \frac{\beta^2 J^2 K_2 (F_2 - F_3)}{1 + \beta^2 J^2 K_1} - \frac{\beta^2 J^2 F_3}{1 + \beta^2 J^2 F_4} \left( F_3 - \frac{K_2 (1 + \beta^2 J^2 F_6)}{1 + \beta^2 J^2 K_1} \right), \quad (\text{B.1})$$

$$K_1 = F_1 - \frac{2F_5(1 + \beta^2 J^2 K_2 F_6)}{1 + \beta^2 J^2 F_4}, \quad (\text{B.2})$$

$$K_2 = F_2 - \frac{2\beta^2 J^2 K_2 F_3 F_5}{1 + \beta^2 J^2 F_4} \quad (\text{B.3})$$

onde  $r \equiv r_a(H = 0) = r_b(H = 0)$ ,  $q \equiv q_a(H = 0) = q_b(H = 0)$ ,

$$F_1 = \int_{-\infty}^{\infty} Dz \frac{\partial^2}{\partial h^2} \left[ \frac{\int_{-\infty}^{\infty} D\xi \partial \cosh \sqrt{\Delta} / \partial h}{s + \int_{-\infty}^{\infty} D\xi \cosh \sqrt{\Delta}} \right]^2, \quad (\text{B.4})$$

$$F_2 = \int_{-\infty}^{\infty} Dz \frac{\partial}{\partial h} \left[ \frac{\int_{-\infty}^{\infty} D\xi \partial \cosh \sqrt{\Delta} / \partial h}{s + \int_{-\infty}^{\infty} D\xi \cosh \sqrt{\Delta}} \right]^2, \quad (\text{B.5})$$

$$F_3 = \int_{-\infty}^{\infty} Dz \frac{\partial}{\partial h} \left[ \frac{\int_{-\infty}^{\infty} D\xi \partial^2 \cosh \sqrt{\Delta} / \partial h^2}{s + \int_{-\infty}^{\infty} D\xi \cosh \sqrt{\Delta}} \right], \quad (\text{B.6})$$

$$F_4 = \int_{-\infty}^{\infty} Dz \left[ \frac{\int_{-\infty}^{\infty} D\xi \partial^4 \cosh \sqrt{\Delta} / \partial h^4}{s + \int_{-\infty}^{\infty} D\xi \cosh \sqrt{\Delta}} - \left( \frac{\int_{-\infty}^{\infty} D\xi \partial^2 \cosh \sqrt{\Delta} / \partial h^2}{s + \int_{-\infty}^{\infty} D\xi \cosh \sqrt{\Delta}} \right)^2 \right], \quad (\text{B.7})$$

$$F_5 = \int_{-\infty}^{\infty} Dz \left[ \frac{\int_{-\infty}^{\infty} D\xi \partial \cosh \sqrt{\Delta} / \partial h}{s + \int_{-\infty}^{\infty} D\xi \cosh \sqrt{\Delta}} \frac{\partial}{\partial h} \left( \frac{\int_{-\infty}^{\infty} D\xi \partial^2 \cosh \sqrt{\Delta} / \partial h^2}{s + \int_{-\infty}^{\infty} D\xi \cosh \sqrt{\Delta}} \right) \right], \quad (\text{B.8})$$

$$F_6 = \int_{-\infty}^{\infty} Dz \frac{\partial^2}{\partial h^2} \left[ \frac{\int_{-\infty}^{\infty} D\xi \partial^2 \cosh \sqrt{\Delta} / \partial h^2}{s + \int_{-\infty}^{\infty} D\xi \cosh \sqrt{\Delta}} \right], \quad (\text{B.9})$$

com  $\Delta = h^2 + \beta^2 \Gamma^2$  e  $h \equiv \beta h_a = \beta h_b$  ( $h_a$  está definido na equação (4.24)).

## APÊNDICE C – EXPANSÃO PARA TEMPERATURA DE NÉEL

Supondo que a transição da fase PM ( $M_s = 0$ ) para a ordem AF ( $M_s > 0$ ) é contínua, as equações ponto de sela podem ser expandidas em potências de  $M_s$ . Após alguns cálculos, encontra-se a expansão (5.4) onde

$$A = \beta(V_0 + J_0)f_0^{10} + \beta^2(V^2 - J^2)(q_1f_0^{01} + x_1f_1^{00}) \quad (\text{C.1})$$

e

$$B = \beta(V_0 + J_0)B_1 + \beta(V_0 - J_0)B_2 + \beta^2(V^2 - J^2)B_3, \quad (\text{C.2})$$

com

$$\begin{aligned} B_1 = & \beta^2(V_0 + J_0)^2 \frac{f_0^{30}}{6} + \beta(V_0 + J_0)\beta^2(V^2 - J^2)\left[q_1 \frac{f_0^{21}}{2} + x_1 \frac{f_1^{20}}{2}\right] \\ & + \beta^4(V^2 - J^2)^2\left[q_1x_1f_1^{11} + q_1^2 \frac{f_0^{12}}{2} + x_1^2 \frac{f_2^{10}}{2}\right] + \beta^2(V^2 + J^2)[q_2f_0^{11} + x_2f_1^{10}], \end{aligned} \quad (\text{C.3})$$

$$B_2 = m_2 \left\{ \beta(V_0 + J_0)f_0^{20} + \beta^2(V^2 - J^2)[q_1f_0^{11} + x_1f_1^{10}] \right\}, \quad (\text{C.4})$$

$$\begin{aligned} B_3 = & q_3f_0^{01} + x_3f_1^{00} + \beta^2(V^2 + J^2)[q_1(x_2f_1^{01} + q_2f_0^{02}) + x_1(q_2f_1^{01} + x_2f_2^{00})] \\ & + \beta^4(V^2 - J^2)^2\left[q_1^3 \frac{f_0^{03}}{6} + x_1^3 \frac{f_3^{00}}{6} + q_1x_1^2 \frac{f_2^{01}}{2} + x_1q_1^2 \frac{f_1^{02}}{2}\right], \end{aligned} \quad (\text{C.5})$$

$M \equiv (M_a + M_b)/2 = m_2M_s^2 + O(M_s^4)$ ,  $q_s \equiv (q_a - q_b)/2 = q_1M_s + q_3M_s^3 + \dots$ ,  $q \equiv (q_a + q_b)/2 = q_2M_s^2 + O(M_s^4)$ ,  $\chi_s \equiv (r_a - r_b + q_b - q_a)/2 = x_1M_s + x_3M_s^3 + \dots$  e  $\chi \equiv (r_a + r_b + q_a + q_b)/2 = x_2M_s^2 + O(M_s^4)$ . Nas equações (C.1), (C.3), (C.4) e (C.5)

$$f_l^{ij} = \int Dz \frac{\partial^{(i+2j)}}{\partial y^{(i+2j)}} g_l(z, y) \quad (\text{C.6})$$

onde  $i, j, l = 0, 1, 2$  ou  $3$  e

$$g_0(z, y) = \frac{\int D\xi \frac{\partial}{\partial y} K}{\Theta}, \quad (\text{C.7})$$

$$g_1(z, y) = \frac{\int D\xi \frac{\partial^2}{\partial y^2} K}{\Theta} - \frac{\int D\xi \frac{\partial}{\partial y} K \int D\xi K}{\Theta^2}, \quad (\text{C.8})$$

$$g_2(z, y) = \frac{\int D\xi \frac{\partial^4}{\partial y^4} K}{\Theta} - 2 \frac{\int D\xi \frac{\partial^2}{\partial y^2} K \int D\xi \frac{\partial}{\partial y} K}{\Theta^2} + \int D\xi K \left[ -\frac{\int D\xi \frac{\partial^3}{\partial y^3} K}{\Theta^2} + 2 \frac{(\int D\xi \frac{\partial}{\partial y} K)^2}{\Theta^3} \right], \quad (\text{C.9})$$

$$g_3(z, y) = \frac{\int D\xi \frac{\partial^6}{\partial y^6} K}{\Theta} - 3 \frac{\int D\xi \frac{\partial^4}{\partial y^4} K \int D\xi \frac{\partial}{\partial y} K}{\Theta^2} + 3 \int D\xi \frac{\partial^2}{\partial y^2} K \left[ -\frac{\int D\xi \frac{\partial^3}{\partial y^3} K}{\Theta^2} + 2 \frac{(\int D\xi \frac{\partial}{\partial y} K)^2}{\Theta^3} \right] + \int D\xi K \left[ -6 \frac{(\int D\xi \frac{\partial}{\partial y} K)^3}{\Theta^4} - \frac{\int D\xi \frac{\partial^5}{\partial y^5} K}{\Theta^2} + 6 \frac{\int D\xi \frac{\partial}{\partial y} K \int D\xi \frac{\partial^3}{\partial y^3} K}{\Theta^3} \right], \quad (\text{C.10})$$

$$K = \frac{y \sinh(\sqrt{y^2 + \beta^2 \Gamma^2})}{\sqrt{y^2 + \beta^2 \Gamma^2}} \quad (\text{C.11})$$

com  $y = \beta h$  e  $\Theta$  definido na equação (4.27) para  $h = h_p$  na solução com simetria de réplicas ( $\delta_{1p} = 0$ ) e na fase PM ( $M_a = M_b$ ,  $q_a = q_b$  e  $r_a = r_b$ ).

## APÊNDICE D – ESTABILIDADE DA SOLUÇÃO COM SIMETRIA DE RÉPLICAS

Neste Apêndice, é feito um breve estudo da estabilidade da solução com simetria de réplicas (SR) para o problema de duas sub-redes. A análise da estabilidade é baseada no trabalho de de Almeida e Thouless (1978), que, em linhas gerais, consiste em diagonalizar exatamente a matriz Hessiana<sup>1</sup> para um  $n$  (número de réplicas) inteiro. Após, a continuação analítica de  $n \rightarrow 0$  é tomada em todos os autovalores encontrados na diagonalização. Neste processo, um dos autovalores ( $\lambda_{AT}$ ) pode torna-se negativo na fase vidro de spin (de Almeida e Thouless (1978)), indicando que a SR é instável nesta região.

Este trabalho analisa somente a estabilidade relacionada às flutuações transversais da solução com SR do problema KSG (no limite de  $V = 0$ , recupera-se os resultados do problema KS e, quando  $J = 0$ , tem-se o análogo ao problema de uma única rede). Assim, a seguinte energia livre é considerada (ver equação (4.71)):

$$Z(n) = \int dU \exp[-nN\beta f] \quad (\text{D.1})$$

onde  $\int dU$  representa as integrais sobre os campos auxiliares,

$$\beta f = \frac{\beta^2 J^2}{2n} \sum_{\alpha\gamma} (q_3^{\alpha\gamma})^2 + \frac{\beta^2 (V^2 - J^2)}{2n} \sum_{\alpha\gamma} [(q_a^{\alpha\gamma})^2 + (q_b^{\alpha\gamma})^2] + \frac{1}{n} C - \frac{1}{n} \ln \Theta \quad (\text{D.2})$$

com as somas  $\sum_{\alpha\gamma}$  notando todos os  $\alpha \neq \gamma$ ,

$$C = \sum_{\alpha} \left[ -\beta J_0 M_a^{\alpha} M_b^{\alpha} + \beta^2 J^2 r_a^{\alpha\alpha} r_b^{\alpha\alpha} + \frac{1}{2} \sum_p (\beta V_0 (M_p^{\alpha})^2 + \beta^2 V^2 (r_p^{\alpha\alpha})^2) \right], \quad (\text{D.3})$$

$$\Theta\{y\} = \int_0^{2\pi} \prod_{\alpha,p} \frac{dx_p^{\alpha}}{2\pi} e^{-y_p^{\alpha}} \int D[\phi^{\alpha*} \phi^{\alpha}] \exp[H^{eff}], \quad (\text{D.4})$$

$$\begin{aligned} H^{eff} = & \sum_{\alpha} \sum_p \left[ A_{M,p}^{\alpha} + 2\beta (V_0 M_p^{\alpha} - J_0 M_{p'}^{\alpha}) S_p^{\alpha} + 4\beta^2 (V^2 r_p^{\alpha\alpha} + J^2 r_{p'}^{\alpha\alpha}) S_p^{\alpha} S_p^{\alpha} \right] \\ & + 4\beta^2 \sum_{\alpha\gamma} [J^2 q_3^{\alpha\gamma} + (V^2 - J^2) q_a^{\alpha\gamma}] S_a^{\alpha} S_a^{\gamma} + 4\beta^2 \sum_{\alpha\gamma} [J^2 q_3^{\alpha\gamma} + (V^2 - J^2) q_b^{\alpha\gamma}] S_b^{\alpha} S_b^{\gamma}. \end{aligned} \quad (\text{D.5})$$

---

<sup>1</sup>Na solução estável, a matriz das derivadas segundas deve ser definida positivamente (todos os autovalores maiores do que zero).

Seguindo o procedimento padrão, considera-se um pequena perturbação na solução estacionária com SR:

$$q_l^{\alpha\gamma} = q_l + \eta_l^{\alpha\gamma} \text{ com } l = 3, a \text{ e } b. \quad (\text{D.6})$$

Agora, expande-se a energia livre (D.2) até segunda ordem em torna destas perturbações:

$$\beta f = \beta f_0 + \sum_{\alpha\beta, \delta\gamma} \underline{\eta}^\dagger \alpha\beta \underline{A}_{\alpha\beta, \delta\gamma} \underline{\eta}^{\delta\gamma} \quad (\text{D.7})$$

onde  $f_0$  é a energia livre com SR,  $\underline{\eta}^\dagger \alpha\beta = (\eta_3^{\alpha\beta} \quad \eta_a^{\alpha\beta} \quad \eta_b^{\alpha\beta})$ ,

$$\underline{A}_{\alpha\beta, \delta\gamma} = \begin{pmatrix} a_{33} & a_{3a} & a_{3b} \\ a_{a3} & a_{aa} & a_{ab} \\ a_{b3} & a_{ba} & a_{bb} \end{pmatrix} \quad (\text{D.8})$$

com  $a_{l,l'} = \frac{\partial^2}{\partial \eta_l^{\alpha\beta} \partial \eta_{l'}^{\delta\gamma}} (\beta f)$  ( $l = 3, a$  ou  $b$ ), isto é,

$$a_{33} = \beta^2 J^2 \left[ \delta_{\alpha\beta, \delta\gamma} - 16\beta^2 J^2 \sum_{p=a,b} (\langle S_p^\alpha S_p^\beta S_p^\delta S_p^\gamma \rangle - \langle S_p^\alpha S_p^\beta \rangle \langle S_p^\delta S_p^\gamma \rangle) \right], \quad (\text{D.9})$$

$$a_{pp} = \beta^2 (V^2 - J^2) (\delta_{\alpha\beta, \delta\gamma} - 16\beta^2 (V^2 - J^2) [\langle S_p^\alpha S_p^\beta S_p^\delta S_p^\gamma \rangle - \langle S_p^\alpha S_p^\beta \rangle \langle S_p^\delta S_p^\gamma \rangle]), \quad (\text{D.10})$$

$$a_{p3} = a_{3p} = -16(\beta J \sqrt{\beta^2 (V^2 - J^2)})^2 [\langle S_p^\alpha S_p^\beta S_p^\delta S_p^\gamma \rangle - \langle S_p^\alpha S_p^\beta \rangle \langle S_p^\delta S_p^\gamma \rangle], \quad (\text{D.11})$$

$$a_{ab} = a_{ba} = 0 \quad (\text{D.12})$$

e  $\langle \dots \rangle$  representa uma média em relação a interação efetiva (D.5).

A proposta de de Almeida e Thouless (1978) é usada para diagonalizar a forma quadrática presente na equação (D.7), onde os elementos são matrizes do tipo (D.8). No limite  $n \rightarrow 0$ , o autovalor  $\lambda_{AT}$  (replicon) está associado a matriz:

$$\underline{\lambda}_{AT} = \underline{P} - 2\underline{Q} + \underline{R} \quad (\text{D.13})$$

onde

$$\underline{P} = \underline{A}_{\alpha\beta, \alpha\beta}; \quad \underline{Q} = \underline{A}_{\alpha\beta, \alpha\delta} \text{ com } \beta \neq \delta; \quad \underline{R} = \underline{A}_{\alpha\beta, \delta\gamma} \text{ com } \alpha\beta \neq \delta\gamma. \quad (\text{D.14})$$

Diagonalizando a matriz (D.13), tem-se os autovalores  $\lambda = 1$  e

$$\lambda_{\pm} = 1 - \beta^2 V^2 (d_a + d_b) \pm \beta^2 \sqrt{V^4 (d_a^2 + d_b^2 - 2d_a d_b) + 4J^4 d_a d_b} \quad (\text{D.15})$$

sendo que, no limite de estabilidade,  $\lambda_-$  ( $\lambda_{AT} = 0$ ) torna-se negativo abaixo da tempera-

tura  $T_f$  que é dada por:

$$(T_f^2 - V^2 d_a)(T_f^2 - V^2 d_b) + T_f^4 J^4 d_a d_b = 0 \quad (\text{D.16})$$

onde

$$d_p = 16 [\langle S_p^\alpha S_p^\beta S_p^\alpha S_p^\beta \rangle - 2\langle S_p^\alpha S_p^\beta S_p^\alpha S_p^\delta \rangle + \langle S_p^\alpha S_p^\beta S_p^\delta S_p^\gamma \rangle]. \quad (\text{D.17})$$

## REFERÊNCIAS

- BINDER, K.; YOUNG, A. P. Spin glasses: Experimental facts, theoretical concepts, and open questions. *Rev. Mod. Phys.*, American Physical Society, v. 58, n. 4, p. 801–976, out. 1986.
- BRAY, A. J.; MOORE, M. A. Replica theory of quantum spin glasses. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, The Institute of Physics, v. 13, n. 60, p. L655–L660, jul. 1980.
- BÜTTNER, G.; USADEL, K. D. Replica-symmetry breaking for the Ising spin glass in a transverse field. *Physical Review B*, APS, v. 42, n. 10, p. 6385–6395, out. 1990.
- BÜTTNER, G.; USADEL, K. D. Stability analysis of an Ising spin glass with transverse field. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 41, n. 1, p. 428–431, jan. 1990.
- CASTELLANI, T.; CAVAGNA, A. Spin-glass theory for pedestrians. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, v. 2005, n. 05, p. P05012, 2005.
- CASTILLO, I. P.; 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.
- CASTRO-NETO, A. H.; JONES, B. A. Non-Fermi-liquid behavior in U and Ce alloys: Criticality, disorder, dissipation, and Griffiths-McCoy singularities. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 62, n. 22, p. 14975–15011, Dec 2000.
- CHAKRABARTI, B. K.; DAS, A. *Transverse Ising Model, Glass and Quantum Annealing*. 2003. Disponível em: <<http://www.citebase.org/abstract?id=oai:arXiv.org:cond-mat/0312611>>.
- CHAMBERLIN, R. V. et al.  $H - T$  phase diagram for spin-glasses: An experimental study of Ag:Mn. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 25, n. 11, p. 6720–6729, jun. 1982.
- de ALMEIDA, J. R. L. Strongly frustrated random antiferromagnets. *The European Physical Journal B*, EDP Sciences, v. 13, p. 289–295, 2000.
- de ALMEIDA, J. R. L.; THOULESS, D. J. Stability of the Sherrington-Kirkpatrick solution of a spin glass model. *Journal of Physics A: Mathematical General*, v. 11, p. 983–990, maio 1978.
- DICKEY, R. P. et al. Magnetic and non-Fermi-liquid phases in  $U_{1-x}Y_xPd_2Al_3$ . *Physical Review B*, American Physical Society, v. 68, n. 14, p. 144402, out. 2003.
- EDWARDS, S. F.; ANDERSON, P. W. Theory of spin glasses. *Journal of Physics F: Metal Physics*, v. 5, n. 5, p. 965–974, 1975.
- FISCHER, K. H.; HERTZ, J. A. *Spin glasses*. [S.l.]: Cambridge, 1991.



FYODOROV, Y.; KORENBLIT, I.; SHENDER, E. Frustrated antiferromagnets in an external magnetic-field. *Journal of Physics-Condensed Matter*, IOP Publishing LTD, v. 2, n. 6, p. 1669–1674, fev. 1990.

FYODOROV, Y. V.; KORENBLIT, I. Y.; SHENDER, E. F. Phase transitions in frustrated metamagnets. *Europhysics Letters*, Editions Physique, v. 4, p. 827–832, out. 1987.

GOLDSCHMIDT, Y. Y.; LAI, P.-Y. Ising spin glass in a transverse field: Replica-symmetry-breaking solution. *Physical Review Letters*, APS, v. 64, n. 21, p. 2467–2470, maio 1990.

ISHII, H.; YAMAMOTO, T. Effect of a transverse field on the spin glass freezing in the Sherrington-Kirkpatrick model. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, v. 18, n. 33, p. 6225–6237, 1985.

KAO, Y.-J. et al. History-dependent phenomena in the transverse Ising ferroglass: the free-energy landscape. *Physical Review B*, American Physical Society, v. 64, n. 6, p. 060402, jul. 2001.

KIM, D.-H.; KIM, J.-J. Infinite-range Ising spin glass with a transverse field under the static approximation. *Physical Review B*, APS, v. 66, n. 5, p. 054432, ago. 2002.

KIRKPATRICK, S.; SHERRINGTON, D. Infinite-ranged models of spin-glasses. *Physical Review B*, American Physical Society, v. 17, n. 11, p. 4384–4403, jun. 1978.

KORENBLIT, I. Y.; SHENDER, E. F. Spin glass in an Ising two-sublattice magnet. *Soviet Physics - JETP*, American Institute of Physics, v. 62, n. 5, p. 1030–1035, nov. 1985.

MAGALHÃES, S. G. et al. Spin glass and antiferromagnetism in Kondo-lattice disordered system. *The European Physical Journal B*, EDP Sciences, v. 34, p. 447–453, set. 2003.

MAGALHÃES, S. G. et al. Antiferromagnetism and spin glass in a Kondo lattice. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, Elsevier, v. 272-276, p. 48–49, 2004.

MAGALHÃES, S. G.; THEUMANN, A. Fermionic Ising glasses with BCS pairing interaction. Tricritical behavior. *The European Physical Journal B*, EDP, v. 9, n. 5, p. 5–13, 1999.

MAGALHÃES, S. G.; ZIMMER, F. M. Fermionic Ising glasses in magnetic transverse field with BCS pairing interaction. *The European Physical Journal B*, EDP Sciences, v. 43, p. 187–193, fev. 2005.

MAGALHÃES, S. G.; ZIMMER, F. M.; COQBLIN, B. Quantum critical point in the spin glass-antiferromagnetism competition in Kondo lattice systems. *Journal of Physics: Condens. Matter*, IOP, v. 18, p. 3479–3487, mar. 2006.

MAGALHÃES, S. G.; ZIMMER, F. M.; COQBLIN, B. The spin glass-antiferromagnetism competition in Kondo-lattice systems in the presence of a transverse applied magnetic field. *Physica B*, Elsevier, v. 378-380, p. 131 – 132, 2006.

MAGALHÃES, S. G. et al. Antiferromagnetic Ising spin glass competing with BCS pairing interaction in a transverse field. *The European Physical Journal B*, EDP Sciences, v. 52, p. 209–218, jul. 2006.

MAGALHÃES, S. G.; ZIMMER, F. M.; KREBS, P. R. Spin glass and ferromagnetism in disordered Kondo lattice. *Physica B*, Elsevier, v. 359-361, p. 717 – 719, 2005.

MAGALHÃES, S. G. et al. Spin glass and ferromagnetism in disordered cerium compounds. *Physical Review B (Condensed Matter and Materials Physics)*, APS, v. 74, n. 1, p. 014427, 2006.

MAJUMDAR, S. et al. An unusual interplay among disorder, Kondo-effect and spin-glass behavior in the Kondo lattices,  $Ce_2Au_{1-x}Co_xSi_3$ . *Solid State Communications*, Elsevier, v. 121, p. 665–668, 2002.

MARCANO, N. et al. Magnetic ground state of  $CeNi_{1-x}Cu_x$ : A calorimetric investigation. *Physical Review B (Condensed Matter and Materials Physics)*, APS, v. 71, n. 13, p. 134401, 2005.

MILLER, J.; HUSE, D. A. Zero-temperature critical behavior of the infinite-range quantum ising spin glass. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 70, n. 20, p. 3147–3150, maio 1993.

MIRANDA, E.; DOBROSAVLJEVIC, V. Localization-Induced Griffiths Phase of Disordered Anderson Lattices. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 86, n. 2, p. 264–267, Jan 2001.

MYDOSH, J. A. Disordered magnetism and spin glasses. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, Elsevier, v. 157–158, p. 606–610, maio 1996.

NEGELE, J. W.; ORLAND, H. *Quantum Many-Particle Systems*. Reading, MA, USA: Addison-Wesley, 1988.

OPPERMANN, R.; MULLER-GROELING, A. From localized to itinerant spin glasses: Grassmann field theory and mean-field solutions. *Nuclear Physics B*, Elsevier, v. 401, p. 507–547, jan. 1993.

OPPERMANN, R.; SHERRINGTON, D.; KISELEV, M. Modulated replica symmetry breaking schemes for antiferrimagnetic spin glasses. *The European Physical Journal B*, Springer-Verlag, v. 37, n. 2, p. 187–192, jan. 2004.

PARISI, G. The order parameter for spin glasses: a function on the interval 0-1. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, IOP Publishing LTD, v. 13, n. 3, p. 1101–1112, mar. 1980.

POPOV, V. N.; FEDOTOV, S. A. The functional-integration method and diagram technique for spin systems. *Soviet Physics - JETP*, American Institute of Physics, v. 67, n. 3, p. 535–541, mar. 1988.

READ, N.; SACHDEV, S.; YE, J. Landau theory of quantum spin glasses of rotors and Ising spins. *Physical Review B*, APS, v. 52, n. 1, p. 384–410, jul. 1995.

SACHDEV, S. *Quantum Phase Transitions*. U.K.: Cambridge University Press, 1999.

SANTOS, E. M. M.; THEUMANN, A. Replica symmetry breaking in the transverse-field Ising spin-glass model: Two fermionic representations. *Physical Review B: Condensed Matter and Materials Physics*, APS, v. 72, n. 1, p. 014447, jul. 2005.

- SCALAPINO, D. J. The case for  $d_{x^2-y^2}$  pairing in the cuprate superconductors. *Physics Reports*, Elsevier, v. 250, n. 6, p. 329–365, jan. 1995.
- SHERRINGTON, D.; KIRKPATRICK, S. Solvable model of a spin-glass. *Physical Review Letters*, American Physical Society, v. 35, n. 26, p. 1792–1796, dez. 1975.
- SUZUKI, M. et al. Magnetic phase diagram of three-dimensional diluted Ising antiferromagnet  $Ni_{0.8}Mg_{0.2}(OH)_2$ . *Journal of the Physical Society of Japan*, v. 73, n. 1, p. 206–215, jan. 2004.
- TAKAYAMA, H. An extended mean field model for spin-glasses: Antiferromagnetic-spin glass systems. *Progress of Theoretical Physics*, Kyoto Univ, v. 80, n. 5, p. 827–839, nov. 1988.
- TANASKOVIC, D.; DOBROSAVLJEVIC, V.; MIRANDA, E. Spin-Liquid Behavior in Electronic Griffiths Phases. *Physical Review Letters*, APS, v. 95, n. 16, p. 167204, 2005.
- THEUMANN, A. et al. Spin-glass freezing in Kondo-lattice compounds. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 63, n. 5, p. 054409, jan. 2001.
- THEUMANN, A.; GUSMÃO, M. V. Quantum Ising spin-glass. *Physics Letters A*, v. 105, n. 6, p. 311–314, 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 Statistical Mechanics and its Applications*, Elsevier, v. 311, p. 498–506, fev. 2002.
- THIRUMALAI, D.; LI, Q.; KIRKPATRICK, T. R. Infinite-range Ising spin glass in a transverse field. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, v. 22, n. 16, p. 3339–3349, 1989.
- VOLLMER, R. et al. Phase transitions and non-Fermi-liquid behavior in  $UCu_{5-x}Pd_x$  at low temperatures. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 61, n. 2, p. 1218–1222, Jan 2000.
- WIETHEGER, W.; SHERRINGTON, D. The transverse Ising model: fermionic representation and the functional integral approach. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, v. 19, n. 35, p. 6982–6991, dez. 1986.
- WONG, P.-z. et al. Coexistence of spin-glass and antiferromagnetic orders in the Ising system  $Fe_{0.55}Mg_{0.45}Cl_2$ . *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 55, n. 19, p. 2043–2046, Nov 1985.
- WU, W. et al. From Classical to Quantum Glass. *Physical Review Letters*, American Physical Society, v. 67, n. 15, p. 2076–2079, out. 1991.
- WU, W. et al. Quenching of the nonlinear susceptibility at a T=0 spin glass transition. *Physical Review Letters*, American Physical Society, v. 71, n. 12, p. 1919–1922, set. 1993.
- YE, J.; SACHDEV, S.; READ, N. Solvable spin glass of quantum rotors. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 70, n. 25, p. 4011–4014, jun. 1993.

YOSHIZAWA, H. et al. Mixed phase of spin-glass ordering and antiferromagnetism in an Ising system,  $Fe_xMn_{1-x}TiO_3$ . *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 59, n. 20, p. 2364–2367, Nov 1987.

ZIMMER, F. M.; MAGALHÃES, S. G. Fermionic Ising glasses with BCS pairing interaction in the presence of a transverse field. *Physica C*, Elsevier, v. 408-410, p. 398–399, 2004.

ZIMMER, F. M.; MAGALHÃES, S. G. One-step replica symmetry breaking solution for a fermionic Ising spin glass in a transverse field. *Physical Review B*, APS, v. 74, n. 1, p. 012202, jul. 2006.

ZIMMER, F. M.; MAGALHÃES, S. G. Quantum critical point in the spin glass antiferromagnetism competition for fermionic Ising models. *Physica A Statistical Mechanics and its Applications*, Elsevier, v. 359, p. 380–398, jan. 2006.

ZIMMER, F. M.; MAGALHÃES, S. G. One-step replica symmetry breaking solution for a highly asymmetric two-sublattice fermionic Ising spin glass model in a transverse field. *Physical Review B*, aceito para publicação, 2007.

ZIMMER, F. M.; MAGALHÃES, S. G. Replica symmetry breaking solution for two-sublattice fermionic Ising spin glass models in a transverse field. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, Elsevier, v. 310, p. 508 – 1510, 2007.