

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

TRANSIÇÕES INVERSAS EM MODELOS VIDRO
DE SPIN ISING FERMIÔNICOS

TESE DE DOUTORADO

Carlos Alberto Vaz de Moraes Junior

Santa Maria, RS, Brasil

2010

**TRANSIÇÕES INVERSAS EM MODELOS VIDRO DE SPIN
ISING FERMIÔNICOS**

por

Carlos Alberto Vaz de Moraes Junior

Tese de doutorado apresentada ao Curso de Doutorado do Programa de
Pós-Graduação em Física, Área de Concentração em Física,
da Universidade Federal de Santa Maria (UFSM, RS)

Orientador: Sérgio Garcia Magalhães

Santa Maria, RS, Brasil

2010

**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

**TRANSIÇÕES INVERSAS EM MODELOS FERMIÔNICOS DE
VIDRO DE SPIN**

elaborado por
Carlos Alberto Vaz de Moraes Junior

como requisito parcial para obtenção do grau de
Doutor em Física

COMISSÃO EXAMINADORA:

Sérgio Garcia Magalhães, Dr. (UFF)
(Presidente/Orientador)

Marcos Sergio Figueira da Silva, Dr. (UFF)

Paulo Pureur Neto, Dr. (UFRGS)

Matheus Jatkoske Lazo, Dr. (FURG)

Fábio Mallmann Zimmer, Dr. (UFSM)

Santa Maria, 26 de agosto de 2010.

AGRADECIMENTOS

Agradeço a todas as pessoas que, de uma forma ou de outra, colaboraram para a realização deste trabalho e, em particular:

- ao professor Sergio Garcia Magalhães pela oportunidade, orientação e dedicação;
- aos professores Fábio Mallmann Zimmer e Eleonir João Calegari, por toda ajuda prestada durante o doutoramento;
- à minha noiva Joice Ane Teixeira, pelo carinho e apoio;
- aos meus pais, Carlos Alberto Vaz de Moraes e Maria Celi Rodrigues de Moraes, e irmã, Talia Rodrigues de Moraes, pelo apoio e carinho ao longo de toda minha vida;
- à todos os colegas de laboratório e sala de estudos que já tive, pelo bom relacionamento e pelo auxílio durante o andamento deste trabalho.

RESUMO

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

TRANSIÇÕES INVERSAS EM MODELOS FERMIÔNICOS DE VIDRO DE SPIN

AUTOR: CARLOS ALBERTO VAZ DE MORAIS JUNIOR

ORIENTADOR: SERGIO GARCIA MAGALHÃES

Data e Local da Defesa: Santa Maria, 26 de agosto de 2010.

O presente trabalho estuda as transições inversas utilizando dois modelos vidro de spin: o modelo de alcance infinito vidro de spin de Ising fermiônico (VSIF) com campo magnético transversal Γ e o modelo Hopfield vidro de spin Ising fermiônico (HVSIF) com Γ . Nestes modelos, os spins são escritos em termos de operadores fermiônicos. Nesse caso, há quatro autovalores possíveis para o operador S_i^z , dois deles não magnéticos. Ambos os modelos são expressos em termos do formalismo das integrais de caminho fermiônicas com variáveis de Grassmann. Particularmente, os modelos VSIF e HVSIF são analisados no ensemble Grão Canônico, que permite variar o número médio de ocupação de férmions por sítio através do ajuste do potencial químico μ . O Potencial Grão Canônico é obtido por meio das soluções com simetria de réplicas e com um passo de quebra de simetria de réplicas utilizando a aproximação estática.

Os resultados obtidos a partir dos modelos VSIF e HVSIF podem ser resumidos de acordo com a seguinte ordem: primeiramente, o modelo altamente frustrado VSIF é estudado. Essencialmente, para $\Gamma = 0$, há o surgimento de transição de primeira ordem inversa para valores de μ , que é um mecanismo de diluição magnética. Consequentemente, as transições inversas puderam ser estudadas sob o efeito de flutuações quânticas quando um campo magnético transversal é introduzido nesse modelo. Como resultado principal, é mostrado que flutuações quânticas destroem as transições inversas no modelo VSIF. Em segundo lugar, o papel da frustração como ingrediente para um modelo apresentar naturalmente transições inversas é checado pelo modelo HVSIF, o qual permite analisar diversos regimes de frustração. De fato, é mostrado no modelo HVSIF que independentemente do nível de frustração, sempre há uma transição inversa para valores altos de μ . Finalmente, a introdução do campo Γ no modelo HVSIF permite estudar de que forma o ajuste simultâneo de flutuações quânticas e intensidade do nível de frustração afetam as transições inversas nesse modelo. Como resultado, sugere-se que a relação entre diluição e a presença de uma fase frustrada tem um importante papel na produção de transições inversas. Em adição, quando efeitos de flutuações quânticas são introduzidas pelo Γ , o papel da diluição parece ser enfraquecido. Nesse caso, as transições inversas são destruídas no modelo HVSIF.

Palavras-chave: Modelos fermiônicos, transições inversas, vidro de spin, campo transversal

ABSTRACT

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

INVERSE TRANSITIONS IN FERMIONIC ISING SPIN GLASS MODELS

AUTHOR: CARLOS ALBERTO VAZ DE MORAIS JUNIOR

ADVISER: SÉRGIO GARCIA MAGALHÃES

Local and Date: Santa Maria, august 26nd, 2010.

The present work studies inverse transitions by using two spin glass models: the infinite-range fermionic Ising spin glass (FISG) in the presence of a transverse magnetic field Γ and Hopfield fermionic Ising spin glass (HFISG) model with a Γ field. In these models, the spin are written in terms of fermionic operators. In that case, there are four possible eigenvalues of the operator S_i^z , two of them non-magnetic. The problem for both models is expressed in the path integral formalism with Grassmann variables. Particularly, the FISG and HFISG models are analysed in the Grand Canonical ensemble, which allows changing the average number occupation of fermions per site by adjusting the chemical potential μ , which is a magnetic dilution mechanism. The Grand Canonical Potential is obtained within the static approximation with replica symmetry and one-step replica symmetry breaking schemes.

Firstly, the highly frustrated FISG model is studied. Essentially, for $\Gamma = 0$, a first order inverse transition arises with the increase of μ (dilution). As a consequence, the inverse transitions can be studied under the effect of quantum fluctuations when a transverse magnetic field Γ is turned on. As main result, it is shown that quantum fluctuations destroy the inverse transitions. Secondly, the role of frustration as ingredient for a model to present naturally inverse transitions is checked by the HFISG model, which allows interpolating from trivial randomness to a highly frustrated regime. In fact, it is shown that for $\Gamma = 0$ and high values of μ , any frustration level presents a inverse transition. Finally, the introduction of the Γ field in the HFISG model allows to study how the simultaneous adjusting of quantum fluctuations and the level of frustration affects the inverse transition in this model. As a result, it is suggested that the interplay between the dilution and the presence of a frustrated phase has an important role inverse transitions producing. In addition, when the effects of quantum fluctuations are introduced by Γ , the role of dilution seems to be weakened. As a consequence, the inverse transition is destroyed in HFISG model.

Keywords: fermionic models, inverse transitions, spin glass, tranverse field

LISTA DE FIGURAS

2.1	Susceptibilidade em função da temperatura para diversos compostos VS (FIS- CHER; HERTZ, 1991).	16
2.2	Figura de rede (a) não frustrada e (b) frustrada	17
2.3	Picture de muitos vales	18
2.4	Um esboço das diferentes curvas de derretimento no plano $T - P$ resultantes da equação de Clausius-Clapeyron (SCHUPPER; SHNERB, 2005).	19
2.5	Esboço da dependência da energia e da entropia em função do comprimento li- near de um polímero de metilcelulose em água. As conformações dobradas, não interagentes, são favorecidas energeticamente (devido a um número maior de interações favoráveis entre os constituintes de um único elo) e menos entrópicas (devido ao número limitado de conformações de polímero e/ou aos poucos graus de liberdade das moléculas de água que estão presas pelos constituintes hi- drofóbicos de um elo). As conformações desdobradas (interagentes) apresentam energias mais altas, mas também admitem um número maior de configurações microscópicas, tal que estas se tornam favorecidas em temperaturas mais altas. (SCHUPPER; SHNERB, 2005).	21
2.6	Diagramas de Fase do modelo BC no plano $D - T$ para $r = 1$ (figura menor, sem derretimento inverso) e para $r = 6$ (figura principal: mostra derretimento inverso) (SCHUPPER; SHNERB, 2005).	23
2.7	Diagrama de fases do modelo GS e entropia S vs T para $D = 0.96$. No diagrama, as linhas a direita correspondem a espinodal da solução vidro de spin para os casos SR (linha pontilhada) e QSR (tracejada-cruzada). A linha cheia à esquerda corresponde a espinodal da solução paramagnética. A linha central corresponde ao contorno de primeira ordem. Na figura da entropia S vs T , as regiões designadas por “VS(pura)” e “PM(pura)” não apresentam soluções paramagnética e vidro de spin, respectivamente. Crisanti e Leuzzi (2005)	26

- 2.8 Vizinhanças do Ponto Tricrítico (PTC) para um potencial químico positivo. Acima de PTC ocorre uma transição de segunda ordem entre as fases paramagnética e vidro de spin. Abaixo de PTC surge uma transição de primeira ordem. A linha d define o limite de validade da solução vidro de spin e a linha b define o limite de validade da solução paramagnética (ROSENOW; OPPERMANN, 1996). 28
- 2.9 Diagrama de fases T vs a . A linha cheia representa uma transição de segunda ordem entre as fases paramagnética (PM) e vidro de spin (VS), a linha pontilhada tracejada-pontilhada representa a espinodal da solução ferromagnética (FE) e a linha tracejada representa uma transição de primeira ordem entre as fases FE e VS. 30
- 4.1 Diagrama de fases T/J versus μ/J entre as fases VS e PM para $\Gamma = 0$. T_{tc} representa o ponto tricrítico. T_{2f} e T_{1f} representam as linhas de primeira e segunda ordem, respectivamente. Abaixo do T_{tc} as linhas a esquerda e a direita da linha T_{1f} representam as espinodais da soluções paramagnética e vidro de spin, respectivamente. A figura mais a direita mostra em detalhes a transição de primeira ordem. 61
- 4.2 Entropia versus T/J para $\Gamma = 0$ e $\mu/J = 0.92$. A linha vertical pontilhada é a espinodal da solução VS e a linha vertical cheia representa a linha de transição de segunda ordem T_{2f} . Em baixas temperaturas ($T/J < 0.2$), a linha tracejada representa a solução VS com SR e a linha pontilhada indica a solução VS com 1P-QSR. 62
- 4.3 Diagramas de fases T/J em função de μ/J para os seguintes valores de Γ/J : 0, 0.25, 0.5, 1.0. Essa figura utiliza a mesma convenção adotada na figura 4.1 para representar as linhas de transição. 63
- 4.4 Figura mostrando em detalhes a transição de primeira ordem para diversos valores de $\Gamma = 0.0, 0.25, 0.5, 1.0$. T_{2f} e T_{1f} indicam as transições de segunda e primeira ordem, respectivamente. T_{tc} indica o posicionamento do ponto tricrítico. Abaixo do ponto tricrítico, as linhas mais a esquerda indicam a espinodal da solução PM e as linhas mais a direita indicam a espinodal da solução VS. 64

- 4.5 Entropia *versus* T/J para vários valores de $\Gamma = 0.0, 0.25, 0.5, 1.0$. A linha vertical pontilhada é a espinodal da solução VS e a linha vertical cheia representa a linha de transição de segunda ordem T_{2f} . Em baixas temperaturas ($T/J < 0.2$), a linha tracejada representa a solução VS com SR e a linha pontilhada indica a solução VS com 1P-QSR. 65
- 4.6 Número de ocupação n como uma função de μ/J na solução VS para diversos valores de T/J e Γ . As linhas tracejadas-pontilhadas indicam a solução 1P-QSR e as linhas cheias indicam a solução SR. Os detalhes mostram a diferença no valor de n das soluções SR e 1P-QSR. 66
- 4.7 Diagramas de fase T/J como uma função de μ/J para $a = 0.0$ e $a = 0.1$. Nesses diagramas, as linhas cheias representam as transições de segunda ordem e as linhas tracejadas representam as transições de primeira ordem. T_{tc} indica o ponto tricrítico. Os detalhes mostram a entropia S *versus* T/J para valores específicos de μ/J na transição de primeira ordem, onde T_{1c} e T_{1f} representam as transições de primeira ordem entre as fases FE/PM e VS/PM, respectivamente. 67
- 4.8 Diagramas de fase T/J como uma função de μ/J para valores baixos de a . T_{tc} representa o ponto tricrítico e T_{tp} define o ponto triplo. Linhas tracejadas representam as transições de primeira ordem e as linhas sólidas representam as transições de segunda ordem. Os detalhes nas figuras mostram as vizinhanças do ponto triplo em detalhes. Próximo ao ponto triplo, uma pequena diferença entre os contornos de primeira ordem obtidos por SR (linhas tracejadas) e 1P-QSR (linhas pontilhadas) pode ser vista. 69
- 4.9 Entropia S em função de T/J para diversos valores de a e μ/J . Os rótulos $T_{1c}(\mu)$ e $T_{1f}(\mu)$ indicam as transições de primeira ordem entre as fases FE/PM e VS/PM, respectivamente. As linhas verticais cheias indicam a transição de segunda ordem entre as fases VS e PM. 70
- 4.10 Diagramas de fase T/J em função de a para $\mu/J = 0$ com $\Gamma/J = 0, 0.5$ e 0.75 . As linhas cheias indicam a transição de segunda ordem entre as fases VS e PM. Linhas tracejadas indicam a transição de primeira ordem entre as fases VS e FE. A inserção mostra uma comparação entre os resultados obtidos pelos modelos HVSIF 2S e 4S. 71

4.11	Diagramas de fase T/J versus μ/J para $a = 0.1$ com $\Gamma/J = 0$ e $\Gamma/J = 0.75$. T_{tc} indica o ponto tricrítico. As figuras menores mostram o comportamento da entropia S versus T/J para valores μ/J na linha de transição de primeira ordem.	72
4.12	Diagramas de fase T/J versus μ/J para $a = 0.0025$ com $\Gamma/J = 0.0$ e $\Gamma/J = 0.3$. T_{tc} e T_{tp} indicam o ponto tricrítico e o ponto triplo, respectivamente. As linhas tracejadas e linhas cheias indicam as transições de primeira e segunda ordem, respectivamente. As figuras menores mostram a locação do ponto triplo em detalhes.	73
4.13	Comportamento da entropia S em função de T/J para valores de μ/J na transição de primeira ordem para dois valores de Γ os quais correspondem a $T/J = 0.22$.	73
4.14	Potencial Grão Canônico Ω como uma função de μ/J para $\Gamma = 0$ mostrando em detalhes a localização do ponto triplo.	74
4.15	Comportamento do número de ocupação médio n como uma função de μ/J para valores de T/J na transição de primeira ordem para dois valores de Γ e $a = 0.1$. As linhas verticais indicam um transição de primeira ordem entre as fase VS e PM.	75
4.16	Comportamento do número de ocupação médio n como uma função de μ/J para valores de T/J na transição de primeira ordem para dois valores de Γ e $a = 0.0025$. Nos painéis (a)-(b), as linhas verticais indicam uma transição de primeira ordem entre as fases FE e PM. Nos painéis (c)-(d), as linhas verticais a esquerda e a direita indicam as transições de primeira ordem FE/VS e VS/PM, respectivamente.	76
4.17	Comportamento do número de ocupação médio de férmions por sítio n como função de T/J para valores de μ/J em transições de primeira ordem para dois valores de Γ e dois valores de $a = p/N$. As linhas verticais indicam uma transição de primeira ordem.	77

LISTA DE TABELAS

2.1	Sumário de alguns sistemas físicos que exibem congelamento ou derretimento inverso e características da transição. Tabela parcialmente extraída de Schupper e Shnerb (2005).	20
-----	--	----

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	13
2	REVISÃO TEÓRICA E EXPERIMENTAL	16
2.1	Caracterização da fase vidro de spin	16
2.2	Transições Inversas	19
2.3	Exemplos de derretimento e congelamento inverso	20
2.4	Modelo Magnético para descrição do derretimento inverso	22
2.5	Modelo Sherrington-Kirkpatrick, métodos das Réplicas, solução com simetria de réplicas e quebra de simetria de réplicas em um passo	24
2.6	Modelo para descrição do congelamento inverso.	26
2.7	Modelo vidro de spin fermiônico e mapeamento com o modelo GS	27
2.8	Modelo Hopfield	28
3	MODELOS FERMIÔNICOS	32
3.1	O papel do campo transversal Γ em modelos fermiônicos	32
3.2	Formulação fermiônica e o formalismo em segunda quantização	33
3.3	Modelo Vidro de Spin Ising Fermiônico com Campo Transverso	38
3.3.1	Modelo VSIF (solução com simetria de réplicas)	42
3.3.2	Modelo VSIF (solução com um passo de quebra de simetria de réplicas)	45
3.4	Modelo Hopfield Vidro de Spin Ising Fermiônico com Campo Transverso	48
3.4.1	Modelo HVSIF (solução com simetria de réplicas)	53
3.4.2	Modelo HVSIF (solução com um passo de quebra de simetria de réplicas)	56
4	RESULTADOS	60
4.1	Resultados para o modelo VSIF com $\Gamma = 0$	60

4.2	Resultados para o modelo VSIF com $\Gamma > 0$	62
4.3	Resultado para o modelo HVSIF com $\Gamma = 0$	66
4.4	Resultados para o modelo HVSIF com $\Gamma > 0$	70
5	CONSIDERAÇÕES FINAIS	78
A	Cálculo do ponto tricrítico no modelo VSIF com campo transversal	82
B	Cálculo do ponto tricrítico no Modelo HVSIF sem campo transversal	83

1 INTRODUÇÃO

Recentemente, estudos experimentais mostram uma transição, não intuitiva, chamada transição inversa, em que a fase ordenada apresenta uma entropia maior que a fase desordenada (ERTAS; NELSON, 1996; CHEVILLARD; AXELOS, 1997). Essa transição pode ser classificada em duas espécies: derretimento e congelamento inverso. O derretimento inverso mostra, por exemplo, uma transição da fase líquida a baixas temperaturas para uma estrutura cristalina através de aquecimento. Já no congelamento inverso, a fase desordenada, geralmente líquida ou paramagnética, é modificada através de aquecimento para uma fase do tipo vidro, a qual é caracterizada por uma quebra de ergodicidade sem o surgimento de uma estrutura ordenada aparente.

Do ponto de vista teórico, determinados modelos magnéticos foram propostos ((CRISANTI; LEUZZI, 2005), (SCHUPPER; SHNERB, 2005)) com intuito de descrever características gerais relacionadas ao fenômeno de transições inversas (derretimento ou congelamento inverso). O modelo clássico Blume-Capel (BLUME, 1966; CAPEL, 1966) (BC) de spin 1 ($S = 0, \pm 1$), por exemplo, apresenta derretimento inverso em uma solução de campo médio. Contudo, o aparecimento nesse modelo de derretimento inverso ocorre somente através da imposição artificial de um mecanismo de favorecimento entrópico. Nesse caso, há uma transição de primeira ordem da fase paramagnética (PM) para a fase ferromagnética (FM) quando se aumenta a temperatura.

Já o congelamento inverso foi estudado através do modelo vidro de spin clássico Ghatak-Sherrington (GS) (GHATAK; SHERRINGTON, 1977). Nesse caso, a fase magnética vidro de spin é caracterizada pelo congelamento desordenado dos momentos magnéticos em baixas temperaturas (frustração), que ocorre por meio de uma competição de interações ferromagnéticas e anti-ferromagnéticas gerada por desordem. Portanto, o modelo GS, também de spin 1, incorpora uma nova característica em relação ao modelo BC: a frustração. No entanto, diferentemente do modelo BC, o modelo GS apresenta uma transição inversa em uma solução de campo médio sem a necessidade da introdução artificial de um mecanismo de favorecimento entrópico. A partir deste comparativo, pode-se especular quais são os mecanismos físicos necessários para o surgimento natural de transições inversas em um dado modelo. Logo, uma das motivações do presente trabalho se baseia na busca por outros modelos vidro de spin que também sejam capazes de apresentar transições inversas, mais especificamente congela-

mento inverso, bem como entender quais são os ingredientes que um modelo deve ter para apresentar naturalmente essa espécie de transição. Nesse sentido, é conhecido que o modelo vidro de spin Ising fermiônico (VSIF) no ensemble grão canônico tem ligação com o modelo GS clássico através de um mapeamento entre o potencial químico e o parâmetro anisotrópico (ROSENOW; OPPERMANN, 1996). Devido a essa estreita relação entre os modelos GS e VSIF, este último acaba se tornando uma possível escolha para o estudo de transições inversas. O modelo VSIF, em que os operadores de spin são escrito como uma combinação bilinear de operadores de criação e destruição que atuam em um espaço de quatro auto-estados por sítio ($|00\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle, |0\uparrow\rangle$ and $|0\downarrow\rangle$), utiliza o formalismo de integrais de caminhos fermiônicas no tratamento dos operadores que compõem o Hamiltoniano. A vantagem da formulação fermiônica é permitir a introdução de outros tipos de acoplamento, como por exemplo, efeito Kondo e supercondutividade. Esta formulação também permite o acoplamento de um campo magnético transversal em relação ao eixo z , o que possibilita analisar o efeito de flutuações quânticas sobre o congelamento inverso, foco também de estudo deste trabalho.

Além de testar o papel das flutuações quânticas em relação ao congelamento inverso, este trabalho também tem como objetivo questionar a relação entre frustração e congelamento inverso. Para testar esta relação, o modelo Hopfield vidro de spin Ising fermiônico (HVSIF) é utilizado. A partir da obtenção da termodinâmica deste modelo, o parâmetro $a = p/N$ é introduzido, o qual permite controlar o nível de frustração. Com isso, pode-se analisar o comportamento do congelamento inverso desde o nível de desordem trivial, ($a = 0$), até o regime de alta frustração ($a > a_c$). A este modelo também pode ser acoplado um campo transversal Γ , o que permite estudar o congelamento inverso quando intensidade de flutuações quânticas e nível de frustração são modificados simultaneamente.

Neste trabalho, a aproximação estática (que trata das correlações spin-spin) e o método das réplicas são utilizados. A partir da utilização do método das réplicas, os potenciais grão canônicos dos modelos VSIF e HVSIF foram calculados nos seguintes casos: solução com simetria de réplicas (SR) e solução com um passo de quebra de simetria de réplicas (1P-QSR). Na solução SR, o parâmetro de ordem $q_{\alpha\beta} = \langle \frac{1}{N} \sum_i S_{\alpha}^i S_{\beta}^i \rangle$, relacionado à caracterização da fase VS, é igual a q_0 para qualquer combinação de α e β , tal que $q_{\alpha\beta} = q_0$. Na solução 1P-QSR (PARISI, 1980), divide-se a matriz das réplicas, que tem tamanho n , em n/m grupos, e o parâmetro $q_{\alpha\beta}$ assume dois valores distintos: $q_{\alpha\beta} = q_1$ se as réplicas α e β pertencem ao mesmo grupo e $q_{\alpha\beta} = q_0$ se as réplicas α e β pertencem a grupos diferentes.

Quanto à estrutura, esta tese está dividida em cinco partes: uma introdução relatando

as principais motivações acerca do estudo do congelamento inverso em modelos VS. Há um capítulo de revisão, destacando os principais tópicos encontrados na literatura que descrevem a fase VS e também as transições inversas. O capítulo três é reservado para a discussão dos modelos VSIF e HVSIF com campo transversal. No capítulo quatro são descritos em detalhe os resultados obtidos neste trabalho e que estão publicados nos artigos Phys. Rev. B vol. 77 pág. 134422 (2008) e Phys. Rev. B vol. 81 pág. 014207 e também os resultados do último trabalho da tese, em que são obtidos resultados do modelo HVSIF com Γ . O último capítulo é reservado para as considerações finais.

2 REVISÃO TEÓRICA E EXPERIMENTAL

Este capítulo descreve alguns dos principais pontos relacionados a teoria vidro de spin e as transições inversas, bem como a relação entre estes dois conceitos. Primeiramente, são relatadas as características da fase vidro de spin. Em seguida, há uma revisão sobre transições inversas, partindo desde a definição até resultados experimentais que mostram esse tipo de transição. Na parte teórica, são descritos alguns modelos clássicos que descrevem as transições inversas e também a fase vidro de spin.

2.1 Caracterização da fase vidro de spin

O surgimento da fase vidro de spin (VS), onde a baixas temperaturas os momentos magnéticos estão congelados de forma aleatória, está associado a dois fatores: deve haver competição entre interações ferromagnéticas (*positivas*) e antiferromagnéticas (*negativas*) e estas interações devem ser aleatórias.

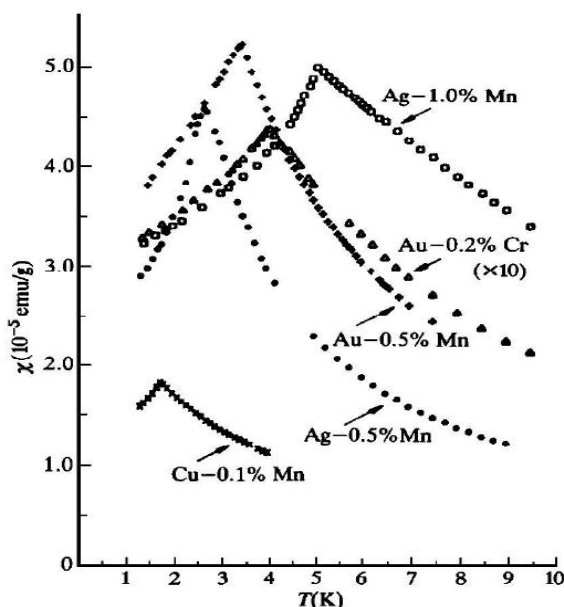


Figura 2.1: Susceptibilidade em função da temperatura para diversos compostos VS (FISCHER; HERTZ, 1991).

Uma das características experimentais que demonstram a existência da fase vidro de spin é mostrada na figura 2.1, na qual os sistemas estudados apresentam um pico na susceptibilidade magnética, evidenciando uma magnetização local espontânea m_i por sítio não nula.

Outra característica importante observada experimentalmente na fase vidro de spin é que ela não possui nenhuma ordem de longo alcance, o que a diferencia de uma ordem ferromagnética ou antiferromagnética, por exemplo. Além disso, em sistemas vidro de spin, para $T < T_f$ (T_f é temperatura de congelamento), é encontrada uma magnetização remanescente, que pode ser medida mesmo após o campo externo aplicado ser desligado. Dentre os materiais que apresentam vidro de spin, estão em destaque os metais nobres (Au, Ag, Cu, Pt) em que são diluídos íons de metais de transição, tais como Fe ou Mn, que são considerados impurezas. Devido à colocação aleatória das impurezas, os elétrons de condução do metal hospedeiro são polarizados, possibilitando assim uma interação de troca indireta entre momentos magnéticos (spins) das impurezas. Essa interação, conhecida como RKKY, oscila fortemente com a distância \mathbf{R} e obedece a equação

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

onde K_F é o número de onda de Fermi do metal hospedeiro e J_0 e φ_0 são constantes. Com a colocação aleatória de impurezas, algumas das interações de um determinado spin com o restante são positivas, favorecendo o alinhamento paralelo, enquanto outras são negativas, favorecendo o alinhamento antiparalelo. Percebe-se que nenhuma configuração dos spins consegue satisfazer todos os vínculos de troca nesta interação oscilatória. Esta incapacidade do sistema de satisfazer todas as interações simultaneamente é chamada de frustração, e pode ser ilustrada na figura 2.2 da seguinte forma: considere uma rede quadrada com interações entre vizinhos mais próximos, que podem ser positivas (+) ou negativas (-). Agora, examinando algumas das possíveis configurações de spin nessa rede quadrada que tem quatro acoplamentos mútuos como mostra a figura 2.2, percebe-se que quando um spin da rede é fixado, seu spin vizinho é modificado a partir do valor da interação que liga ambos. Se o número de

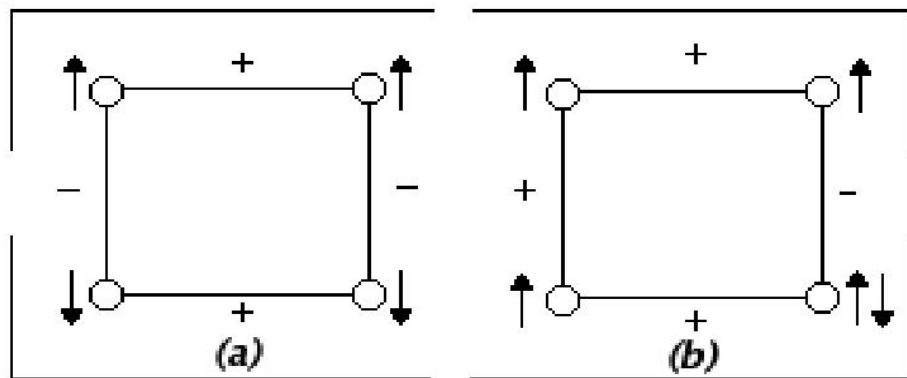


Figura 2.2: Figura de rede (a) não frustrada e (b) frustrada

interações (+) e (-) é par (figura 2.2(a)), é sempre possível encontrar uma configuração que

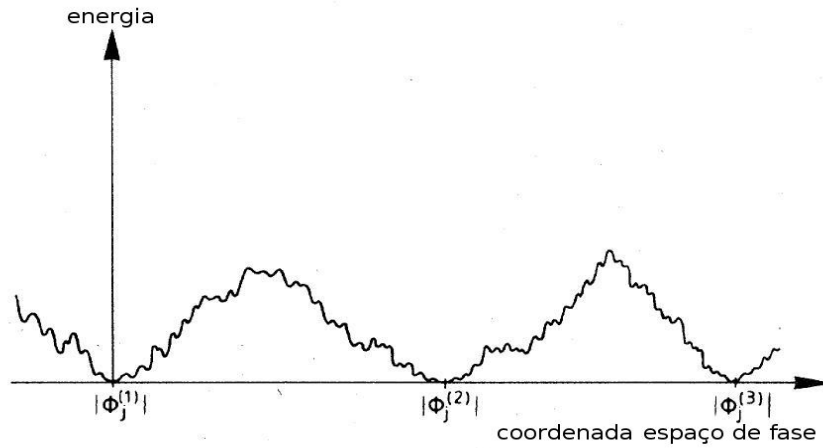


Figura 2.3: Picture de muitos vales

satisfaça todas as interações. Por outro lado, se o número de interações negativas é ímpar (figura 2.2(b)), há um conflito quando são analisadas todas as interações da rede. O vínculo conectando o último e o primeiro spin originalmente fixado não é satisfeito. Tentar satisfazer os vínculos ao redor do spin originalmente fixado fará com que outras interações não sejam satisfeitas.

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)). Deve-se então, dentro deste contexto, analisar como ocorre a quebra da ergodicidade na fase VS. Em $T > T_f$, o sistema é ergódico. Porém, para T abaixo de T_f , ocorre a quebra de ergodicidade e o espaço de fases é dividido em muitos vales, que são separados por barreiras infinitamente altas de energia livre (quando $N \rightarrow \infty$), subdividindo o espaço de fases em vários estados (vales) inacessíveis termodinamicamente uns aos outros. Esse modo de visualizar a forma de energia livre é denominado de “picture” de muitos vales, que está representada na figura 2.3. Com o decréscimo da temperatura ($T < T_f$), ocorre novamente a divisão dos vales em um número maior de vales menores, o que caracteriza uma nova quebra de ergodicidade. Esse é um processo contínuo, em que o decréscimo de temperatura gera uma outra fragmentação do espaço de fases com um número ainda maior de vales menores. Para $T > T_f$, a estrutura de muitos vales desaparece, ocorrendo um único mínimo para a energia livre.

2.2 Transições Inversas

Derretimento inverso é uma transição reversível¹ entre uma fase líquida a baixas temperaturas e uma fase cristalina a altas temperaturas. Esta espécie de transição ocorre quando a fase ordenada (cristalina) tem uma entropia maior que a fase desordenada (líquida). Além do derretimento inverso, observado experimentalmente entre fases líquido-cristalina, há também o congelamento inverso, que ocorre entre as fases líquido-vidro. O congelamento inverso, assunto que será retomado posteriormente, pode ser melhor entendido se uma discussão relacionada ao derretimento inverso for feita primeiramente. Esta discussão é feita através da equação de Clausius-Clapeyron, utilizada com intuito de descrever a inclinação da curva de derretimento em transições de primeira ordem, curva esta que descreve o contorno entre as fases líquida e cristalina em um plano temperatura T e pressão P ,

$$\frac{dP}{dT} = \frac{S^l - S^s}{V^l - V^s}. \quad (2.2)$$

Na equação (2.2), $P(T)$ é a pressão de derretimento dependente da temperatura, S e V definem a entropia e o volume molar, e os índices l e s indicam as fases em alta e baixa temperatura. Esta equação oferece quatro classes diferentes de curvas de congelamento, como

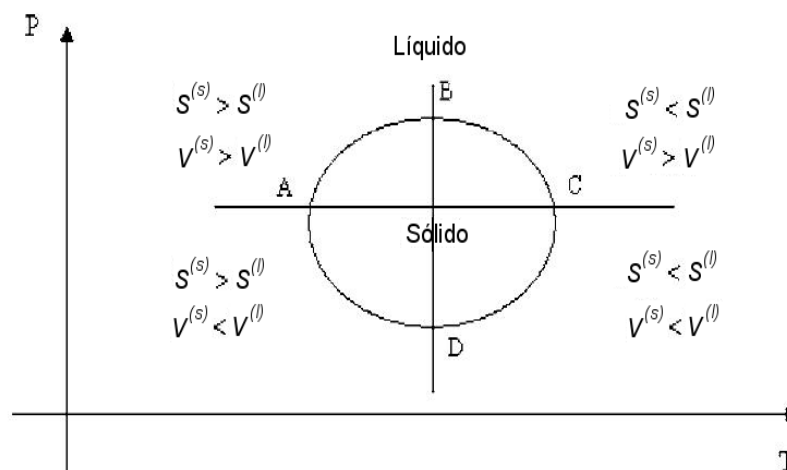


Figura 2.4: Um esboço das diferentes curvas de derretimento no plano $T - P$ resultantes da equação de Clausius-Clapeyron (SCHUPPER; SHNERB, 2005).

mostra a figura 2.4, e ajuda a classificar exemplos de cenários que apresentam transições de primeira ordem.

¹Transição em que o sistema retorna ao estado original através da reversão do processo que ocasionou a mudança de estado.

O primeiro regime apresentado no diagrama da figura 2.4 a ser discutido é o derretimento “normal”. Nesse processo, há um aumento da entropia (o sistema absorve calor latente) e do volume molar quando o cristal se torna líquido. Neste caso, $S^l - S^s$ e $V^l - V^s$ são positivos, e portanto o valor da inclinação da curva de primeira ordem também é positivo. Na figura 2.4, este regime é representado pela curva CD . O derretimento “anômalo” ocorre quando o volume molar do líquido é menor do que o volume do sólido, tornando o valor da variação $V^l - V^s$ negativo. Como consequência, o valor do sinal da inclinação da curva de transição de primeira ordem também se torna negativo. Nesse caso, a temperatura de derretimento decresce quando a pressão aumenta. A curva BC representa essa situação. Nos intervalos AB e AD do lado esquerdo do diagrama da figura 2.4 ocorre o derretimento inverso, em que o aquecimento isobárico leva o sistema de uma fase líquida para uma fase cristalina. Se a transição envolve calor latente, para qualquer situação de derretimento inverso $S^l - S^s < 0$. Para o intervalo AD , $V^l - V^s$ é positivo (o volume do sólido é menor do que o do líquido). Em contrapartida, o intervalo AB mostra inclinação positiva, já que o sólido é menos denso que o líquido. Logo, de forma similar aos casos de derretimento “normal” e “anômalo”, há duas espécies de derretimento inverso, que são denotadas da seguinte forma: derretimento inverso dos tipos I e II , que correspondem aos intervalos AD e AB da figura 2.4, respectivamente.

2.3 Exemplos de derretimento e congelamento inverso

Nesta seção são mencionados alguns exemplos de sistemas que apresentam transições inversas. Estes exemplos são destacados na tabela 2.1.

Sistema	tipo de transição	ordem da transição	sinal de dP/dT
He_3	fluido \rightarrow bcc	primeira	-
He_4	superfluido \rightarrow hcp	primeira	-
Água	líquido \rightarrow amorfo	primeira	-
Supercondutividade	linhas de fluxo desordenado \rightarrow rede ordenada	primeira	+
Metilcelulose	líquido \rightarrow gel	primeira	-

Tabela 2.1: Sumário de alguns sistemas físicos que exibem congelamento ou derretimento inverso e características da transição. Tabela parcialmente extraída de Schupper e Shnerb (2005).

Isótopos de Hélio: Os isótopos He_3 e He_4 apresentam transições de primeira ordem que correspondem ao derretimento inverso de inclinação negativa (tipo I). Ambos os isótopos

mostram derretimento inverso em altas pressões e em baixas temperaturas ($T < 1K$). Contudo, há uma diferença entre estes isótopos relacionada ao caráter das fases líquida e sólida. Para He_4 , o líquido superfluido se torna um cristal hcp (“hexagonal close packed”) através de aquecimento. Para He_3 , o líquido normal se torna um cristal bcc (“body centered cubic”). Nesse caso, os graus de liberdade dos spins estão relativamente livres para se reorientar no cristal, portanto aumentando sua entropia em relação ao líquido.

Água: Em um diagrama hipotético apresentado por Mishima e Stanley (1998), abaixo de um segundo ponto crítico com coordenadas $T = 220K$ e $P = 100MPa$, a fase líquida se separa em duas fases líquidas distintas: uma fase líquida de baixa densidade (LBD) em baixas pressões e uma fase líquida de alta densidade (LAD) em altas pressões. Entre estes pontos, a água é uma mistura flutuante de moléculas cujas estruturas locais lembram as fases LBD e LAD. Uma pequena região entre $100MPa$ e $150MPa$ e temperaturas entre $-50^\circ C$ e $-100^\circ C$ exhibe derretimento inverso em que uma fase amorfa de baixa densidade se torna uma fase líquida de baixa densidade através de resfriamento.

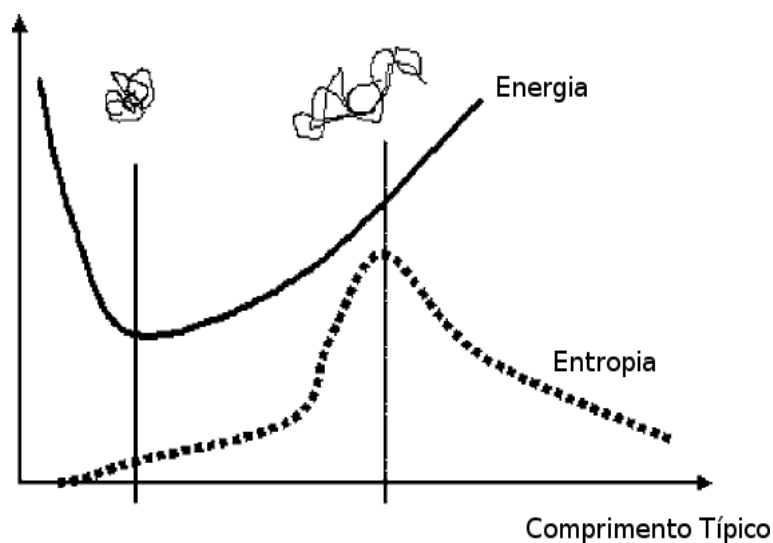


Figura 2.5: Esboço da dependência da energia e da entropia em função do comprimento linear de um polímero de metilcelulose em água. As conformações dobradas, não interagentes, são favorecidas energeticamente (devido a um número maior de interações favoráveis entre os constituintes de um único elo) e menos entrópicas (devido ao número limitado de conformações de polímero e/ou aos poucos graus de liberdade das moléculas de água que estão presas pelos constituintes hidrofóbicos de um elo). As conformações desdobradas (interagentes) apresentam energias mais altas, mas também admitem um número maior de configurações microscópicas, tal que estas se tornam favorecidas em temperaturas mais altas. (SCHUPPER; SHNERB, 2005).

Linhas de Vórtex em um supercondutor desordenado a alta temperatura: Uma transição de primeira ordem do tipo II entre os estados vidro-cristalino foi descoberta em uma rede formada por linhas de fluxo magnético no supercondutor de alta temperatura $Bi_2Sr_2CaCu_2O_8$ (BSCCO)(ERTAS; NELSON, 1996). A rede hexagonal ordenada tem maior entropia do que a

fase desordenada a baixa temperatura. A explicação sugerida para este fato é que a transição cristal-vidro é comandada pelo aprisionamento das linhas de fluxo à impurezas no cristal em baixas temperaturas. A competição entre flutuações térmicas e desordem por aprisionamento conduz ao derretimento inverso próximo ao ponto crítico.

Metilcelulose: A solução de metilcelulose em água é um dos exemplos de sistemas que apresenta congelamento inverso (CHEVILLARD; AXELOS, 1997). Quando uma solução (transparente e suave) de metilcelulose é aquecida (acima de 55 °C, para uma solução de 5 gramas/litro), esta se transforma em um gel branco. Esta transição é reversível, ou seja, perante resfriamento, a solução retorna ao estado natural. Neste exemplo, as conformações dobradas são favorecidas energeticamente. Por outro lado, as conformações desdobradas são favorecidas entropicamente (veja figura 2.5). O crescimento da entropia da conformação aberta pode ser relacionada ao número de possíveis configurações do polímero em si, mas também pode ser atribuída ao arranjo espacial das moléculas de água na vizinhança. Logo, o seguinte mecanismo é proposto para explicar transições inversas nesses sistemas: no estado líquido, as moléculas de água são mantidas em estruturas semelhantes a “gaiolas” formadas por constituintes hidrofóbicos que se movem na solução. Contudo, quando o gel é formado e os segmentos hidrofóbicos se agregam para formar elos em forma de cruz, as “gaiolas” são abertas, e as moléculas de água são livres para se movimentarem na rede. Como consequência, ambas entropia e a quantidade de configurações possíveis que eram baixas na fase líquida, acabam aumentando quando os agregados hidrofóbicos se reagrupam e formam o gel.

2.4 Modelo Magnético para descrição do derretimento inverso

Como já discutido, o surgimento do derretimento inverso ocorre quando $S^s - S^l > 0$, ou seja, quando a entropia do estado ordenado e interagente é maior do que a entropia do estado líquido não interagente. O modelo clássico Blume-Capel com $S_i = 0, \pm 1$ e definido pelo Hamiltoniano

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j + D \sum_{i=1}^N S_i^2, \quad (2.3)$$

pode ser utilizado no estudo de transições inversas. Basicamente, a justificativa para a utilização deste modelo na descrição de derretimento inverso é baseada em uma analogia entre o modelo BC e o polímero de metilcelulose (veja figura 2.5). O spin zero do modelo BC pode representar de forma esquemática o polímero espiral compacto não interagente e o polímero alongado (e interagente com seus vizinhos) pode ser representado pelos spins ± 1 . Quando

os polímeros estão alongados, há muitas configurações espaciais possíveis nas quais estes podem se anexar. Correspondentemente, há muitas configurações congeladas degeneradas (ou quase degeneradas) do gel. No modelo BC, estas configurações podem ser representadas pela degenerescência dos estados mais e menos. Adicionando uma vantagem entrópica através do parâmetro de degenerescência $r = l/k \geq 1$, em que l define a degenerescência dos estados com $S = 1$ ou $S = -1$ e k a degenerescência dos estados $S = 0$, ocorre o surgimento de derretimento inverso no modelo BC. Os resultados deste modelo modificado são independentes das degenerescências k e l , dependendo somente da proporção r .

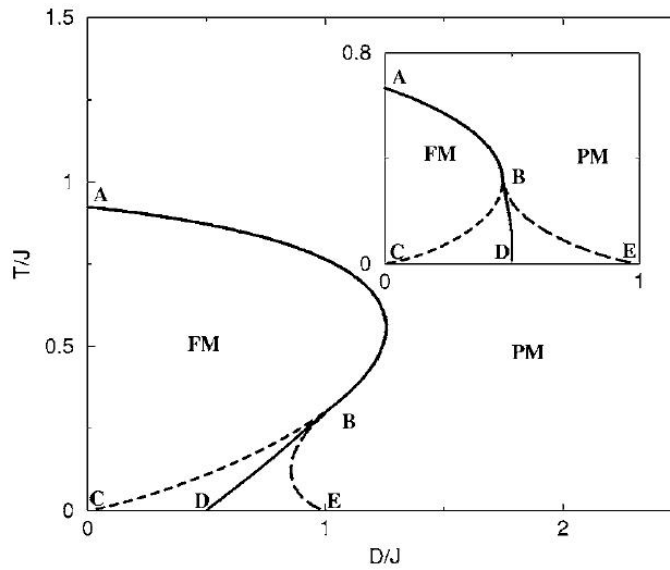


Figura 2.6: Diagramas de Fase do modelo BC no plano $D - T$ para $r = 1$ (figura menor, sem derretimento inverso) e para $r = 6$ (figura principal: mostra derretimento inverso) (SCHUPPER; SHNERB, 2005).

Os resultados do modelo BC original (caso $r = 1$) são mostrados no diagrama menor da figura 2.6. A linha AB representa uma transição de segunda ordem entre as fases paramagnética (PM), em que $M = 0$ e ferromagnética (FM), em que $M \neq 0$. Abaixo do ponto tricrítico (B), a transição de fase é de primeira ordem, com as linhas BC e BE representando as espinodais, isto é, as linhas que definem o limite de validade das soluções paramagnética e ferromagnética, respectivamente. A linha BD corresponde à linha de transição de primeira ordem. Nessa situação, o modelo BC não apresenta derretimento inverso. Os resultados mudam quando o valor da proporção r é modificado. Para $r = 6$, os estados interagentes tem maior entropia e a fase ferromagnética cobre uma área maior do diagrama de fase, um fato que reflete a vantagem entrópica. Nesse caso, as transições de primeira e segunda ordem são alteradas, indicando que o diagrama maior da figura 2.6 agora pode apresentar derretimento inverso do tipo I , anteriormente discutido na seção 2.4. Na seção 2.6, é apresentado um mo-

delo que trata de um congelamento inverso equivalente ao derretimento inverso do tipo I , em que a variação $S^{des} - S^{ord}$ e também o valor da inclinação da linha de transição de primeira ordem são negativos, fato este que indica uma transição inversa reentrante.

2.5 Modelo Sherrington-Kirkpatrick, métodos das Réplicas, solução com simetria de réplicas e quebra de simetria de réplicas em um passo

Esta seção tem como intuito estabelecer alguns conceitos envolvidos no tratamento da desordem do modelo clássico de vidro de spin Sherrington e Kirkpatrick (1978) (SK). Nesse modelo, com hamiltoniano definido por

$$\mathcal{H} = - \sum_{ij} J_{ij} S_i S_j, \quad (2.4)$$

a soma ij da equação (2.4) percorre todos os pares distintos de spins S_i , com S_i assumindo os valores ± 1 . J_{ij} é uma variável aleatória, que incorpora desordem e frustração ao modelo, e segue uma distribuição de probabilidade gaussiana dada por

$$P(J_{ij}) = \frac{1}{J} \sqrt{\frac{N}{2\pi}} \exp \left[-\frac{N}{2J^2} J_{ij}^2 \right], \quad (2.5)$$

em que J^2/N é a variância. Nesse problema, a termodinâmica do problema é obtida a partir da equação

$$\langle F(J) \rangle = -\frac{1}{\beta} \langle \ln Z(J) \rangle = -\frac{1}{\beta} \int dJ P(J) \ln Z(J), \quad (2.6)$$

em que $F(J)$ é a energia livre e $Z(J)$ é a função de partição. Há, contudo, uma complicada dependência de $\ln Z$ em relação a variável J_{ij} , que torna o cálculo da média sobre a desordem muito complicado. Para contornar esta situação, é utilizado o método das réplicas, que consiste na utilização da seguinte identidade

$$\langle \ln Z \rangle = \lim_{(n \rightarrow 0)} (\langle Z^n \rangle - 1)/n, \quad (2.7)$$

transformando assim $\langle \ln Z \rangle$ na média da função de partição replicada $\langle Z^n \rangle$. Para n inteiro, Z^n pode ser expresso como

$$Z^n = \prod_{\alpha=1}^n Z_{\alpha} \quad (2.8)$$

e α é um índice mudo. A utilização desta técnica facilita o cálculo de $\langle \ln Z \rangle$. O conjunto $\alpha = 1, \dots, n$ pode ser interpretado como réplicas idênticas do sistema real, compartilhando a mesma distribuição de probabilidade dos J_{ij} . Os procedimentos para o cálculo da média configuracional sobre a energia livre $F(J)$ utilizando o método das réplicas introduzem o parâmetro de ordem $q_{\alpha\beta} = \langle \frac{1}{N} \sum_i S_\alpha^i S_\beta^i \rangle$. Como é observada a dependência de $q_{\alpha\beta}$ em relação aos índices das réplicas, utiliza-se como primeira tentativa a solução com simetria de réplicas (SR). Nesta solução, o parâmetro de ordem $q_{\alpha\beta} = \langle \frac{1}{N} \sum_i S_\alpha^i S_\beta^i \rangle$ ($\alpha \neq \beta$), relacionado à caracterização da fase VS, é considerado como um elemento de uma matriz $n \times n$. Nessa matriz, todos os elementos, com exceção da diagonal principal, são iguais a q_0 para qualquer combinação de α e β , tal que

$$q_{\alpha\beta} = \begin{pmatrix} 0 & & & & & \\ & 0 & & & & \\ & & 0 & & & \\ & & & 0 & & \\ & & & & 0 & \\ q_0 & & & & & 0 \\ & & & & & & 0 \end{pmatrix} \quad (2.9)$$

Porém, a utilização deste “ansatz” no modelo SK apresenta o problema de entropia negativa em baixas temperaturas. Em uma tentativa para melhorar esta descrição, é utilizada a solução com quebra de simetria em um passo (1P-QSR)(PARISI, 1980). Nesta solução, divide-se a matriz das réplicas, que tem tamanho n , em n/m blocos, e o parâmetro $q_{\alpha\beta}$ assume dois valores distintos: $q_{\alpha\beta} = q_1$ se as réplicas α e β pertencem ao mesmo bloco e $q_{\alpha\beta} = q_0$ se as réplicas α e β pertencem a blocos diferentes. O seguinte exemplo corresponde ao caso $n = 6$ e $m = 3$.

$$q_{\alpha\beta} = \begin{pmatrix} 0 & q_1 & q_1 & & & \\ q_1 & 0 & q_1 & & & q_0 \\ q_1 & q_1 & 0 & & & \\ & & & 0 & q_1 & q_1 \\ & q_0 & & q_1 & 0 & q_1 \\ & & & q_1 & q_1 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.10)$$

Com uso desta solução no modelo SK, por exemplo, a entropia em $T = 0$ reduz seu valor de -0.16 na solução SR para -0.01 para 1P-QSR, o que indica uma sensível melhora nos

resultados quando obtidos por 1P-QSR.

2.6 Modelo para descrição do congelamento inverso.

No congelamento inverso, há o surgimento (reversível) de uma fase com características de vidro com o aumento da temperatura. O aparecimento de uma fase com tais características pode ser que obtida através do modelo Ghatak e Sherrington (GS) clássico de spin 1, que é definido pelo Hamiltoniano

$$H = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} S_i S_j + D \sum_i S_i^2. \quad (2.11)$$

Nesse modelo, S assume os valores $\pm 1, 0$ e a interação de troca J_{ij} é uma variável aleatória que segue uma distribuição de probabilidade Gaussiana. Crisanti e Leuzzi (2005) estudaram o modelo GS utilizando também a proporção de degenerescência r . Contudo, o resultado mais interessante ocorre para o caso spin 1, que é mostrado na figura 2.7, e que corresponde a situação $r = 1$, onde não há vantagem entrópica.

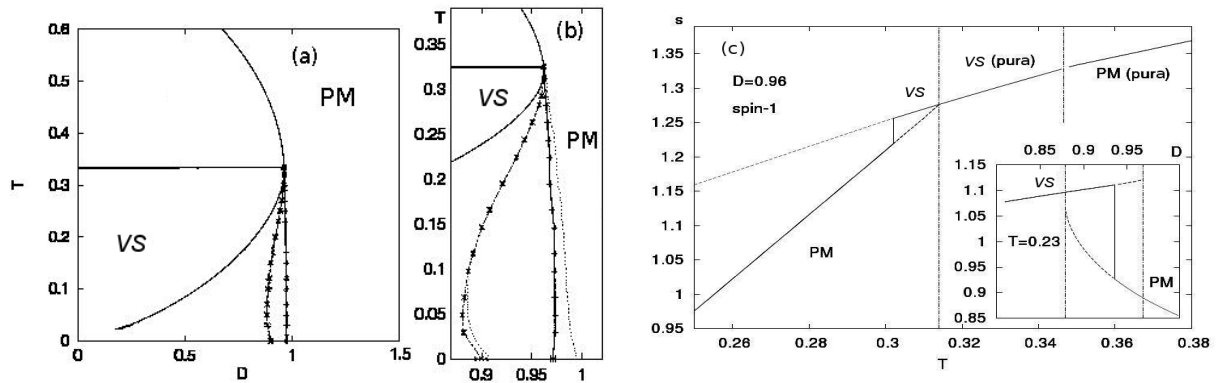


Figura 2.7: Diagrama de fases do modelo GS e entropia S vs T para $D = 0.96$. No diagrama, as linhas a direita correspondem a espinodal da solução vidro de spin para os casos SR (linha pontilhada) e QSR (tracejada-cruzada). A linha cheia à esquerda corresponde a espinodal da solução paramagnética. A linha central corresponde ao contorno de primeira ordem. Na figura da entropia S vs T , as regiões designadas por “VS(pura)” e “PM(pura)” não apresentam soluções paramagnética e vidro de spin, respectivamente. Crisanti e Leuzzi (2005)

No diagrama de fases T vs D da figura 2.7(a) (a figura 2.7(b) mostra em detalhes a transição de primeira ordem), as linhas pontilhadas e tracejadas-cruzadas representam as soluções com simetria de réplicas (SR) e com quebra de simetria de réplicas (QSR), respectivamente. Como se pode ver no detalhe da figura 2.7(b), o contorno de transição de primeira ordem (linha central) somente é afetado pela solução QSR em temperaturas muito baixas. Também é possível observar no diagrama uma reentrância logo abaixo do ponto tricrítico que

separa as transições de primeira e segunda ordem. Esta reentrância marca o surgimento de uma transição inversa, fato este comprovado pela análise da figura 2.7(c). Na figura 2.7(c), é mostrada a entropia S em função da temperatura T para $D = 0.96$. Logo abaixo da linha espinodal da solução PM ($T < 0.314$) há uma coexistência das soluções VS e PM. Nesse caso, o contorno de primeira ordem é obtido através da comparação das energias livres das soluções VS e PM. Percebe-se que abaixo da linha de transição de primeira ordem ($T_{1ord} = 0.302$), a entropia da fase PM é menor que a entropia da fase VS. Claramente, não há necessidade da introdução de qualquer vantagem entrópica através da degenerescência dos estados interagentes para que ocorra o aparecimento de congelamento inverso no modelo GS. Essa discussão nos leva ao próximo tópico, em que são apresentados modelos que agregam características semelhantes ao modelo GS e que são capazes de apresentar congelamento inverso.

2.7 Modelo vidro de spin fermiônico e mapeamento com o modelo GS

O modelo de vidro de spin Ising fermiônico (VSIF) é descrito pelo hamiltoniano

$$\hat{\mathcal{H}} = - \sum_{ij} J_{ij} \hat{S}_i \hat{S}_j - \mu \sum_i \hat{n}_i, \quad (2.12)$$

em que J_{ij} é uma variável aleatória com distribuição de probabilidade gaussiana. Neste modelo, diferentemente dos casos clássicos, os spins são escritos em termos de operadores fermiônicos que atuam sobre um espaço de Fock com quatro estados por sítio, dois deles não magnéticos $|00\rangle$ e $|\uparrow\downarrow\rangle$, e dois estados magnéticos $|\uparrow 0\rangle$, $|0 \downarrow\rangle$, e que são definidos de acordo com

$$\hat{S} = a_{\uparrow}^{\dagger} a_{\uparrow} - a_{\downarrow}^{\dagger} a_{\downarrow} \quad ; \quad \hat{n} = a_{\uparrow}^{\dagger} a_{\uparrow} + a_{\downarrow}^{\dagger} a_{\downarrow}, \quad (2.13)$$

sendo \hat{n} o número de ocupação. Neste modelo, o potencial químico μ tem como papel controlar a ocupação média de férmions por sítio e introduzir flutuações no número de ocupação (flutuações de carga). Devido a estas flutuações, o modelo VSIF no ensemble grão canônico mostra o surgimento de transições de primeira ordem para valores altos de potencial químico, fato este visto na figura 2.8, em que a vizinhança do ponto tricrítico (PTC) é mostrada em um diagrama T versus μ . Neste diagrama, a transição de segunda ordem ocorre na curva (a) acima do PTC. Abaixo de PTC, transições termodinâmicas de primeira ordem surgem sobre a curva (c). Contudo, apesar da demonstração por Rosenow e Oppermann (1996) da existência de transições de primeira ordem próximas ao PTC, não há, por parte dos autores,

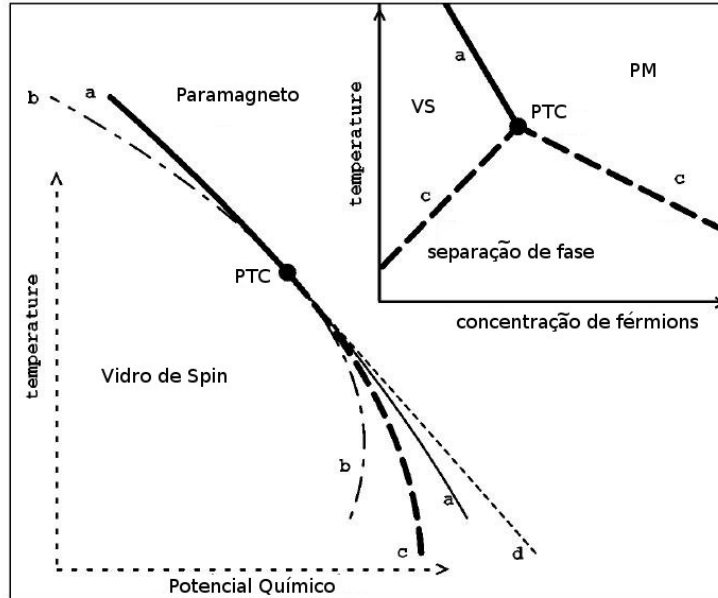


Figura 2.8: Vizinhanças do Ponto Tricrítico (PTC) para um potencial químico positivo. Acima de PTC ocorre uma transição de segunda ordem entre as fases paramagnética e vidro de spin. Abaixo de PTC surge uma transição de primeira ordem. A linha d define o limite de validade da solução vidro de spin e a linha b define o limite de validade da solução paramagnética (ROSENOW; OPPERMANN, 1996).

a apresentação de um critério claro que permita a localização destas transições para valores distantes do PTC. As curvas (b) e (d) limitam a região de existência das fases ordenadas.

De acordo com Feldmann e Oppermann (1999), as propriedades termodinâmicas dos modelos VSIF no ensemble grão canônico e GS estão diretamente relacionadas através de um mapeamento entre o parâmetro anisotrópico D e o potencial químico μ , definido pela equação

$$e^{\beta D} = e^{\beta \mu} + e^{-\beta \mu}. \quad (2.14)$$

Como consequência direta da equação (2.14), é natural que, através deste mapeamento, seja possível comparar resultados gerais obtidos no modelo VSIF com aqueles obtidos no modelo GS. Dentro deste contexto, é esperado que o modelo VSIF no ensemble grão canônico seja também capaz de apresentar transições inversas.

2.8 Modelo Hopfield

O modelo Hopfield (AMIT, 1989) de um sistema de N spin Ising é dado pelo Hamiltoniano

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{ij} J_{ij} S_i S_j, \quad (2.15)$$

em que a interação entre os spins é dada através da regra de Hebb

$$J_{ij} = \frac{J}{2N} \sum_{\mu=1}^p \xi_i^\mu \xi_j^\mu, \quad (2.16)$$

onde $\xi_i^\mu = \pm 1$ são variáveis aleatórias distribuídas independentemente e S_i são variáveis de spin que assumem os valores ± 1 . Um conjunto de padrões p de ξ_i^μ representa certas configurações do sistema que estão armazenadas. Para um número finito de padrões p armazenados, a função de partição obtida do Hamiltoniano (2.15) com a regra de Hebb (2.16) é igual a

$$Z = \text{Tr} \exp \left(\frac{\beta}{2N} \sum_{\mu} \left(\sum_i S_i \xi_i^\mu \right)^2 \right), \quad (2.17)$$

em que Tr é a soma sobre S . A partir da linearização do termo quadrático em (2.17), Z pode ser escrita como

$$Z = \text{Tr} \int \prod_{\mu=1}^p dm^\mu \exp \left\{ -\frac{1}{2} N \beta \sum_{\mu} m_\mu^2 + \beta \sum_{\mu} m_\mu \sum_i S_i \xi_i^\mu \right\}. \quad (2.18)$$

No limite termodinâmico de $N \rightarrow \infty$, a integral é calculada pelo método “steepest descent” e a energia livre assume a forma

$$f = \sum_{\mu} \frac{m_\mu^2}{2} - \frac{1}{\beta} \left\langle \left\langle \sum_{\mu} \log(2 \cosh \beta m_\mu \xi^\mu) \right\rangle \right\rangle_{\xi}, \quad (2.19)$$

em que $\langle \langle \dots \rangle \rangle$ indica a média sobre ξ . A condição de extremização da energia livre (2.19) resulta na equação de estado

$$m_\mu = \langle \langle \xi^\mu \tanh(\beta m_\mu \xi^\mu) \rangle \rangle. \quad (2.20)$$

O significado físico do parâmetro de ordem m_μ é mostrado a partir da condição ponto de sela da equação (2.18) para N grande

$$m_\mu = \frac{1}{N} \sum_i S_i \xi_i^\mu. \quad (2.21)$$

Esta equação mostra que m_μ representa a sobreposição entre o μ -ésimo padrão armazenado e o estado do sistema. Se o estado do sistema está em perfeita coincidência com o μ -ésimo padrão ($S_i = \xi_i^\mu$), então $m_\mu = 1$, o que indica a recuperação do padrão inicialmente armazenado (solução de recuperação). Por outro lado, na total ausência de correlação, S_i assume os valores

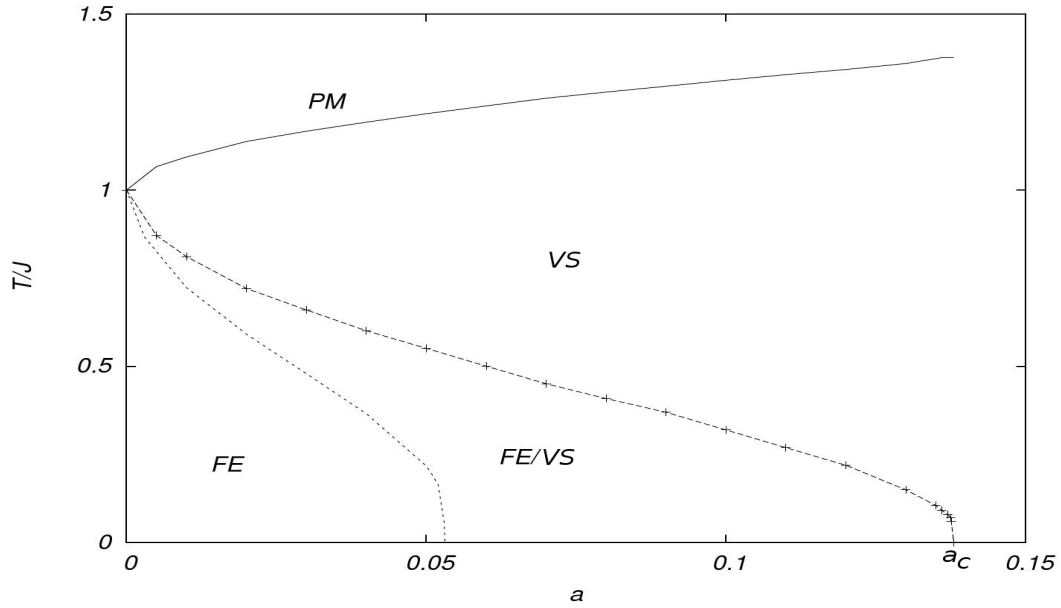


Figura 2.9: Diagrama de fases T vs a . A linha cheia representa uma transição de segunda ordem entre as fases paramagnética (PM) e vidro de spin (VS), a linha pontilhada tracejada-pontilhada representa a espinodal da solução ferromagnética (FE) e a linha tracejada representa uma transição de primeira ordem entre as fases FE e VS.

± 1 independentemente de ξ_i^μ . Como consequência, $m_\mu = 0$ (sem recuperação). Isso mostra que a recuperação do μ -ésimo padrão armazenado é medido pelo parâmetro de ordem m_μ . Em outras palavras, no modelo Hopfield, para um dado número finito de padrões armazenados e em temperaturas não muito altas, ocorre a recuperação do padrão armazenado quando uma versão um pouco diferente deste padrão é dada como condição inicial.

No caso de p finito ($p \ll N$), a equação de estado (2.20) já apresenta muitas soluções possíveis. Nessa situação, há uma única solução de recuperação estável. Todos os outros padrões recuperados são instáveis (NISHIMORI, 2001). No entanto, para valores ainda maiores de p , mais e mais soluções aparecem, e quando p alcança a ordem de N , uma fase vidro de spin surge, na qual o estado do sistema é congelado aleatoriamente no sentido de que este não apresenta correlação com os padrões armazenados (essencialmente, há o surgimento de muitos mínimos locais da energia livre e um estado fundamental altamente degenerado).

Para p da ordem de N , um tratamento analítico mais cuidadoso (quando comparado ao caso $p \ll N$) se faz necessário. Nessa situação, o método das réplicas é utilizado. Como resultado, a figura 2.9 é obtida e mostra que para $a = p/N = 0$, ocorre somente a transição entre as fases FE (estado de Mattis, o qual apresenta uma termodinâmica similar ao ferromagnetismo usual (AMIT, 1989)) e PM. Uma fase VS surge quando $a \neq 0$. Para esta situação, valores maiores de $a = p/N$ favorecem a fase VS e suprimem a fase FE. Se a proporção $a = p/N$ excede o valor a_c , a fase vidro de spin se torna a única solução estável em baixas

temperaturas. Devido ao parâmetro $a = p/N$, o modelo Hopfield possibilita a análise dos efeitos da frustração e o seu papel para o surgimento do congelamento inverso.

3 MODELOS FERMIÔNICOS

Nesta seção, os modelos fermiônicos de vidro de spin Ising de alcance infinito (VSIF) e Hopfield vidro de spin Ising (HVSIF) são apresentados. Na formulação fermiônica, os spins são representados pela combinação bilinear de operadores fermiônicos. Nesse caso, os operadores de spin atuam em um espaço com quatro auto-estados por sítio; um ocupado com spin para cima, outro ocupado com spin para baixo, e dois estados não magnéticos, um deles não ocupado e o outro duplamente ocupado (neste trabalho, diluição significa justamente o favorecimento dos estados não magnéticos). Além disso, um campo magnético perpendicular aos operadores de spin no eixo z , conhecido como campo magnético transverso, é acrescentado em ambos os modelos. Devido a formulação fermiônica, os modelos VSIF e HVSIF podem ser apresentados em duas versões. Na primeira versão, conhecida como modelo $2S$, ou de dois estados, um vínculo descarta os estados não magnéticos, possibilitando a utilização de uma formulação fermiônica para o problema vidro de spin $1/2$. Já no modelo fermiônico $4S$, ou de quatro estados, não há restrição quanto ao número de estados por sítio, e a introdução de um potencial químico, naturalmente descrito em sistemas grande canônicos, permite flutuações de carga no sistema e possibilita observar comportamentos interessantes nas transições de fase. Este capítulo é distribuído da seguinte maneira: na seção seguinte, é discutido o papel do campo transverso em modelos fermiônicos. Na seção 3.2, a formulação fermiônica e o formalismo em segunda quantização são apresentados. As últimas seções são reservadas para os cálculos dos modelos VSIF e HVSIF utilizando as soluções com simetria de réplicas e com um passo de quebra de simetria de réplicas.

3.1 O papel do campo transverso Γ em modelos fermiônicos

Para campo magnético transverso $\Gamma = 0$, os operadores que compõem o Hamiltoniano comutam, fato que muda quando $\Gamma \neq 0$, em que não há comutatividade dos operadores que compõem o Hamiltoniano \hat{H} . Logo, um Γ finito oferece a possibilidade de tunelamento através das barreiras de energia livre que determinam a dinâmica de modelos vidros de spin. Desta forma, a presença de um campo magnético transverso Γ possibilita a introdução de flutuações de natureza quântica. Dentro deste contexto, é importante salientar que os momentos magnéticos são predominantemente governados através de flutuações térmicas em altas temperaturas, e por este motivo, flutuações de natureza quântica podem ser desprezadas. Entre-

tanto, próximo a $T = 0$, flutuações quânticas passam a ser relevantes, e o campo transversal desempenha o importante papel de mecanismo de “flipagem” dos spins a baixas temperaturas, podendo levar a temperatura de transição T_f a um ponto crítico quântico (PCQ), em que a transição de fase se dá à temperatura nula. Utilizando a formulação fermiônica, Theumann, Schmidt e Magalhaes (2002) obtiveram um resultado mostrando que o aumento de Γ diminui a temperatura de congelamento até o PCQ. Experimentalmente, o efeito do campo transversal é observado em ligas de $LiHo_xY_{1-x}F_4$ (WU et al., 1991). Em relação ao presente trabalho, a utilização de um campo magnético transversal Γ permitirá observar a influência das flutuações quânticas sobre o comportamento das transições inversas nos modelos VSIF e HVSIF.

3.2 Formulação fermiônica e o formalismo em segunda quantização

A representação fermiônica dos modelos Sherrington e Kirkpatrick (1978) (SK) e Hopfield, além de permitir estudar o problema vidro de spin em presença de flutuações quânticas e de carga, permite também estudar a competição entre o estado vidro de spin e outros acoplamentos entre férmions como, por exemplo, supercondutividade. Nesta formulação, os operadores de spins são escritos como uma combinação bilinear de operadores fermiônicos. Este tipo de formalismo tem como vantagem introduzir uma representação conveniente para estados de muitos corpos (a formulação fermiônica é utilizada em outros modelos, como por exemplo no modelo van-Hemmen fermiônico (MAGALHAES; ZIMMER; MORAIS, 2010)). Nessa representação, os modelos VSIF e HVSIF são definidos pelo seguinte hamiltoniano:

$$\hat{H} = - \sum_{ij} J_{ij} \hat{S}_i^z \hat{S}_j^z - 2\Gamma \sum_i \hat{S}_i^x. \quad (3.1)$$

Neste caso, \hat{S} é um operador de spin escrito como uma função bilinear de operadores de criação e destruição. Os operadores de spin da equação (3.1) são definidos como:

$$\hat{S}_i^z = \frac{1}{2}[\hat{n}_{i\uparrow} - \hat{n}_{i\downarrow}] \quad ; \quad \hat{S}_i^x = \frac{1}{2}[c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow} + c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\uparrow}], \quad (3.2)$$

sendo $\hat{n}_i = c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}$ o operador número de ocupação, $c_{i\sigma}^\dagger$ ($c_{i\sigma}$) os operadores de criação (destruição), com $\sigma = \uparrow$ ou \downarrow indicando as projeções dos spins. No modelo VSIF, J_{ij} é uma variável aleatória com distribuição de probabilidade Gaussiana. No modelo Hopfield, J_{ij} segue a regra de Hebb.

Na formulação fermiônica, os modelos VSIF e HVSIF podem ser apresentados em

duas versões; a versão conhecida como modelo $4S$, com quatro auto-estados por sítio, e a versão conhecida como modelo $2S$, com dois auto-estados por sítio. No modelo de quatro auto-estados, dois deles são não magnéticos. Porém, no modelo conhecido como $2S$, estes auto-estados não magnéticos são descartados com a introdução de um vínculo que fixa o número de ocupação $\hat{n}_{i\uparrow} + \hat{n}_{i\downarrow} = 1$, através de uma integral de vínculo em cada sítio. Nesta seção, os dois modelos são apresentados, mas somente os resultados para o modelo $4S$ são discutidos. Resultados para o modelo $2S$ sem campo transversal são utilizados somente para comparação com resultados clássicos conhecidos. A formulação das integrais de caminho com variáveis de Grassmann, comumente utilizada para descrever sistemas fermiônicos, é aplicada na solução deste problema. A função de partição no ensemble grande canônico, descrita para o modelo de quatro estados, é definida por

$$Z_{4S} = \text{Tr} e^{-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})}. \quad (3.3)$$

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

$$Z_{2S} = \text{Tr} \left[e^{-\beta\hat{H}} \prod_j \delta(\hat{n}_{j\uparrow} + \hat{n}_{j\downarrow} - 1) \right]. \quad (3.4)$$

Utilizando a representação integral para função δ de Kronecker

$$\delta(\hat{n}_{j\uparrow} + \hat{n}_{j\downarrow} - 1) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} dx_j e^{ix_j[\hat{n}_{j\uparrow} + \hat{n}_{j\downarrow} - 1]}, \quad (3.5)$$

é possível escrever uma função de partição generalizada, que descreve ambos os modelos, e é dada pela equação

$$Z\{\mu\} = \int D(\phi^* \phi) e^{(\frac{s-2}{2})N\beta\mu} \prod_j \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} dx_j e^{-y_j} e^{A\{\mu\}}, \quad (3.6)$$

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

$$A\{\mu\} = \int_0^\beta d\tau \left[\sum_{j\sigma} \phi_{j\sigma}^*(\tau) \left(-\frac{\partial}{\partial\tau} + \frac{y_j}{\beta} \right) \phi_{j\sigma}(\tau) - H(\phi_{j\sigma}^*(\tau), \phi_{j\sigma}(\tau)) \right], \quad (3.7)$$

em que ϕ^* e ϕ são variáveis de Grassmann e estão associadas aos operadores a^\dagger e a (ver Negele e Orland (1988)). As variáveis s e y_i foram introduzidas nas equações (3.7) e (3.6) para representar a função de partição generalizada. Para a função de partição no modelo $4S$,

que tem dois estados magnéticos ($|\uparrow 0\rangle, |\downarrow 0\rangle$) e dois estados não magnéticos ($|00\rangle, |\downarrow\uparrow\rangle$), escolhe-se $s = 4$ e $y_i = \beta\mu$ de tal forma que o termo $e^{(\frac{s-2}{2})N\beta\mu}$ se cancela com a exponencial do vínculo, reduzindo a função de partição a

$$Z_{4S} \{\mu\} = \int D(\phi^* \phi) e^{A_{4S} \{\mu\}}, \quad (3.8)$$

com

$$A_{4S} \{\mu\} = \int_0^\beta d\tau \left[\sum_{j\sigma} \phi_{j\sigma}^*(\tau) \left(-\frac{\partial}{\partial\tau} + \mu \right) \phi_{j\sigma}(\tau) - H(\phi_{j\sigma}^*(\tau), \phi_{j\sigma}(\tau)) \right]. \quad (3.9)$$

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

$$Z_{2S} \{\mu\} = \int D(\phi^* \phi) \prod_j \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} dx_j e^{-x_j} e^{A_{2S} \{\mu\}} \quad (3.10)$$

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

$$A_{2S} \{\mu\} = \int_0^\beta d\tau \left[\sum_{j\sigma} \phi_{j\sigma}^*(\tau) \left(-\frac{\partial}{\partial\tau} + \frac{ix_j}{\beta} \right) \phi_{j\sigma}(\tau) - H(\phi_{j\sigma}^*(\tau), \phi_{j\sigma}(\tau)) \right]. \quad (3.11)$$

Na equação (3.7), $H(\phi_{i\sigma}^*(\tau), \phi_{i\sigma}(\tau))$ é definido por

$$H(\phi_{i\sigma}^*(\tau), \phi_{i\sigma}(\tau)) = -\frac{1}{4} \sum_{ij} J_{ij} \sum_{\sigma\sigma'} \sigma\sigma' \phi_{i\sigma}^*(\tau) \phi_{i\sigma}(\tau) \phi_{j\sigma'}^*(\tau) \phi_{j\sigma'}(\tau) - \sum_{j\sigma} \Gamma \phi_{j\sigma}^*(\tau) \phi_{j-\sigma}(\tau). \quad (3.12)$$

A equação (3.7) pode ser separada em duas partes

$$A \{\mu\} = A_\Gamma + A_{SG} \quad (3.13)$$

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

$$A_\Gamma = \int_0^\beta d\tau \sum_{j\sigma} \left[\phi_{j\sigma}^*(\tau) \left(-\frac{\partial}{\partial\tau} + \frac{y_j}{\beta} \right) \phi_{j\sigma}(\tau) + \Gamma \phi_{j\sigma}^*(\tau) \phi_{j-\sigma}(\tau) \right] \quad (3.14)$$

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

$$A_{SG} = \frac{1}{4} \sum_{ij} J_{ij} \sum_{\sigma\sigma'} \sigma\sigma' \phi_{i\sigma}^*(\tau) \phi_{i\sigma}(\tau) \phi_{j\sigma'}^*(\tau) \phi_{j\sigma'}(\tau). \quad (3.15)$$

Para problemas que são invariantes no tempo ou que têm uma função temporal periódica em

um intervalo que vai de 0 a β , é conveniente utilizar a transformada de Fourier do espaço τ para o espaço das frequências

$$\phi_{j\sigma}^*(\tau) = \sum_{\omega_n} e^{\frac{i\omega_n\tau}{\beta}} \phi_{j\sigma}(\omega_n) \quad ; \quad \phi_{j\sigma}(\tau) = \sum_{\omega_m} e^{-\frac{i\omega_m\tau}{\beta}} \phi_{j\sigma}(\omega_m) . \quad (3.16)$$

Utilizando a transformada de Fourier primeiramente na equação (3.14), A_Γ é reescrito em função das frequências de Matsubara (THEUMANN; Gusmão, 1984; THEUMANN; SCHMIDT; MAGALHAES, 2002)

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

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

$$\begin{aligned} A_{SG} &= \sum_{pq,rs} \int_0^\beta d\tau \exp\left(\frac{i(\omega_p - \omega_q)\tau}{\beta} - \frac{i(\omega_r - \omega_s)\tau}{\beta}\right) \\ &\times \left\{ \frac{1}{4} \sum_{ij} J_{ij} \sum_{\sigma\sigma'} \sigma\sigma' \phi_{i\sigma}^*(\omega_p) \phi_{i\sigma}(\omega_q) \phi_{j\sigma'}^*(\omega_s) \phi_{j\sigma'}(\omega_r) \right\} . \quad (3.17) \end{aligned}$$

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

$$\Omega_\gamma = \omega_p - \omega_q \quad ; \quad \Omega_\nu = \omega_r - \omega_s \quad (3.18)$$

de tal forma que a seguinte expressão é obtida:

$$\begin{aligned} A_{SG} &= \sum_{\gamma q, \nu r} \int_0^\beta d\tau \exp\left(\frac{i\Omega_\gamma\tau}{\beta} - \frac{i\Omega_\nu\tau}{\beta}\right) \\ &\times \left\{ \frac{1}{4} \sum_{ij} J_{ij} \sum_{\sigma\sigma'} \sigma\sigma' \phi_{i\sigma}^*(\Omega_\gamma + \omega_q) \phi_{i\sigma}(\omega_q) \phi_{j\sigma'}^*(\omega_r - \Omega_\nu) \phi_{j\sigma'}(\omega_r) \right\} . \quad (3.19) \end{aligned}$$

Com isso, as integrais que surgem nas equações (3.17) e (3.19) são calculadas com a utilização da seguinte identidade:

$$\int_{-L}^L \exp\left(\frac{in\pi x}{L} - \frac{im\pi x}{L}\right) dx = \begin{cases} 0 & \text{se } m \neq n \\ 2L & \text{se } m = n. \end{cases} \quad (3.20)$$

A expressão resultante após a utilização da identidade (3.20) em A_Γ é definida pela equação

$$A_\Gamma = \sum_{j\sigma} \sum_n [\phi_{j\sigma}^*(\omega_n) (i\omega_n + y_j) \phi_{j\sigma}(\omega_n) + \phi_{j\sigma}^*(\omega_n) \beta\Gamma \phi_{j-\sigma}(\omega_n)] \quad (3.21)$$

Finalmente, a expressão (3.21) pode ser escrita em uma representação matricial

$$A_\Gamma = \sum_j \sum_n \begin{bmatrix} \phi_{j\uparrow}^*(\omega_n) & \phi_{j\downarrow}^*(\omega_n) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} i\omega_n + y_j & \beta\Gamma \\ \beta\Gamma & i\omega_n + y_j \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \phi_{j\uparrow}(\omega_n) \\ \phi_{j\downarrow}(\omega_n) \end{bmatrix}. \quad (3.22)$$

As matrizes da expressão (3.22) são conhecidas como espinores, e definidas da seguinte forma:

$$\underline{\phi}_j^\dagger(\omega_n) = \begin{bmatrix} \phi_{j\uparrow}^*(\omega_n) & \phi_{j\downarrow}^*(\omega_n) \end{bmatrix} ; \quad \underline{\phi}_j(\omega_n) = \begin{bmatrix} \phi_{j\uparrow}(\omega_n) \\ \phi_{j\downarrow}(\omega_n) \end{bmatrix}. \quad (3.23)$$

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

$$A_\Gamma = \sum_j \sum_n \underline{\phi}_j^\dagger(\omega_n) \gamma_j^{-1} \underline{\phi}_j(\omega_n). \quad (3.24)$$

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

$$\underline{\sigma}^x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} ; \quad \underline{\sigma}^y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} ; \quad \underline{\sigma}^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (3.25)$$

sendo γ_j^{-1} definido por

$$\gamma_j^{-1} = (i\omega_n + y_j) I + \beta\Gamma \underline{\sigma}^x, \quad (3.26)$$

em que I é a matriz identidade. Similarmente, a expressão para A_{SG} após a integração toma a seguinte forma:

$$A_{SG} = \sum_{ij} \beta J_{ij} \sum_\gamma \frac{1}{2} \sum_{\sigma q} \sigma \phi_{i\sigma}^*(\Omega_\gamma + \omega_q) \phi_{i\sigma}(\omega_q) \frac{1}{2} \sum_{\sigma' r} \sigma' \phi_{j\sigma'}^*(\omega_r - \Omega_\gamma) \phi_{j\sigma'}(\omega_r). \quad (3.27)$$

em que σ indica a projeção dos spin, com $\sigma = \uparrow$ ou \downarrow . Introduzindo a notação

$$S_i^z(\Omega_\gamma) = \frac{1}{2} \sum_{\sigma q} \sigma \phi_{i\sigma}^*(\Omega_\gamma + \omega_q) \phi_{i\sigma}(\omega_q) ; \quad S_j^z(-\Omega_\gamma) = \frac{1}{2} \sum_{\sigma' r} \sigma' \phi_{j\sigma'}^*(\omega_r - \Omega_\gamma) \phi_{j\sigma'}(\omega_r) \quad (3.28)$$

para representar a equação (3.27), A_{SG} assume o seguinte formato

$$A_{SG} = \sum_{\gamma} \sum_{ij} \beta J_{ij} S_i^z(\Omega_{\gamma}) S_j^z(-\Omega_{\gamma}). \quad (3.29)$$

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

$$S_i^z(\Omega_{\gamma}) = \begin{bmatrix} \phi_{i\uparrow}^*(\Omega_{\gamma} + \omega_q) & \phi_{i\downarrow}^*(\Omega_{\gamma} + \omega_q) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \phi_{i\uparrow}(\omega_q) \\ \phi_{i\downarrow}(\omega_q) \end{bmatrix} \quad (3.30)$$

e

$$S_j^z(-\Omega_{\gamma}) = \begin{bmatrix} \phi_{j\uparrow}^*(\omega_r - \Omega_{\gamma}) & \phi_{j\downarrow}^*(\omega_r - \Omega_{\gamma}) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \phi_{j\uparrow}(\omega_r) \\ \phi_{j\downarrow}(\omega_r) \end{bmatrix}. \quad (3.31)$$

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

$$S_i^z(\Omega) = \frac{1}{2} \sum_q \phi_i^{\dagger}(\omega_q + \Omega_{\gamma}) \underline{\sigma}^z \phi_i(\omega_q) \quad ; \quad S_j^z(-\Omega) = \frac{1}{2} \sum_r \phi_j^{\dagger}(\omega_r - \Omega_{\gamma}) \underline{\sigma}^z \phi_j(\omega_r) \quad (3.32)$$

sendo ω e Ω funções periódicas e antiperiódicas definidas por $\omega_m = (2m)\pi$ e $\Omega_n = (2n + 1)\pi$, respectivamente. Na aproximação estática, as flutuações no tempo das correlações spin-spin são desprezadas. Neste caso, o termo Ω_{γ} assume o valor nulo na equação (3.29), o que resulta na obtenção da componente estática da parte vidro de spin

$$A_{SG}^{st} = \sum_{ij} \beta J_{ij} S_i^z(0) S_j^z(0) \quad (3.33)$$

com

$$S_i^z(0) = \frac{1}{2} \sum_q \phi_i^{\dagger}(\omega_q) \underline{\sigma}^z \phi_i(\omega_q) \quad ; \quad S_j^z(0) = \frac{1}{2} \sum_r \phi_j^{\dagger}(\omega_r) \underline{\sigma}^z \phi_j(\omega_r). \quad (3.34)$$

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

$$A\{\mu\} = \sum_j \sum_n \phi_j^{\dagger}(\omega_n) \gamma_j^{-1} \phi_j(\omega_n) + \sum_{ij} \beta J_{ij} S_i^z(0) S_j^z(0). \quad (3.35)$$

3.3 Modelo Vidro de Spin Ising Fermiônico com Campo Transverso

No modelo vidro de spin Ising fermiônico, desordem não trivial que leva a frustração é introduzida através da variável aleatória J_{ij} , que neste modelo segue uma distribuição de

probabilidade gaussiana:

$$P(J_{ij}) = (N/32\pi J^2)^{1/2} \exp(-N J_{ij}^2/32J^2). \quad (3.36)$$

Uma vez que a função de partição foi calculada no formalismo de segunda quantização na seção anterior, a partir daqui é possível prosseguir com o procedimento padrão para obtenção da média configuracional da energia livre por sítio usando o formalismo das réplicas.

$$\beta\Omega = \lim_{N \rightarrow \infty} \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{Nn} [1 - Z^n]. \quad (3.37)$$

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

$$Z(n) = \int \prod_{ij} P(J_{ij}) dJ_{ij} \int \prod_{\alpha} D(\phi_{\alpha}^{\dagger} \phi_{\alpha}) e^{(\frac{s-2}{2})N\beta\mu_{\alpha}} \prod_j \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} dx_{j\alpha} e^{-y_{j\alpha}} e^{A_{\alpha}\{\mu\}}, \quad (3.38)$$

com $Z^n = Z(n)$ e

$$A_{\alpha}\{\mu\} = \sum_{\alpha j} \sum_n \phi_{\alpha j}^{\dagger}(\omega_n) \gamma_j^{-1} \phi_{\alpha j}(\omega_n) + \sum_{\alpha} \sum_{ij} \beta J_{ij} S_{\alpha i}^z(0) S_{\alpha j}^z(0), \quad (3.39)$$

sendo $\alpha = 1 \dots n$ o índice de réplicas. A integral sobre J_{ij} pode ser calculada independentemente para cada par (ij) utilizando a distribuição de probabilidade da equação (3.36), e resulta em

$$\begin{aligned} Z(n) &= \int \prod_{\alpha} D(\phi_{\alpha}^{\dagger} \phi_{\alpha}) e^{(\frac{s-2}{2})N\beta\mu_{\alpha}} \prod_j \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} dx_{j\alpha} e^{-y_{j\alpha}} \\ &\times \exp \left[\sum_{\alpha j} \sum_n \phi_{\alpha j}^{\dagger}(\omega_n) \gamma_j^{-1} \phi_{\alpha j}(\omega_n) + \frac{8\beta^2 J^2}{N} \sum_{(ij)} \left(\sum_{\alpha} S_{i\alpha}^z S_{j\alpha}^z \right)^2 \right], \end{aligned} \quad (3.40)$$

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

$$\sum_{(ij)} \left(\sum_{\alpha} S_{i\alpha}^z S_{j\alpha}^z \right)^2 = \sum_{\alpha} \sum_{(ij)} (S_{i\alpha}^z)^2 (S_{j\alpha}^z)^2 + 2 \sum_{(\alpha\beta)} \sum_{(ij)} S_{i\alpha}^z S_{i\beta}^z S_{j\alpha}^z S_{j\beta}^z. \quad (3.41)$$

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

da soma sobre dois sítios para a soma sobre apenas um sítio

$$\begin{aligned} \sum_{(ij)} (S_{i\alpha}^z)^2 (S_{j\alpha}^z)^2 &= \left[\left(\sum_j (S_{j\alpha}^z)^2 \right)^2 - \sum_j ((S_{j\alpha}^z)^2)^2 \right], \\ \sum_{(ij)} S_{i\alpha}^z S_{j\beta}^z S_{i\alpha}^z S_{j\beta}^z &= \left[\left(\sum_j S_{j\alpha}^z S_{j\beta}^z \right)^2 - \sum_j (S_{j\alpha}^z S_{j\beta}^z)^2 \right], \end{aligned} \quad (3.42)$$

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

$$\sum_{(ij)} (S_{i\alpha}^z)^2 (S_{j\alpha}^z)^2 \simeq \left[\left(\sum_j (S_{j\alpha}^z)^2 \right)^2 \right] ; \quad \sum_{(ij)} S_{i\alpha}^z S_{j\beta}^z S_{i\alpha}^z S_{j\beta}^z \simeq \left[\left(\sum_j S_{j\alpha}^z S_{j\beta}^z \right)^2 \right]. \quad (3.43)$$

A função de partição toma a seguinte forma

$$\begin{aligned} Z(n) &= \int \prod_{\alpha} D(\phi_{\alpha}^{\dagger} \phi_{\alpha}) e^{(\frac{s-2}{2})N\beta\mu_{\alpha}} \prod_j \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} dx_{j\alpha} e^{-y_{j\alpha}} \\ &\times \exp \left[\sum_{\alpha j} A_{\alpha j}^0 + \frac{8\beta^2 J^2}{N} \sum_{\alpha} \left(\sum_j (S_{j\alpha}^z)^2 \right) + \frac{16\beta^2 J^2}{N} \sum_{(\alpha\beta)} \left(\sum_j S_{j\alpha}^z S_{j\beta}^z \right)^2 \right] \end{aligned} \quad (3.44)$$

com

$$A_{\alpha j}^0 = \sum_n \phi_{-j\alpha}^{\dagger}(\omega_n) \gamma_j^{-1} \phi_{j\alpha}(\omega_n). \quad (3.45)$$

Com a redução da soma sobre dois sítios para a soma sobre um sítio na equação (3.44), há a introdução de termos quadráticos à função de partição. Para resolver este problema, é utilizada a transformação de Hubbard-Stratonovich,

$$\exp \left(\frac{a^2}{2} \right) = \sqrt{\frac{1}{2\pi}} \int dx \exp \left[-\frac{x^2}{2} + xa \right]. \quad (3.46)$$

Utilizando a identidade (3.46) para reescrever os termos quadráticos da função de partição da equação (3.44), as seguintes expressões são obtidas:

$$e^{\frac{8(\beta J)^2}{N} \sum_{\alpha} (\sum_j (S_{j\alpha}^z)^2)^2} = \sqrt{\frac{N(\beta J)^2}{2\pi}} \int \prod_{\alpha} dq_{\alpha} e^{[-\frac{N(\beta J)^2}{2} \sum_{\alpha} q_{\alpha}^2 + 4(\beta J)^2 \sum_{j\alpha} q_{\alpha} (S_{j\alpha}^z)^2]} \quad (3.47)$$

e

$$e^{\frac{16(\beta J)^2}{N} \sum_{\alpha\beta} (\sum_j S_{j\alpha}^z S_{j\beta}^z)^2} = \sqrt{\frac{N(\beta J)^2/2}{2\pi}} \int \prod_{(\alpha\beta)} dq_{\alpha\beta} e^{[-N(\beta J)^2 \sum_{(\alpha\beta)} q_{\alpha\beta}^2 + 8(\beta J)^2 \sum_{j\alpha\beta} q_{\alpha\beta} S_{j\alpha}^z S_{j\beta}^z]}. \quad (3.48)$$

A partir da identidade (3.46), os campos auxiliares q_α e $q_{\alpha\beta}$ são introduzidos, e a função de partição toma a forma

$$Z(n) = (\beta J)^2 \frac{N/\sqrt{2}}{2\pi} \int \prod_\alpha dq_\alpha \int \prod_{(\alpha\beta)} dq_{\alpha\beta} \times \exp \left\{ N \left[-(\beta J)^2 \left(\sum_{(\alpha\beta)} q_{\alpha\beta}^2 + \frac{1}{2} \sum_\alpha q_\alpha^2 \right) + \ln \Theta(q_{\alpha\beta}, q_{\alpha\alpha}) \right] \right\}, \quad (3.49)$$

em que

$$\Theta(q_{\alpha\beta}, q_{\alpha\alpha}) = \int \prod_\alpha e^{(\frac{s-2}{2})\beta\mu_\alpha} \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} dx_\alpha e^{-y_\alpha} D(\phi_\alpha^\dagger \phi_\alpha) \times \exp \left\{ \sum_\alpha A_\alpha^0 + 4(\beta J)^2 \left(\sum_\alpha q_\alpha (S_\alpha^z)^2 + 2 \sum_{(\alpha\beta)} q_{\alpha\beta} S_\alpha^z S_\beta^z \right) \right\}. \quad (3.50)$$

O surgimento do parâmetro q_α levanta uma importante questão. No modelo de Sherrington e Kirkpatrick (1978), $S^2 = 1$, tal que os elementos diagonais da matriz das réplicas são unitários. Todavia, nos modelos fermiônicos VSIF e HVSIF, o surgimento deste novo parâmetro se deve justamente ao fato de que os termos que compõem essa diagonal agora são escritos em termos de operadores.

As integrais em (3.49) podem ser avaliadas pelo método “steepest descent”, de maneira que os parâmetros q_α e $q_{\alpha\beta}$ são escolhidos de forma a extremizar o argumento da exponencial em Λ_α na equação (3.49). Logo,

$$q_\alpha = \frac{1}{(\beta J)^2} \frac{\partial}{\partial q_\alpha} \ln \Lambda_\alpha = 4 \langle (S_\alpha^z)^2 \rangle \quad ; \quad q_{\alpha\beta} = \frac{1}{2(\beta J)^2} \frac{\partial}{\partial q_{\alpha\beta}} \ln \Lambda_\alpha = 4 \langle S_\alpha^z S_\beta^z \rangle. \quad (3.51)$$

De acordo com o método das réplicas

$$\beta\Omega = \lim_{N \rightarrow 0} \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{Nn} \left[1 - (\beta J)^2 \frac{N/\sqrt{2}}{2\pi} \int \prod_\alpha dq_{\alpha\alpha} \int \prod_{(\alpha\beta)} dq_{\alpha\beta} e^{-\beta N \Phi(q_{\alpha\beta}, q_{\alpha\alpha})} \right] \quad (3.52)$$

em que

$$\Phi(q_{\alpha\beta}, q_{\alpha\alpha}) = -(\beta J)^2 \left(\sum_{(\alpha\beta)} q_{\alpha\beta}^2 + \frac{1}{2} \sum_\alpha q_{\alpha\alpha}^2 \right) + \ln \Theta(q_{\alpha\beta}, q_{\alpha\alpha}). \quad (3.53)$$

No limite termodinâmico

$$\beta\Omega = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{n} \Phi(q_{\alpha\beta}, q_{\alpha\alpha}) \quad (3.54)$$

Nesse caso, o cálculo do Potencial Grão Canônico no modelo VSIF utiliza duas aproximações distintas: solução com simetria de réplicas (SR) e solução com um passo de quebra de simetria de réplicas (1P-QSR), que são tratadas nas subseções seguintes.

3.3.1 Modelo VSIF (solução com simetria de réplicas)

Na solução com simetria de réplicas (SR) a matriz das réplicas $\{Q\}$ é parametrizada de acordo com:

$$\begin{aligned} q_{\alpha\alpha} &= \bar{q} \\ q_{\alpha\beta} &= q \end{aligned} \quad (3.55)$$

tal que

$$\lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{n} \sum_{\alpha \neq \beta} q_{\alpha\beta}^2 = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{2n} n(n-1)q^2 = \frac{-q^2}{2} \quad (3.56)$$

e

$$\sum_{\alpha\beta} q_{\alpha\beta} S_{\alpha}^z S_{\beta}^z = \frac{1}{2}q [(\sum_{\alpha} S_{\alpha}^z)^2 - \sum_{\alpha} (S_{\alpha}^z)^2] \quad ; \quad \sum_{\alpha} q_{\alpha} (S_{j\alpha}^z)^2 = \bar{q} \sum_{\alpha} (S_{j\alpha}^z)^2. \quad (3.57)$$

Logo, o potencial Grão Canônico na solução SR pode ser escrito por:

$$\beta\Omega(q, \bar{q}) = \frac{(\beta J)^2}{2} [\bar{q}^2 - q^2] - \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{n} \ln \Theta(q, \bar{q}) \quad (3.58)$$

em que a equação (3.50) assume a seguinte forma na solução com simetria de réplicas:

$$\begin{aligned} \Theta(q, \bar{q}) &= \prod_{\alpha} e^{(\frac{s-2}{2})\beta\mu_{\alpha}} \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} dx_{\alpha} e^{-y_{\alpha}} \int D(\phi_{\alpha}^{\dagger} \phi_{\alpha}) \\ &\times \exp \left\{ \sum_{\alpha} A_{\alpha}^0 + 4(\beta J)^2 (\bar{q} - q) \sum_{\alpha} (S_{\alpha}^z)^2 + 4(\beta J)^2 q \left(\sum_{\alpha} S_{\alpha}^z \right)^2 \right\}. \end{aligned} \quad (3.59)$$

Após este procedimento, ainda persistem termos quadráticos em (3.50). Novamente, o auxílio da identidade de Hubbard-Stratonovich é requerida. As somas sobre α com a linearização resultam em

$$e^{4(\beta J)^2 (\bar{q} - q) \sum_{\alpha} (S_{\alpha}^z)^2} = \sqrt{\frac{1}{2\pi}} \int \prod_{\alpha} dw_{\alpha} e^{\sum_{\alpha} \left[-\frac{w_{\alpha}^2}{2} + 2\beta J \sqrt{2(\bar{q} - q)} w_{\alpha} S_{\alpha}^z \right]} \quad (3.60)$$

$$e^{4(\beta J)^2 q (\sum_{\alpha} S_{\alpha}^z)^2} = \sqrt{\frac{1}{2\pi}} \int dz e^{\left[-\frac{z^2}{2} + 2\beta J \sqrt{2q} z \sum_{\alpha} S_{\alpha}^z \right]} \quad (3.61)$$

o que resulta na seguinte equação para $\Theta(q, \bar{q})$:

$$\begin{aligned} \Theta(q, \bar{q}) &= \int \frac{dz}{2\pi} e^{-\frac{z^2}{2}} \prod_{\alpha} \int \frac{dw_{\alpha}}{2\pi} e^{-\frac{\Sigma_{\alpha} w_{\alpha}^2}{2}} e^{(\frac{s-2}{2})\beta\mu_{\alpha}} \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} dx_{\alpha} e^{-y_{\alpha}} \int D(\phi_{\alpha}^{\dagger} \phi_{\alpha}) \\ &\times \exp \left\{ \sum_{\alpha} \left[A_{\alpha}^0 + 2\beta J \sqrt{2(\bar{q} - q)} w_{\alpha} (S_{\alpha}^z) + 2\beta J \sqrt{2qz} S_{\alpha}^z \right] \right\}. \end{aligned} \quad (3.62)$$

Introduzindo uma notação compacta para as integrais

$$\int \frac{dz}{2\pi} e^{-\frac{z^2}{2}} = \int Dz \quad ; \quad \int \frac{dw_{\alpha}}{2\pi} e^{-\frac{\Sigma_{\alpha} w_{\alpha}^2}{2}} = \int Dw_{\alpha}. \quad (3.63)$$

Lembrando que S_{α}^z é definido na equação (3.34), $\Theta(q, \bar{q})$ toma a seguinte forma:

$$\Theta(q, \bar{q}) = \int Dz \prod_{\alpha} \int Dw_{\alpha} e^{(\frac{s-2}{2})\beta\mu_{\alpha}} \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} dx_{\alpha} e^{-y_{\alpha}} I_{\alpha}(z, w_{\alpha}) \quad (3.64)$$

sendo

$$I_{\alpha}(z, w_{\alpha}) = \int D(\phi_{\alpha}^{\dagger} \phi_{\alpha}) \exp \left\{ \sum_{\alpha} \sum_{\omega} \phi_{\alpha}^{\dagger}(\omega) G_{\alpha}^{-1}(\omega) \phi_{\alpha}(\omega) \right\} \quad (3.65)$$

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

$$G_{\alpha}^{-1}(\omega) = \gamma^{-1}(\omega) + [\beta J \sqrt{2qz} + \beta J \sqrt{2(\bar{q} - q)} w_{\alpha}] \underline{\sigma}^z \quad (3.66)$$

e

$$\gamma^{-1}(\omega) = (i\omega + y) I + \beta \Gamma \underline{\sigma}^x. \quad (3.67)$$

A simetria de réplicas assegura que

$$\Theta(q, \bar{q}) = \int Dz \left\{ \int Dw e^{(\frac{s-2}{2})\beta\mu} \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} dx e^{-y} I(z, w) \right\}^n, \quad (3.68)$$

de tal forma que as somas sobre α são realizadas.

Com uso das propriedades da álgebra de Grassmann, é possível reescrever a equação (3.68) com auxílio da seguinte identidade:

$$\int \sum_{i=1}^n d\xi_i^* d\xi_i e^{-\sum_i g_i \xi_i^* \xi_i} = \det G \quad (3.69)$$

logo,

$$I(z, w) = \int D(\phi^\dagger \phi) \exp \left\{ \sum_{\omega} \underline{\phi}^\dagger(\omega) G^{-1}(\omega) \underline{\phi}(\omega) \right\} = \prod_{\omega} \det(\gamma^{-1}(\omega) + h(z, w) \underline{\sigma}^z) \quad (3.70)$$

com $h(z, w)$ definido por

$$h(z, w) = \beta J \sqrt{2q} z + \beta J \sqrt{2(\bar{q} - q)} w. \quad (3.71)$$

A função $I(z, w)$ pode ser reescrita

$$I(z, w) = \prod_{n=-\infty}^{\infty} \left[i\omega + y + \sqrt{\Delta(z, w)} \right] \left[i\omega + y - \sqrt{\Delta(z, w)} \right] \quad (3.72)$$

em que $\Delta(z, w)$ é igual a

$$\Delta(z, w) = h^2(z, w) + (\beta J)^2. \quad (3.73)$$

A soma sobre as frequências de Matsubara na equação (3.72) é feita e $I(z, w)$ se reduz a

$$I(z, w) = 2e^y \left[\cosh(y) + \cosh \sqrt{\Delta(z, w)} \right]. \quad (3.74)$$

Substituindo a equação (3.74) em (3.68), $\Theta(q, \bar{q})$ assume a seguinte forma:

$$\Theta(q, \bar{q}) = \int Dz \left\{ \int Dw 2e^{\frac{s-2}{2}\beta\mu} \left[\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} dx \cosh(y) + \cosh \sqrt{\Delta(z, w)} \right] \right\}^n, \quad (3.75)$$

em que

$$\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} dx \cosh(y) = \begin{cases} 0 & \text{se } y = ix \\ \cosh(\beta\mu) & \text{se } y = \beta\mu. \end{cases} \quad (3.76)$$

Assim, ao tomar o limite das réplicas $n \rightarrow 0$, é obtida a equação (3.77). Lembrando que, ao assumir $s = 2$, o modelo de dois estados é representado. Quando $s = 4$ é escolhido, o modelo de quatro estados é representado. Desta forma, o grande potencial termodinâmico generalizado pode ser escrito por

$$\beta\Omega(q, \bar{q}) = \frac{(\beta J)^2}{2} [\bar{q}^2 - q^2] - \frac{(s-2)}{2} \beta\mu - \ln 2 - \int Dz \ln [K(z)] \quad (3.77)$$

com

$$K(z) = \frac{(s-2)}{2} \cosh(\beta\mu) + \int Dw \cosh \sqrt{\Delta(z, w)}. \quad (3.78)$$

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

$$q = \int Dz \left[\frac{\int Dw h(z, w) \sinh \sqrt{\Delta(z, w)}}{K(z) \sqrt{\Delta(z, w)}} \right]^2 \quad (3.79)$$

e

$$\bar{q} = \int Dz \left[\frac{1}{K(z)} \int Dw \left\{ \frac{h(z, w)^2 \cosh \sqrt{\Delta(z, w)}}{\Delta(z, w)} + \frac{(\beta\Gamma)^2 \sinh \sqrt{\Delta(z, w)}}{\Delta(z, w)^{3/2}} \right\} \right] \quad (3.80)$$

sendo

$$\int Dz = \int \frac{dz}{\sqrt{2\pi}} e^{-z^2/2} \quad ; \quad \int Dw = \int \frac{dw}{\sqrt{2\pi}} e^{-w^2/2}. \quad (3.81)$$

A partir da equação $S/K = \beta^2 \frac{\partial \Omega}{\partial \beta}$, a entropia também é derivada e resulta em

$$\begin{aligned} \frac{S(q, \bar{q})}{k} &= -\frac{3}{2} (\beta J)^2 [\bar{q}^2 - q^2] - \frac{(s-2)}{2} \int Dz \frac{\sinh(\beta\mu)}{K(z)} \beta\mu \\ &- (\beta\Gamma)^2 \int Dz \frac{1}{K(z)} \int Dw \frac{\sinh \sqrt{\Delta(z, w)}}{\sqrt{\Delta(z, w)}} + \int Dz \ln [2K(z)]. \end{aligned} \quad (3.82)$$

Particularmente, no modelo 4S, o potencial químico μ controla o número médio de ocupação por sítio $n = \langle n_\uparrow + n_\downarrow \rangle$ o qual é obtido a partir de $n = -\partial\Omega/\partial\mu$ como:

$$n = 1 + \tanh(\beta\mu) \left\{ (1 - \bar{q}) - (\beta\Gamma)^2 \int Dz \frac{\int Dw [\phi(z, w)]}{K(z)} \right\} \quad (3.83)$$

com

$$\phi(z, w) = \frac{\cosh \sqrt{\Delta(z, w)}}{\Delta(z, w)} - \frac{\sinh \sqrt{\Delta(z, w)}}{\Delta^{3/2}(z, w)}. \quad (3.84)$$

3.3.2 Modelo VSIF (solução com um passo de quebra de simetria de réplicas)

Na solução com um passo de quebra de simetria de réplicas proposta por Parisi (1980), a matriz das réplicas Q é parametrizada através da divisão das n réplicas em n/x grupos com x réplicas cada um, em que $q_{\alpha\alpha} = \bar{q}$ e

$$\begin{aligned}
q_{\alpha\beta} &= q_1 & \text{se } I(\alpha/x) &= I(\beta/x) \\
q_{\alpha\beta} &= q_0 & \text{se } I(\alpha/x) &\neq I(\beta/x).
\end{aligned} \tag{3.85}$$

em que $I(m)$ representa o menor inteiro, o qual é maior ou igual a m . O parâmetro \bar{q} é a correlação spin-spin $\bar{q} = \langle S^\alpha S^\alpha \rangle$. O parâmetro x representa a proporção em que os parâmetros q_0 e q_1 são misturados. Logo,

$$\sum_{\alpha\beta} q_{\alpha\beta} S_\alpha S_\beta = \frac{1}{2} \left\{ q_0 \left(\sum_\alpha S_\alpha \right)^2 + (q_1 - q_0) \sum_{block} \left(\sum_{\alpha \in block} S_\alpha \right)^2 - q_1 \sum_\alpha S_\alpha^2 \right\} \tag{3.86}$$

e

$$\lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{n} \sum_{\alpha \neq \beta} q_{\alpha\beta}^2 = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{2n} \left\{ n^2 q_0^2 + \frac{n}{x} x^2 (q_1^2 - q_0^2) - n q_1^2 \right\} = \frac{1}{2} [(x-1)q_1^2 - xq_0^2], \tag{3.87}$$

o que resulta em Ω no modelo VSIF escrito na seguinte forma

$$\beta\Omega(q_0, q_1, \bar{q}) = \frac{(\beta J)^2}{2} [(x-1)q_1^2 - xq_0^2 + \bar{q}^2] - \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{n} \ln \Theta(q_0, q_1, \bar{q}), \tag{3.88}$$

em que

$$\begin{aligned}
\Theta(q_0, q_1, \bar{q}) &= \prod_\alpha e^{(\frac{s-2}{2})\beta\mu_\alpha} \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} dx_\alpha e^{-y_\alpha} \int D(\phi_\alpha^\dagger \phi_\alpha) \\
&\times \exp \left\{ \sum_\alpha A_\alpha^0 + 4(\beta J)^2 \left[(\bar{q} - q_1) \sum_\alpha (S_\alpha^z)^2 + (q_1 - q_0) \sum_{block} \left(\sum_{\alpha \in block} S_\alpha \right)^2 + q_0 \left(\sum_\alpha S_\alpha^z \right)^2 \right] \right\}.
\end{aligned} \tag{3.89}$$

As formas quadráticas na equação (3.89) podem ser linearizadas com auxílio das transformações de Hubbard-Stratonovich em que novos campos auxiliares são introduzidos no problema. Como resultado, é obtido:

$$\Theta(q_0, q_1, \bar{q}) = \int Dz \left[\int Dv \left(\int Dw e^{(\frac{s-2}{2})\beta\mu} \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} dx e^{-y} I(z, v, w) \right)^x \right]^{n/x}, \tag{3.90}$$

com

$$I(z, v, w) = \int D(\phi^* \phi) \exp \sum_\omega \underline{\phi}^*(\omega) G^{-1}(\omega) \underline{\phi}(\omega), \tag{3.91}$$

$$Dy = \frac{dy e^{-\frac{y^2}{2}}}{\sqrt{2\pi}} \quad (y = z, v, w) \text{ e}$$

$$G^{-1}(\omega) = \gamma^{-1}(\omega) + h(z, v, w)\underline{\sigma}^z. \quad (3.92)$$

A componente local vidro de spin do campo aleatório $h(z, v, w)$ é definida por

$$h(z, v, w) = \beta J[\sqrt{2q_0}z + \sqrt{2(q_1 - q_0)}v + \sqrt{2(\bar{q} - q_1)}w]. \quad (3.93)$$

A integral funcional sobre as variáveis de Grassmann e a soma sobre as frequências de Matsubara na equação (3.91) são realizadas. Como consequência, o potencial Grão Canônico na aproximação com 1P-QSR é

$$\beta\Omega(q_0, q_1, \bar{q}) = \frac{(\beta J)^2}{2}[(x-1)q_1^2 - xq_0^2 + \bar{q}^2] - \frac{s-2}{2}\beta\mu - \ln 2 - \frac{1}{x} \int Dz \ln \left[\int Dv [K(z, v)]^x \right] \quad (3.94)$$

em que

$$K(z, v) = \frac{s-2}{2} \cosh \beta\mu + \int Dw \cosh \sqrt{\Delta(z, v, w)} \quad (3.95)$$

e $\Delta(z, v, w) = h^2(z, v, w) + (\beta\Gamma)^2$. Os parâmetros de ordem são obtidos através da condição de extremização do potencial termodinâmico. Logo, as equações ponto de sela resultam em

$$q_0 = \int Dz \left[\frac{\int Dv K(z, v)^{x-1} \int Dw h(z, v, w) \sinh \sqrt{\Delta(z, v, w)}}{\int Dv K(z, v)^x \sqrt{\Delta(z, v, w)}} \right]^2, \quad (3.96)$$

$$q_1 = \int Dz \left[\frac{\int Dv K(z, v)^{x-2} [\int Dw h(z, v, w) \sinh \sqrt{\Delta(z, v, w)}]^2}{\int Dv K(z, v)^x \Delta(z, v, w)} \right], \quad (3.97)$$

$$\bar{q} = \int Dz \left[\frac{\int Dv K(z, v)^{x-1}}{\int Dv K(z, v)^x} \int Dw \bar{Q}(z, v, w) \right] \quad (3.98)$$

em que

$$\bar{Q}(z, v, w) = \frac{h(z, w)^2 \cosh(\sqrt{\Delta(z, v, w)})}{\Delta(z, v, w)} + \frac{(\beta\Gamma)^2 \sinh \sqrt{\Delta(z, v, w)}}{\Delta(z, v, w)^{3/2}} \quad (3.99)$$

e

$$x^2 \frac{(\beta J)^2}{2} [q_1^2 - q_0^2] + \int Dz \ln \left\{ \int Dv [K(z, v)]^x \right\} - x \int Dz \frac{\int Dv K(z, v)^x \ln K(z, v)}{\int Dv K(z, v)} = 0 \quad (3.100)$$

sendo

$$\int Dz = \int \frac{dz}{\sqrt{2\pi}} e^{-z^2/2} \quad ; \quad \int Dv = \int \frac{dv}{\sqrt{2\pi}} e^{-v^2/2} \quad ; \quad \int Dw = \int \frac{dw}{\sqrt{2\pi}} e^{-w^2/2}. \quad (3.101)$$

A partir da equação $S/K = \beta^2 \frac{\partial \Omega}{\partial \beta}$, a entropia também é derivada, tal que

$$\begin{aligned} \frac{S(q_0, q_1, \bar{q})}{k} = & -\frac{3}{2}(\beta J)^2 [(x-1)q_1^2 - xq_0^2 + \bar{q}^2] + \frac{1}{x} \int Dz \ln \left[\int Dv K(z)^x \right] \\ & + \ln 2 - \int Dz \frac{\int Dv K(z, v)^{x-1} \left[\frac{(s-2) \sinh(\beta\mu)(\beta\mu)}{2} + \frac{(\beta\Gamma)^2 \int Dw \sinh \sqrt{\Delta(z, v, w)}}{\sqrt{\Delta(z, v, w)}} \right]}{\int Dv K(z, v)^x}. \end{aligned} \quad (3.102)$$

Particularmente, no modelo 4S, o potencial químico μ controla o número médio de ocupação por sítio $n = \langle n_\uparrow + n_\downarrow \rangle$ o qual é obtido a partir de $n = -\partial \Omega / \partial \mu$ como:

$$n = 1 + \tanh(\beta\mu) \left\{ (1 - \bar{q}) - (\beta\Gamma)^2 \int Dz \frac{\int Dv [K(z, v)]^{x-1} \int Dw [\phi(z, v, w)]}{\int Dv [K(z, v)]^x} \right\} \quad (3.103)$$

com

$$\phi(z, v, w) = \frac{\cosh \sqrt{\Delta(z, v, w)}}{\Delta(z, v, w)} - \frac{\sinh \sqrt{\Delta(z, v, w)}}{\Delta^{3/2}(z, v, w)}. \quad (3.104)$$

3.4 Modelo Hopfield Vidro de Spin Ising Fermiônico com Campo Transverso

No modelo Hopfield vidro de spin Ising fermiônico, o hamiltoniano utilizado é definido na equação (3.1). Neste modelo, as interações J_{ij} entre os spins são dadas por:

$$J_{ij} = \frac{J}{2N} \sum_{\mu=1}^p \xi_i^\mu \xi_j^\mu, \quad (3.105)$$

em que $\xi_i^\mu = \pm 1$ (i ou $j = 1, 2, \dots, N$, N é o número de sítios) são variáveis aleatórias distribuídas independentemente que seguem a distribuição

$$P(\xi_i) = \frac{1}{2} \delta_{\xi_i^e, +1} + \frac{1}{2} \delta_{\xi_i^e, -1}. \quad (3.106)$$

O cálculo da função de partição no “ensemble” Grão Canônico para o modelo HVSIF no formalismo em segunda quantização, onde os spin são representados em termos de operadores

fermiônicos, utiliza o mesmo procedimento adotado na seção 3.2, tal que

$$Z = \int D(\phi^* \phi) e^{(\frac{s-2}{2})N\beta\mu} \prod_j \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} dx_j e^{-y_j} e^{A_\Gamma + A_{SG}} \quad (3.107)$$

com

$$A_\Gamma = \sum_i \sum_\omega \underline{\phi}_i^\dagger(\omega) [i\omega + \beta\mu + \beta\Gamma \underline{\sigma}^x] \underline{\phi}_i(\omega), \quad (3.108)$$

$$A_{SG} = \sum_\Omega \sum_{ij} \beta J_{ij} S_i^z(\omega') S_j^z(-\omega'), \quad (3.109)$$

na aproximação estática, $\omega' = 0$. Usando (3.105) em (3.109), a seguinte equação é obtida

$$A_{SG}^{est} = \frac{\beta J}{2N} \sum_\mu \sum_{ij} \xi_i^\mu \xi_j^\mu S_i^z S_j^z, \quad (3.110)$$

com

$$S_j^z = \frac{1}{2} \sum_\omega \underline{\phi}_j^\dagger(\omega) \underline{\sigma}^z \underline{\phi}_j(\omega). \quad (3.111)$$

Usando o método das réplicas, o potencial Grão canônico pode ser definido por

$$\Omega = \lim_{N \rightarrow \infty} \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{Nn} (1 - \langle \langle Z^n \rangle \rangle). \quad (3.112)$$

A partir de

$$\sum_{(ij)} \xi_i^\mu S_i^\mu \xi_j^\mu S_j^\mu = \left(\sum_i \xi_i^\mu S_i^\mu \right)^2 - \sum_i (\xi_i^\mu S_i^\mu)^2. \quad (3.113)$$

a equação (3.110) se torna

$$A_{SG}^{est} = \frac{\beta J}{2N} \sum_{\mu=1}^p \sum_\alpha \left[\left(\sum_i \xi_i^\mu S_i^\alpha \right)^2 - \sum_i (\xi_i^\mu S_i^\alpha)^2 \right] \quad (3.114)$$

com

$$e^{A_{SG}^{est}} = e^{-\frac{\beta J}{2N} p \sum_i \sum_\alpha (S_i^\alpha)^2} e^{\frac{\beta J}{2N} \sum_\mu \sum_\alpha (\sum_i \xi_i^\mu S_i^\alpha)^2}. \quad (3.115)$$

Os termos quadráticos da equação (3.115) podem ser linearizados a partir da transformação de Hubbard-Stratonovich

$$e^{\sum_\mu \frac{\beta}{2N} (\sum_i S_i \xi_i^\mu)^2} = \int \prod_\mu dm_\mu e^{-\frac{\beta N}{2} \sum_\mu m_\mu^2 + \beta \sum_\mu \sum_i \sigma_i \xi_i^\mu} \quad (3.116)$$

a qual introduz $n \times p$ campos auxiliares m_μ^α que são separados em dois subconjuntos com $n \times (p-l)$ e $n \times l$ termos, tal que

$$\begin{aligned}
e^{A_{SG}^{est}} &= e^{-\frac{\beta J}{2N} p \sum_{i,\alpha} (S_i^\alpha)^2} \\
&\times \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{\nu} Dm_{\nu}^{\alpha} e^{-\frac{1}{2} \sum_{\nu} \sum_{\alpha} (m_{\nu}^{\alpha})^2 + \sqrt{\frac{\beta J}{N}} \sum_{\nu} \sum_{\alpha} (\sum_i \xi_i^{\nu} S_i^{\alpha}) m_{\nu}^{\alpha}} \\
&\times \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{\mu} Dm_{\mu}^{\alpha} e^{-\frac{1}{2} \sum_{\mu} \sum_{\alpha} (m_{\mu}^{\alpha})^2 + \sqrt{\frac{\beta J}{N}} \sum_{\mu} \sum_{\alpha} (\sum_i \xi_i^{\mu} S_i^{\alpha}) m_{\mu}^{\alpha}}.
\end{aligned} \tag{3.117}$$

Com isso, a média sobre Z^n pode ser escrita por:

$$\begin{aligned}
\langle\langle Z^n \rangle\rangle_{\xi} &= \prod_{\alpha} \int D(\phi_{\alpha}^* \phi_{\alpha}) \psi_i^{\alpha} e^{-\frac{\beta J}{2N} p \sum_{i,\alpha} (S_i^{\alpha})^2} e^{\sum_{\alpha,i} A_{0\Gamma}^{\alpha,i}} \\
&\times \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{\nu} Dm_{\nu}^{\alpha} \left\langle \left\langle e^{-\frac{1}{2} \sum_{\nu} \sum_{\alpha} (m_{\nu}^{\alpha})^2 + \sqrt{\frac{\beta J}{N}} \sum_{\nu} \sum_{\alpha} (\sum_i \xi_i^{\nu} S_i^{\alpha}) m_{\nu}^{\alpha}} \right\rangle \right\rangle_{\xi} \\
&\times \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{\mu} Dm_{\mu}^{\alpha} \left\langle \left\langle e^{-\frac{1}{2} \sum_{\mu} \sum_{\alpha} (m_{\mu}^{\alpha})^2 + \sqrt{\frac{\beta J}{N}} \sum_{\mu} \sum_{\alpha} (\sum_i \xi_i^{\mu} S_i^{\alpha}) m_{\mu}^{\alpha}} \right\rangle \right\rangle_{\xi}
\end{aligned} \tag{3.118}$$

em que

$$\psi_i^{\alpha} = e^{(\frac{s-2}{2})N\beta\mu_{\alpha}} \prod_i \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} dx_i^{\alpha} e^{-y_i^{\alpha}}. \tag{3.119}$$

Assume-se que a contribuição relevante é dada por m_{α}^{ν} , que são da ordem de um. Em contrapartida, m_{α}^{μ} são de ordem de $1/\sqrt{N}$. Portanto, a média sobre as variáveis aleatórias independentes ξ_i^{μ} com pode ser feita usando $P(\xi_i^{\mu})$ dada na equação (3.106)

$$\langle\langle A_{\alpha}^{\mu}(m_{\alpha}^{\mu}) \rangle\rangle = \sum_{\xi_i^{\mu}=\pm 1} P(\xi_i^{\mu}) e^{\beta J N \sum_{\alpha} \sum_{\mu} [-\frac{1}{2}(m_{\alpha}^{\mu})^2 + \frac{1}{N} \sum_i S_i^{\alpha} \xi_i^{\mu} m_{\alpha}^{\mu}]} \tag{3.120}$$

a qual resulta em

$$\langle\langle A_{\alpha}^{\mu}(m_{\alpha}^{\mu}) \rangle\rangle = e^{-\frac{1}{2}\beta J N \sum_{\alpha} \sum_{\mu} (m_{\alpha}^{\mu})^2} \prod_i \prod_{\mu} \left[\cosh(\beta J \sum_{\alpha} S_i^{\alpha} m_{\alpha}^{\mu}) \right] \tag{3.121}$$

$$\langle\langle A_{\alpha}^{\mu}(m_{\alpha}^{\mu}) \rangle\rangle = e^{-\frac{1}{2}\beta J N \sum_{\alpha} \sum_{\mu} (m_{\alpha}^{\mu})^2 + \sum_i \sum_{\mu} \ln \cosh(\beta J \sum_{\alpha} S_i^{\alpha} m_{\alpha}^{\mu})}. \tag{3.122}$$

Expandindo a função $\ln \cosh x \simeq \frac{x^2}{2}$ (em torno de $x \rightarrow 0$) presente na equação (3.122), a

seguinte equação é obtida

$$\ln \cosh(\beta J \sum_{\alpha} S_i^{\alpha} m_{\alpha}^{\mu}) \simeq \frac{(\beta J)^2}{2} \left(\sum_{\alpha} S_i^{\alpha} m_{\alpha}^{\mu} \right)^2 \simeq \frac{(\beta J)^2}{2} \sum_{\alpha, \beta} S_i^{\alpha} S_i^{\beta} m_{\alpha}^{\mu} m_{\beta}^{\mu}, \quad (3.123)$$

em que

$$\langle\langle A_{\alpha}^{\mu}(m_{\alpha}^{\mu}) \rangle\rangle = e^{-\frac{1}{2}\beta J N \sum_{\alpha, \beta} \sum_{\mu} m_{\alpha}^{\mu} (\delta_{\alpha\beta} - \frac{\beta J}{N} \sum_i S_i^{\alpha} S_i^{\beta}) m_{\beta}^{\mu}}. \quad (3.124)$$

Substituindo a equação (3.124) em (3.118), a função de partição reescrita como:

$$\begin{aligned} \langle\langle Z^n \rangle\rangle &= \prod_{\alpha} \int D(\phi_{\alpha}^* \phi_{\alpha}) \psi_i^{\alpha} \int \prod_{\nu} \frac{dm_{\nu}^{\alpha}}{\sqrt{2\pi/(\beta J N)}} \\ &\times \left\langle \left\langle e^{\beta J N \sum_{\nu} \sum_{\alpha} [-\frac{1}{2}(m_{\alpha}^{\nu})^2 + \sum_{\nu} \sum_{\alpha} (\sum_i \xi_i^{\nu} S_i^{\alpha}) m_{\alpha}^{\nu}]} \right\rangle \right\rangle_{\xi} \\ &\times e^{-\frac{\beta J}{2N} P \sum_{\alpha, i} (S_i^{\alpha})^2 + A_{0r}^{\alpha}} X_{\mu}^{\alpha}, \end{aligned} \quad (3.125)$$

com

$$X_{\mu}^{\alpha} = \int \prod_{\mu=l+1} \frac{dm_{\mu}^{\alpha}}{\sqrt{2\pi/(\beta J N)}} e^{-\frac{1}{2}\beta J N \sum_{\alpha, \beta} \sum_{\mu} m_{\alpha}^{\mu} K_{\alpha\beta} m_{\beta}^{\mu}} \quad (3.126)$$

e

$$K_{\alpha\beta} = \delta_{\alpha\beta} - \frac{\beta J}{N} \sum_i S_i^{\alpha} S_i^{\beta}. \quad (3.127)$$

Com a introdução de

$$1 = \int dq_{\alpha\beta} \delta(q_{\alpha\beta} - \frac{1}{N} \sum_i S_i^{\alpha} S_i^{\beta}) = \int \prod_{\alpha\beta} dq_{\alpha\beta} \int \frac{dr'_{\alpha\beta}}{2\pi} e^{\sum_{\alpha\beta} i r'_{\alpha\beta} (q_{\alpha\beta} - \frac{1}{N} \sum_i S_i^{\alpha} S_i^{\beta})}. \quad (3.128)$$

A equação (3.126) se torna

$$X_{\mu}^{\alpha} = \int Dm_{\mu}^{\alpha} \int \prod_{\alpha\beta} \frac{dq_{\alpha\beta} dr'_{\alpha\beta}}{2\pi} e^{\sum_{\alpha\beta} [i r'_{\alpha\beta} (q_{\alpha\beta} - \frac{1}{N} \sum_i S_i^{\alpha} S_i^{\beta}) - \frac{1}{2}\beta J N \sum_{\alpha, \beta} \sum_{\mu} m_{\alpha}^{\mu} (\delta_{\alpha\beta} - \frac{\beta J}{N} \sum_i S_i^{\alpha} S_i^{\beta}) m_{\beta}^{\mu}]}. \quad (3.129)$$

em que $\int \prod_y \frac{dm_y^{\alpha}}{\sqrt{2\pi/(\beta J N)}} = \int Dm_y^{\alpha}$ ($y = \mu$ ou ν). A partir da seguinte substituição

$$r'_{\alpha\beta} = \bar{r}_{\alpha\beta} - i \frac{(\beta J)^2 N}{2} \sum_{\mu=s} m_{\alpha}^{\mu} m_{\beta}^{\mu} \quad (3.130)$$

a equação para X_{μ}^{α} assume a seguinte forma

$$X_{\mu}^{\alpha} = \int \prod_{\alpha\beta} \frac{dq_{\alpha\beta} dr'_{\alpha\beta}}{2\pi} e^{\sum_{\alpha\beta} [i \bar{r}_{\alpha\beta} (q_{\alpha\beta} - \frac{1}{N} \sum_i S_i^{\alpha} S_i^{\beta})]} \int Dm_{\mu}^{\alpha} e^{-\frac{1}{2}\beta J N \sum_{\mu=s} \sum_{\alpha\beta} m_{\alpha}^{\mu} (\delta_{\alpha\beta} - \beta J q_{\alpha\beta}) m_{\beta}^{\mu}}. \quad (3.131)$$

Substituindo (3.131) em (3.125), a seguinte equação para a função de partição é obtida

$$\begin{aligned} \langle\langle Z^n \rangle\rangle &= \prod_{\alpha} \int D(\phi_{\alpha}^* \phi_{\alpha}) \psi_i^{\alpha} \int Dm_{\nu}^{\alpha} \langle\langle A_{\alpha}^{\nu}(m_{\alpha}^{\nu}) \rangle\rangle e^{-\frac{\beta J}{2N} p \sum_{\alpha,i} (S_i^{\alpha})^2 + \sum_{\alpha,i} A_{0\Gamma}^{\alpha,i}} \\ &\times \int Dm_{\mu}^{\alpha} e^{-\frac{1}{2} \beta J N \sum_{\mu=s} \sum_{\alpha\beta} m_{\alpha}^{\mu} \Lambda_{\alpha\beta} m_{\beta}^{\mu}} \int \prod_{\alpha\beta} dq_{\alpha\beta} \int \frac{dr'_{\alpha\beta}}{2\pi} e^{\sum_{\alpha\beta} [i \bar{r}_{\alpha\beta} (q_{\alpha\beta} - \frac{1}{N} \sum_i S_i^{\alpha} S_i^{\beta})]} \end{aligned} \quad (3.132)$$

com $\Lambda_{\alpha\beta} = \delta_{\alpha\beta} - \beta J q_{\alpha\beta}$. Realizando a integral sobre m_{α}^{μ}

$$\int \prod_{\mu=s} \frac{dm_{\mu}^{\alpha}}{\sqrt{2\pi/\beta J N}} e^{-\frac{1}{2} \beta J N \sum_{\mu=s} \sum_{\alpha\beta} m_{\alpha}^{\mu} \Lambda_{\alpha\beta} m_{\beta}^{\mu}} = e^{-\frac{p-s}{2} \text{Tr} \ln \Lambda}, \quad (3.133)$$

a função de partição pode ser escrita como

$$\begin{aligned} \langle\langle Z^n \rangle\rangle &= \int \prod_{\alpha} Dm_{\alpha}^1 \int \prod_{\alpha\beta} dq_{\alpha\beta} \int \frac{dr'_{\alpha\beta}}{2\pi} e^{-\frac{\beta J N}{2} \sum_{\alpha} (m_{\alpha}^1)^2 + i \sum_{\alpha\beta} \bar{r}_{\alpha\beta} q_{\alpha\beta} - \frac{p-s}{2} \text{Tr} \ln \Lambda} \\ &\times \left\langle \left\langle \int D(\phi_{\alpha}^* \phi_{\alpha}) \psi_i^{\alpha} e^{-i \sum_{\alpha\beta} \bar{r}_{\alpha\beta} (\frac{1}{N} \sum_i S_i^{\alpha} S_i^{\beta}) - \frac{\beta J}{2N} p \sum_{\alpha,i} (S_i^{\alpha})^2 + \beta J \sum_{\alpha} (\sum_i \xi_i^{\nu} S_i^{\alpha}) m_{\alpha}^1 + \sum_{\alpha,i} A_{0\Gamma}^{\alpha,i}} \right\rangle \right\rangle_{\xi}. \end{aligned} \quad (3.134)$$

Agrupando os termos em $\langle\langle Z^n \rangle\rangle$, temos que

$$\begin{aligned} \langle\langle Z^n \rangle\rangle &= \int \prod_{\alpha} Dm_{\alpha}^1 \int \prod_{\alpha\beta} dq_{\alpha\beta} \int \frac{dr'_{\alpha\beta}}{2\pi} e^{-\frac{\beta J N}{2} \sum_{\alpha} (m_{\alpha}^1)^2 + i \sum_{\alpha\beta} \bar{r}_{\alpha\beta} q_{\alpha\beta} - \frac{p-s}{2} \text{Tr} \ln \Lambda} \\ &\times \exp \ln \left\langle \left\langle \Theta(\bar{r}_{\alpha\beta}, m'_{\alpha}) \right\rangle \right\rangle_{\xi}, \end{aligned} \quad (3.135)$$

com

$$\Theta(\bar{r}_{\alpha\beta}, m'_{\alpha}) = \int D(\phi_{\alpha}^* \phi_{\alpha}) \psi_i^{\alpha} e^{-i \sum_{\alpha\beta} \bar{r}_{\alpha\beta} (\frac{1}{N} \sum_i S_i^{\alpha} S_i^{\beta}) - \frac{\beta J}{2N} p \sum_{\alpha,i} (S_i^{\alpha})^2 + \beta J \sum_{\alpha} (\sum_i \xi_i^{\nu} S_i^{\alpha}) m_{\alpha}^1 + \sum_{\alpha,i} A_{0\Gamma}^{\alpha,i}}. \quad (3.136)$$

De acordo com o método das réplicas

$$\beta \Omega = \lim_{N \rightarrow \infty} \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{Nn} \left[1 - \int \prod_{\alpha} Dm_{\alpha}^1 \int \prod_{\alpha\beta} \frac{dq_{\alpha\beta} dr'_{\alpha\beta}}{2\pi} e^{-\beta N \Phi(q_{\alpha\beta}, r_{\alpha\beta}, m_{\alpha}^1)} \right], \quad (3.137)$$

em que

$$\Phi(q_{\alpha\beta}, r_{\alpha\beta}, m_{\alpha}^1) = \frac{J}{2} \sum_{\alpha} (m_{\alpha}^1)^2 - \frac{i}{\beta N} \sum_{\alpha\beta} \bar{r}_{\alpha\beta} q_{\alpha\beta} + \frac{1}{2\beta N} (p-s) \text{Tr} \ln \Lambda - \frac{1}{\beta N} \ln \left\langle \left\langle \Theta(\bar{r}_{\alpha\beta}, m'_{\alpha}) \right\rangle \right\rangle_{\xi}. \quad (3.138)$$

Na equação (3.137), as integrais são calculadas pelo método “steepest descent” no limite termodinâmico $N \rightarrow \infty$, o que resulta em

$$m_\alpha^1 = \frac{1}{N} \left\langle \left\langle \sum_i \xi_i^1 \langle S_i^\alpha \rangle \right\rangle \right\rangle_\xi, \quad (3.139)$$

$$q_{\alpha\beta} = \left\langle \left\langle \frac{1}{N} \sum_i \langle S_i^\alpha S_i^\beta \rangle \right\rangle \right\rangle_\xi \quad (3.140)$$

e

$$-i\bar{r}_{\alpha\beta} = \frac{(\beta J)^2}{2} p r_{\alpha\beta}. \quad (3.141)$$

No limite termodinâmico, a equação 3.137 pode ser escrita como

$$\beta\Omega = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{n} \Phi(q_{\alpha\beta}, r_{\alpha\beta}, m_\alpha^1), \quad (3.142)$$

em que

$$\Phi(q_{\alpha\beta}, r_{\alpha\beta}, m_\alpha^1) = \frac{J}{2} \sum_\alpha (m_\alpha^1)^2 + \frac{\beta J^2}{2} a \sum_{\alpha\beta} r_{\alpha\beta} q_{\alpha\beta} + \frac{1}{2\beta N} (p-s) \text{Tr} \ln \Lambda - \frac{1}{\beta} \ln \left\langle \left\langle \Theta(r_{\alpha\beta}, m'_\alpha) \right\rangle \right\rangle_\xi \quad (3.143)$$

e

$$\Theta(r_{\alpha\beta}, m'_\alpha) = \int \prod_\alpha D(\phi_\alpha^* \phi_\alpha) \psi^\alpha e^{\frac{(\beta J)^2}{2} a \sum_{\alpha\beta} r_{\alpha\beta} S^\alpha S^\beta - \frac{\beta J}{2} a \sum_\alpha (S^\alpha)^2 + \beta J \sum_\alpha (\xi^1 S^\alpha) m_\alpha^1 + \sum_\alpha A_{0\Gamma}^\alpha}. \quad (3.144)$$

Nesse caso, o cálculo do Potencial Grão Canônico utiliza duas aproximações distintas: solução com simetria de réplicas (SR) e solução com um passo de quebra de simetria de réplicas (1P-QSR), que são tratadas nas subseções seguintes.

3.4.1 Modelo HVSIF (solução com simetria de réplicas)

Na solução com simetria de réplicas (SR) a matriz das réplicas $\{Q\}$ e a matriz $\{r\}$ são parametrizadas de acordo com:

$$q_{\alpha\beta} = \begin{cases} \bar{q} & \text{se } \alpha = \beta \\ q & \text{se } \alpha \neq \beta \end{cases} \quad r_{\alpha\beta} = \begin{cases} \bar{r} & \text{se } \alpha = \beta \\ r & \text{se } \alpha \neq \beta, \end{cases} \quad (3.145)$$

com m_1^α sendo invariante com respeito as permutações das réplicas: $m_1^\alpha = m$, em que $\alpha = 1, \dots, n$. Logo

$$\lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{n} \sum_{\alpha\beta} r_{\alpha\beta} q_{\alpha\beta} = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{n} [n(n-1)r q + n\bar{r}\bar{q}] = \bar{r}\bar{q} - r q \quad (3.146)$$

lembrando que $p \gg s$, $(p-s)/N = a$. Logo

$$\lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{n} \text{Tr} \ln \Lambda = -\frac{\beta J q}{1 - \beta J(\bar{q} - q)} + \ln[1 - \beta J(\bar{q} - q)], \quad (3.147)$$

e

$$\sum_{\alpha\beta} r_{\alpha\beta} S_\alpha S_\beta = (\bar{r} - r) \sum_{\alpha} (S_\alpha^2) + r \left(\sum_{\alpha} S_\alpha \right)^2. \quad (3.148)$$

Aqui, m_1^α é invariante com respeito as permutações das réplicas: $m_1^\alpha = m$, em que $\alpha = 1, \dots, n$.

Logo, o potencial Grão Canônico na solução SR pode ser escrito por:

$$\beta\Omega = \frac{\beta J}{2} m^2 + \frac{(\beta J)^2}{2} a[\bar{r}\bar{q} - r q] + \frac{a}{2} \left\{ -\frac{\beta J q}{1 - \beta J(\bar{q} - q)} + \ln[1 - \beta J(\bar{q} - q)] \right\} \\ - \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{n} \ln \langle \langle \Theta(\{r\}, m, \xi) \rangle \rangle_\xi, \quad (3.149)$$

em que

$$\Theta(\{r\}, m, \xi) = \int \prod_{\alpha}^n D(\phi_\alpha^*, \phi_\alpha) \psi^\alpha \exp \left\{ \frac{1}{2} \left[(\beta J)^2 a [(\bar{r} - r - 1/\beta J) \sum_{\alpha=1}^n (S^\alpha)^2 \right. \right. \\ \left. \left. + r \left(\sum_{\alpha=1}^n (S^\alpha)^2 \right) + 2\beta J \sum_{\alpha=1}^n (\xi m S^\alpha) \right] \right\}, \quad (3.150)$$

com $a = p/N$. As formas quadráticas na função $\Theta(\{r\}, m, \xi)$ podem ser linearizadas com auxílio das transformações de Hubbard-Stratonovich em que novos campos auxiliares são introduzidos no problema. Como resultado, é obtido:

$$\Theta(\{r\}, m, \xi) = \int Dz \left[\int D\omega e^{(\frac{s-2}{2})\beta\mu} \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} dx e^{-y} \int D(\phi^* \phi) \exp \sum_{\omega} \underline{\phi}^*(\omega) G^{-1}(\omega) \underline{\phi}(\omega) \right]^n, \quad (3.151)$$

com $Dy = \frac{dy e^{-\frac{y^2}{2}}}{\sqrt{2\pi}}$ ($y = z, w$) e

$$G^{-1}(\omega) = \gamma^{-1}(\omega) + [\bar{h}(z, v, w) + \beta J \xi m] \underline{\sigma}^z. \quad (3.152)$$

A componente local vidro de spin do campo aleatório $\bar{h}(z, v, w)$ é definida por

$$\bar{h}(z, v, w) = \beta J [\sqrt{ar_0}z + \sqrt{a(\bar{r} - r - 1/\beta J)}w]. \quad (3.153)$$

A integral funcional sobre as variáveis de Grassmann, bem como as somas sobre as frequências de Matsubara na equação (3.151) são realizadas, tal que o potencial Grão Canônico na aproximação com SR pode ser escrito como:

$$\begin{aligned} \beta\Omega = & \frac{\beta J}{2}m^2 + \frac{(\beta J)^2}{2}a[\bar{r}\bar{q} - rq] + \frac{a}{2} \left\{ -\frac{\beta Jq}{1 - \beta J(\bar{q} - q)} + \ln[1 - \beta J(\bar{q} - q)] \right\} - \frac{s-2}{2}\beta\mu \\ & - \int Dz \langle \langle \ln 2(K(z, v, \xi)) \rangle \rangle_\xi, \end{aligned} \quad (3.154)$$

em que

$$K(z, w, \xi) = \frac{s-2}{2} \cosh \beta\mu + \int Dw \cosh \sqrt{\bar{\Delta}(z, w, \xi)} \quad (3.155)$$

com $\bar{\Delta}(z, w, \xi) = \bar{h}^2(z, w, \xi) + (\beta\Gamma)^2$ e

$$\bar{h}(z, w, \xi) = \sqrt{\beta J a [\beta J(\bar{r} - r) - 1]}w + \beta J \sqrt{ar}z + \beta J \xi m. \quad (3.156)$$

O conjunto de equações para os parâmetros de ordem m , q , \bar{q} pode ser encontrado a partir da equação (3.177) usando as condições ponto de sela:

$$m = \int Dz \langle \langle \frac{\xi \int Dw \bar{h}(z, w, \xi) \sinh \sqrt{\bar{\Delta}(z, w, \xi)}}{\int Dw K(z, w, \xi) \sqrt{\bar{\Delta}(z, w, \xi)}} \rangle \rangle_\xi, \quad (3.157)$$

$$q = \int Dz \langle \langle \left(\frac{\int Dw \bar{h}(z, w, \xi) \sinh \sqrt{\bar{\Delta}(z, w, \xi)}}{K(z, w, \xi) \sqrt{\bar{\Delta}(z, w, \xi)}} \right)^2 \rangle \rangle_\xi, \quad (3.158)$$

em que

$$\bar{q} = \int Dz \langle \langle \frac{1}{K(z, w, \xi)} \int Dw \left\{ \frac{\bar{h}(z, w, \xi)^2 \cosh \sqrt{\bar{\Delta}(z, w, \xi)}}{\bar{\Delta}(z, w, \xi)} + \frac{(\beta\Gamma)^2 \sinh \sqrt{\bar{\Delta}(z, w, \xi)}}{\bar{\Delta}(z, w, \xi)^{3/2}} \right\} \rangle \rangle_\xi \quad (3.159)$$

e com os elementos da matriz r sendo dados por:

$$r = \frac{q}{\{1 - \beta J[\bar{q} - q]\}^2} \quad (3.160)$$

$$\bar{r} - r = \frac{1}{\beta J [1 - \beta J (\bar{q} - q)]}. \quad (3.161)$$

A entropia na solução SR é derivada a partir do potencial termodinâmico e resulta em

$$\begin{aligned} S = & -\frac{a}{2}(\beta J)^2 \frac{q(\bar{q} - q)}{[1 - \beta J(\bar{q} - q)]^2} + \frac{\beta J a}{2} \bar{q} + \int Dz \langle \langle \ln 2 [\bar{K}(z, \xi)] \rangle \rangle_\xi \\ & - \frac{\beta J a}{2} \frac{(\bar{q} - q)}{1 - \beta J(\bar{q} - q)} - \frac{a}{2} \ln[1 - \beta J(\bar{q} - q)] - (\beta J) m^2 \\ & - \int_{-\infty}^{\infty} Dz \left\langle \left\langle \frac{\frac{(s-2) \sinh(\beta\mu)(\beta\mu)}{2} + \frac{(\beta\Gamma)^2 \int Dw \sinh \sqrt{\Delta(z, w, \xi)}}{\sqrt{\Delta(z, w, \xi)}}}{K(z, w, \xi)} \right\rangle \right\rangle_\xi - \frac{(\beta J)^2 a}{2} (\bar{r}\bar{q} - r q). \end{aligned} \quad (3.162)$$

A equação para n é obtida a partir de $n = -\partial\Omega/\partial\mu$, tal que

$$n = 1 + \tanh(\beta\mu) \left\{ (1 - \bar{q}) - (\beta\Gamma)^2 \int Dz \left\langle \left\langle \frac{\int Dw [\phi(z, w, \xi)]}{K(z, \xi)} \right\rangle \right\rangle_\xi \right\} \quad (3.163)$$

com

$$\phi(z, w, \xi) = \frac{\cosh \sqrt{\Delta(z, w, \xi)}}{\Delta(z, w, \xi)} - \frac{\sinh \sqrt{\Delta(z, w, \xi)}}{\Delta^{3/2}(z, w, \xi)}. \quad (3.164)$$

3.4.2 Modelo HVSIF (solução com um passo de quebra de simetria de réplicas)

Na solução com um passo de simetria de réplicas (1P-QSR) a matriz das réplicas $\{Q\}$ e a matriz $\{r\}$ são parametrizadas de acordo com:

$$q_{\alpha\beta} = \begin{cases} \bar{q} & \text{se } \alpha = \beta \\ q_1 & \text{se } I(\alpha/x) = I(\beta/x) \\ q_0 & \text{se } I(\alpha/x) \neq I(\beta/x) \end{cases} \quad r_{\alpha\beta} = \begin{cases} \bar{r} & \text{se } \alpha = \beta \\ r_1 & \text{se } I(\alpha/x) = I(\beta/x) \\ r_0 & \text{se } I(\alpha/x) \neq I(\beta/x) \end{cases} \quad (3.165)$$

tal que

$$\sum_{\alpha\beta} r_{\alpha\beta} q_{\alpha\beta} = n [\bar{r}\bar{q} + (x-1)r_1q_1 + (n-x)r_0q_0] \quad (3.166)$$

$$\lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{n} \text{Tr} \ln \Lambda = \frac{-\beta J q_0}{Q_{q_1}} + \frac{1}{x} \ln \left[\frac{Q_{q_1}}{Q_{\bar{q}}} \right] + \ln [Q_{\bar{q}}] \quad (3.167)$$

com

$$Q_{q_1} = 1 - \beta J (\bar{q} - q_1) - \beta J x (q_1 - q_0), \quad (3.168)$$

$$Q_{\bar{q}} = 1 - \beta J (\bar{q} - q_1) \quad (3.169)$$

e

$$\sum_{\alpha\beta} r_{\alpha\beta} S_{\alpha\beta} = (\bar{r} - r_1) \sum_{\alpha} (S_{\alpha})^2 + (r_1 - r_0) \sum_{l=1}^{n/x} \left(\sum_{\alpha \in \text{block}}^x S_{\alpha} \right)^2 + r_0 \left(\sum_{\alpha} S_{\alpha} \right)^2, \quad (3.170)$$

com m_1^{α} sendo invariante com respeito as permutações das réplicas: $m_1^{\alpha} = m$, em que $\alpha = 1, \dots, n$. Portanto, a parametrização (3.165) é usada para expressar o Potencial Grão Canônico 1P-QSR tal como:

$$\begin{aligned} \beta\Omega = & \frac{\beta J m^2}{2} + \frac{(\beta J)^2 a}{2} [\bar{r}\bar{q} - (1-x)r_1q_1 - xr_0q_0] - \frac{1}{2} \frac{\beta J a q_0}{1 - \beta J [\bar{q} - q_1 + x(q_1 - q_0)]} \\ & + \frac{a}{2} \ln[1 - \beta J (\bar{q} - q_1)] + \frac{a}{2x} \ln \frac{1 - \beta J [\bar{q} - q_1 + x(q_1 - q_0)]}{1 - \beta J (\bar{q} - q_1)} - \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{n} \ln \langle \langle \Theta(\{r\}, m, \xi) \rangle \rangle_{\xi}, \end{aligned} \quad (3.171)$$

em que

$$\begin{aligned} \Theta(\{r\}, m, \xi) = & \int \prod_{\alpha}^n D(\phi_{\alpha}^*, \phi_{\alpha}) \psi^{\alpha} \exp \left\{ \frac{1}{2} \left[(\beta J)^2 a \left((\bar{r} - r_1 - 1/\beta J) \sum_{\alpha=1}^n (S^{\alpha})^2 \right. \right. \right. \\ & \left. \left. + (r_1 - r_0) \sum_{l=1}^{n/x} \left(\sum_{\alpha=(l-1)x+1}^{lx} S^{\alpha} \right)^2 + r_0 \sum_{\alpha=1}^n (S^{\alpha})^2 \right) + 2\beta J \sum_{\alpha=1}^n (\xi m S^{\alpha}) \right] \right\}, \end{aligned} \quad (3.172)$$

com $a = p/N$. As formas quadráticas na função $\Theta(\{r\}, m, \xi)$ podem ser linearizadas com auxílio das transformações de Hubbard-Stratonovich em que novos campos auxiliares são introduzidos no problema. Como resultado, é obtido:

$$\Theta(\{r\}, m, \xi) = \int Dz \left[\int Dv \left(\int Dwe^{(\frac{s-2}{2})\beta\mu} \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} dx e^{-y} I(z, v, w, \xi) \right)^x \right]^{n/x}, \quad (3.173)$$

com

$$I(z, v, w, \xi) = \int D(\phi^* \phi) \exp \sum_{\omega} \phi^*(\omega) G^{-1}(\omega) \phi(\omega), \quad (3.174)$$

$$Dy = \frac{dy e^{-\frac{y^2}{2}}}{\sqrt{2\pi}} \quad (y = z, v, w) \text{ e}$$

$$G^{-1}(\omega) = \gamma^{-1}(\omega) + [\bar{h}(z, v, w) + \beta J \xi m] \underline{\sigma}^z \quad (3.175)$$

A componente local vidro de spin do campo aleatório $\bar{h}(z, v, w)$ é definida por

$$\bar{h}(z, v, w) = \beta J [\sqrt{ar_0}z + \sqrt{a(r_1 - r_0)}v + \sqrt{a(\bar{r} - r - 1/\beta J)}w]. \quad (3.176)$$

A integral funcional sobre as variáveis de Grassmann, bem como as somas sobre as frequências de Matsubara na equação (3.174) são realizadas, tal que o potencial Grão Canônico na aproximação com 1P-QSR pode ser escrito como:

$$\begin{aligned} \beta\Omega = & \frac{\beta^2 J^2 a}{2} (\bar{r}\bar{q} - (1-x)r_1q_1 - xr_0q_0) - \frac{1}{2} \frac{\beta Jaq_0}{1 - \beta J[\bar{q} - q_1 + x(q_1 - q_0)]} \\ & + \frac{a}{2} \ln[1 - \beta J(\bar{q} - q_1)] + \frac{a}{2x} \ln \frac{1 - \beta J[\bar{q} - q_1 + x(q_1 - q_0)]}{1 - \beta J(\bar{q} - q_1)} + \frac{\beta Jm^2}{2} \\ & - \frac{s-2}{2} \beta\mu - \frac{1}{x} \int Dz \langle \langle \ln \int Dv [2K(z, v, \xi)]^x \rangle \rangle_\xi, \end{aligned} \quad (3.177)$$

em que

$$K(z, v, \xi) = \frac{s-2}{2} \cosh \beta\mu + \cosh \sqrt{\bar{\Delta}(z, v, w, \xi)} \quad (3.178)$$

e

$$\bar{h}(z, v, w, \xi) = \beta J[\sqrt{ar_0}z + \sqrt{a(r_1 - r_0)}v + \xi m] + \sqrt{\beta Ja[\beta J(\bar{r} - r_1) - 1]}w. \quad (3.179)$$

O conjunto de equações para os parâmetros de ordem m , q_0 , q_1 , \bar{q} e x pode ser encontrado a partir da equação (3.177) usando as condições ponto de sela:

$$m = \int Dz \langle \langle \frac{\int Dv K(z, v)^{x-1} \xi \int Dw \bar{h}(z, v, w, \xi) \sinh \sqrt{\bar{\Delta}(z, v, w, \xi)}}{\int Dv K(z, v)^x \sqrt{\bar{\Delta}(z, v, w, \xi)}} \rangle \rangle_\xi \quad (3.180)$$

$$q_0 = \int Dz \langle \langle \left(\frac{\int Dv K(z, v)^{x-1} \int Dw \bar{h}(z, v, w, \xi) \sinh \sqrt{\bar{\Delta}(z, v, w, \xi)}}{\int Dv K(z, v)^x \sqrt{\bar{\Delta}(z, v, w, \xi)}} \right)^2 \rangle \rangle_\xi \quad (3.181)$$

$$q_1 = \int Dz \langle \langle \frac{\int Dv K(z, v)^{x-2} \left[\int Dw \bar{h}(z, v, w, \xi) \sinh \sqrt{\bar{\Delta}(z, v, w, \xi)} \right]^2}{\int Dv K(z, v)^x \bar{\Delta}(z, v, w, \xi)} \rangle \rangle_\xi \quad (3.182)$$

$$\bar{q} = \int Dz \langle \langle \frac{\int Dv K(z, v)^{x-1} \int Dw \bar{Q}(z, v, w, \xi)}{\int Dv K(z, v)^x} \rangle \rangle_\xi \quad (3.183)$$

em que

$$\bar{Q}(z, v, w, \xi) = \frac{h^2(z, v, w, \xi) \cosh \sqrt{\bar{\Delta}(z, v, w, \xi)}}{\bar{\Delta}(z, v, w, \xi)} + \frac{(\beta\Gamma)^2 \sinh \sqrt{\bar{\Delta}(z, v, w, \xi)}}{\bar{\Delta}(z, v, w, \xi)^{3/2}}. \quad (3.184)$$

A equação para o parâmetro x é dada por

$$\begin{aligned} \frac{1}{x} \int Dz \langle \langle \ln \int Dv K(z, v)^x \rangle \rangle_\xi - \frac{1}{x} \int Dz \langle \langle \frac{\int Dv K(z, v)^x \ln K(z, v)^x}{\int Dv K(z, v)^x} \rangle \rangle_\xi \\ + \frac{\beta J a}{2} \left(\frac{q_0}{1 - \beta J [\bar{q} - q_1 + x(q_1 - q_0)]} - \frac{q_1}{1 - \beta J (\bar{q} - q_1)} \right) \\ - \frac{a}{2x} \ln \frac{1 - \beta J [\bar{q} - q_1 + x(q_1 - q_0)]}{1 - \beta J (\bar{q} - q_1)} = 0. \end{aligned} \quad (3.185)$$

Os elementos da matriz r são dados por:

$$r_0 = \frac{q_0}{\{1 - \beta J [\bar{q} - q_1 + x(q_1 - q_0)]\}^2} \quad (3.186)$$

$$r_1 - r_0 = \frac{q_1 - q_0}{[1 - \beta J (\bar{q} - q_1)] \{1 - \beta J [\bar{q} - q_1 + x(q_1 - q_0)]\}} \quad (3.187)$$

$$\bar{r} - r_1 = \frac{1}{\beta J [1 - \beta J (\bar{q} - q_1)]} \quad (3.188)$$

A entropia pode ser derivada do Potencial Grão Canônico e resulta em:

$$\begin{aligned} S = \frac{\beta J a}{2} [\bar{q} - \beta J \bar{q} \bar{r} + \beta J (r_1 q_1 + x(2r_0 q_1 - q_0 r_0 - r_1 q_1))] + \frac{1}{x} \int Dz \langle \langle \int Dv K(z, v, \xi)^x \rangle \rangle_\xi \\ + \frac{(\beta J)^2 a}{2} \frac{q_0 (\bar{q} - q_1 + x(q_1 - q_0))}{[1 - \beta J (\bar{q} - q_1 + x(q_1 - q_0))]^2} - \frac{\beta J a}{2} \frac{\bar{q} - q_1}{1 - \beta J (\bar{q} - q_1)} - \frac{a}{2} \ln [1 - \beta J (\bar{q} - q_1)] \\ - \frac{a}{2x} \ln \left[\frac{1 - \beta J (\bar{q} - q_1 + x(q_1 - q_0))}{1 - \beta J (\bar{q} - q_1)} \right] - \frac{\beta J a}{2} \frac{x(q_1 - q_0)}{[1 - \beta J (q_1 - q_0)] [1 - \beta J (\bar{q} - q_1 + x(q_1 - q_0))]} \\ + \ln 2 - \beta J m^2 - \int Dz \langle \langle \frac{K(z, v, \xi)^{x-1} \left[\frac{(s-2) \sinh(\beta \mu) (\beta \mu)}{2} + \frac{(\beta \Gamma)^2 \int Dw \sinh \sqrt{\Delta(z, w, \xi)}}{\sqrt{\Delta(z, w, \xi)}} \right]}{K(z, w, \xi)} \rangle \rangle_\xi. \end{aligned} \quad (3.189)$$

A equação para o n pode ser obtida a partir de $n = -\partial \Omega / \partial \mu$, tal que

$$n = 1 + \tanh(\beta \mu) \left\{ (1 - \bar{q}) - (\beta \Gamma)^2 \int Dz \langle \langle \frac{\int Dv [K(z, v, \xi)]^{x-1} \int Dw [\phi(z, v, w, \xi)]}{\int Dv [K(z, v, \xi)]^x} \rangle \rangle_\xi \right\} \quad (3.190)$$

com

$$\phi(z, v, w, \xi) = \frac{\cosh \sqrt{\Delta(z, v, w, \xi)}}{\Delta(z, v, w, \xi)} - \frac{\sinh \sqrt{\Delta(z, v, w, \xi)}}{\Delta^{3/2}(z, v, w, \xi)}. \quad (3.191)$$

Para o caso $q_0 = q_1$ recupera-se a solução com simetria de réplicas do modelo HVSIF.

4 RESULTADOS

Este capítulo, dividido em quatro seções, apresenta resultados dos modelos VSIF e HVSIF, ambos com campo transversal magnético Γ . Na primeira seção, os resultados para o modelo VSIF com $\Gamma = 0$ são apresentados. A segunda seção é reservada aos resultados do modelo VSIF com Γ qualquer. A terceira seção descreve os resultados obtidos a partir do modelo HVSIF com $\Gamma = 0$. Finalmente, a última seção discute os resultados do modelo HVSIF para Γ qualquer.

4.1 Resultados para o modelo VSIF com $\Gamma = 0$

Do ponto de vista teórico, alguns modelos magnéticos foram utilizados para descrever conceitos gerais relacionados as transições inversas, como por exemplo, os modelos Blume-Capel (BC) e Ghatak-Sherrington. No modelo BC, transições inversas são obtidas a partir da adição da proporção de degenerescência $r = k/l \geq 1$ (k e l definem a degenerescência dos spin $S = \pm 1$ e $S = 0$, respectivamente), que introduzem uma vantagem entrópica dos estados interagentes $S = \pm 1$. Em contraste, o modelo GS apresenta transições inversas sem qualquer imposição de vantagem entrópica. Este modelo, diferentemente do modelo BC, apresenta acoplamentos entre spins dados a partir de uma variável aleatória com distribuição de probabilidade Gaussiana. Como consequência, há a introdução de desordem não trivial ao modelo GS, o que conduz a frustração.

O modelo VSIF no ensemble Grão Canônico (ROSENOW; OPPERMANN, 1996), em que os spins são escritos como uma combinação bilinear de operadores de criação e destruição, compartilha algumas características encontradas no modelo GS, como por exemplo, desordem não trivial e o fato de ambos serem modelos de muitos estados. Há inclusive um mapeamento entre o parâmetro anisotrópico D do modelo GS e o potencial químico μ do modelo VSIF no ensemble Grão canônico. Devido a essa estreita relação, o modelo VSIF se torna um candidato para estudo de transições inversas. Com isso, o objetivo desta seção é verificar se modelo VSIF pode, de fato, apresentar transições inversas. Além disso, quando comparada a clássica, a formulação fermiônica ainda oferece a vantagem de permitir, de forma natural, a introdução de outros tipos de acoplamento, como por exemplo efeito Kondo e supercondutividade. Logo, para alcançar a meta estabelecida nesta seção, a solução numérica do conjunto de equações

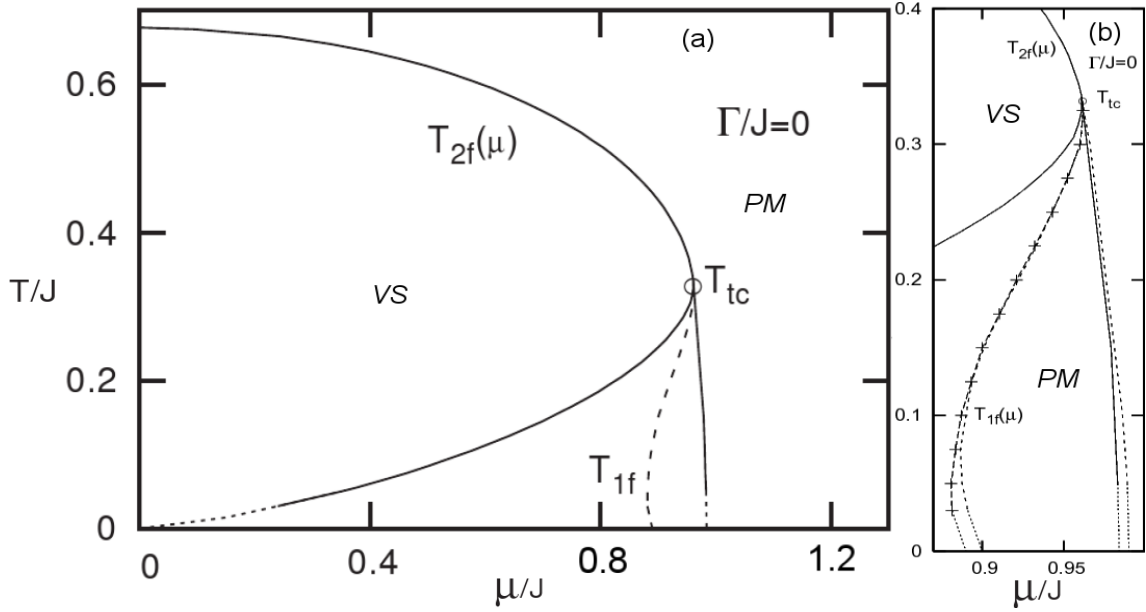


Figura 4.1: Diagrama de fases T/J versus μ/J entre as fases VS e PM para $\Gamma = 0$. T_{tc} representa o ponto tricrítico. T_{2f} e T_{1f} representam as linhas de primeira e segunda ordem, respectivamente. Abaixo do T_{tc} as linhas a esquerda e a direita da linha T_{1f} representam as espinodais das soluções paramagnética e vidro de spin, respectivamente. A figura mais a direita mostra em detalhes a transição de primeira ordem.

acopladas dos parâmetros de ordem q_0 , q_1 e \bar{q} é mostrada em um diagrama de fases T/J versus μ/J . Além disso, o comportamento da entropia também é apresentado.

O diagrama de fases da figura 4.1(a) mostra que com o aumento do potencial químico μ , a linha de transição de segunda ordem T_{2f} entre as fases VS/PM decresce. Além disso, para valores altos de μ ocorre o surgimento de uma transição de primeira ordem T_{1f} . Na figura, T_{tc} representa o ponto tricrítico, que separa as linhas T_{2f} e T_{1f} (os cálculos para obter T_{2f} e T_{tc} no modelo VSIF para Γ qualquer são mostrados em detalhe no apêndice A). Logo abaixo de T_{tc} , a região de existência de soluções metaestáveis é demarcada pelas linhas espinodais das soluções paramagnética (PM), e vidro de spin (VS), que estão a esquerda e a direita da linha de transição de primeira ordem T_{1f} , respectivamente. A linha T_{1f} é obtida a partir da comparação dos potenciais termodinâmicos das soluções VS, em que $q_1 \neq q_0 \neq 0$ e PM, em que $q_1 = q_0 = 0$. Nesse caso, a localização do par μ_{1st}, T_{1t} corresponde ao ponto de intersecção do potencial termodinâmico dessas duas soluções (ver da Costa, Yokoi e Salinas (1994) para mais detalhes). Na figura 4.1(b), a região nas proximidades da linha T_{1f} é mostrada em detalhes. O detalhamento mostra que T_{1f} foi obtida através das soluções SR e 1P-QSR, que são representadas pelas linhas tracejada-pontilhadas e somente tracejadas, respectivamente. Essencialmente, esse resultado mostra que o posicionamento da linha T_{1f} é independente em relação a sua obtenção por SR ou 1P-QSR. Mais importante, esta figura

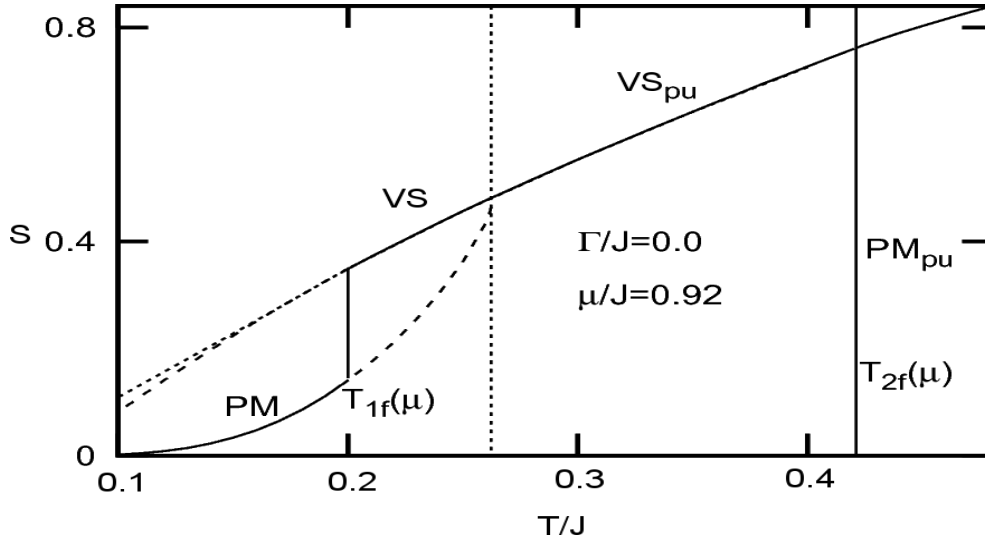


Figura 4.2: Entropia *versus* T/J para $\Gamma = 0$ e $\mu/J = 0.92$. A linha vertical pontilhada é a espinodal da solução VS e a linha vertical cheia representa a linha de transição de segunda ordem T_{2f} . Em baixas temperaturas ($T/J < 0.2$), a linha tracejada representa a solução VS com SR e a linha pontilhada indica a solução VS com 1P-QSR.

mostra o surgimento de uma reentrância associada a transição de primeira ordem, o que indica a possibilidade do aparecimento de uma transição inversa. Nesse caso, a comprovação da existência de tal transição pode ser feita a partir da análise da entropia. Na figura 4.2 é mostrado o comportamento da entropia S em função da temperatura T/J para $\mu = 0.92$, valor esse que corresponde a um corte na região de primeira ordem. Para $T/J > 0.43$, observa-se que há uma fase PM pura, sem soluções VS. Em $T/J = 0.43$, uma linha vertical cheia indica a transição de segunda ordem T_{2f} . Decrescendo a temperatura, que corresponde ao intervalo $0.26 < T/J < 0.43$, a fase PM é substituída por uma fase VS pura, sem soluções PM. Em $T/J = 0.26$, a linha pontilhada indica que a espinodal da solução paramagnética. Para $T/J < 0.26$, ocorre uma transição de primeira ordem da fase VS para a fase PM em $T/J = 0.2$. Nessa transição, observa-se que a entropia da fase VS é maior do que a entropia da fase PM. Este fato demonstra claramente o surgimento de congelamento inverso no modelo VSIF.

4.2 Resultados para o modelo VSIF com $\Gamma > 0$

Enquanto que a seção anterior discutiu e mostrou que modelo VSIF no ensemble grão canônico é capaz de apresentar transições inversas, esta seção tem o intuito de discutir o papel dos efeitos quânticos no congelamento inverso. Para isso, diagramas de fases T/J em função de μ/J para diversos valores de Γ/J foram obtidos. Também são mostrados gráficos

de S em função de T/J com valores de μ/J correspondentes as transições de primeira ordem. Além disso, o número médio de ocupação por sítio n para diversas isotermas e vários valores de Γ é apresentado, indicando como Γ atua no congelamento inverso. A figura 4.3 mostra

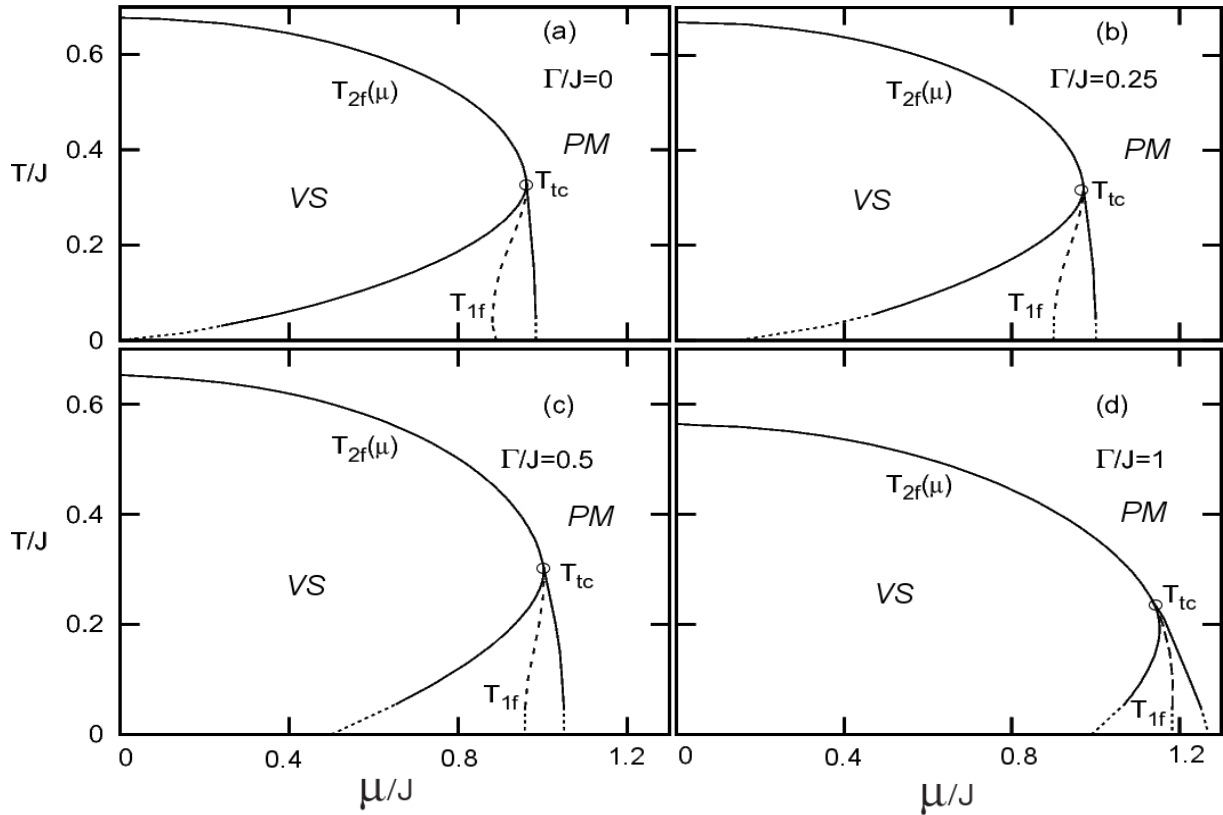


Figura 4.3: Diagramas de fases T/J em função de μ/J para os seguintes valores de Γ/J : 0, 0.25, 0.5, 1.0. Essa figura utiliza a mesma convenção adotada na figura 4.1 para representar as linhas de transição.

diagramas de fases T/J como uma função do potencial químico μ/J para vários valores de $\Gamma = 0, 0.25J, 0.5J$ e J utilizando as aproximações SR e 1P-QSR. A partir desses resultados, é possível observar como os contornos de fase são afetados com a introdução de flutuações de natureza quântica. O gráfico 4.3(a), já apresentado na seção anterior, mostra que a transição de primeira ordem T_{1f} apresenta uma reentrância. Devido a essa reentrância, uma análise da entropia é feita e confirma que há uma transição inversa para o caso $\Gamma = 0$.

As Figs. 4.3(b)-(d) mostram como os contornos de segunda ordem e as reentrâncias são afetadas pelo Γ/J . A linha de segunda ordem T_{2f} em $\mu/J = 0$ decresce com o aumento de Γ . Além disso, a região de múltiplas soluções, demarcada pelas linhas espinodais, diminui com o aumento de Γ . No entanto, a consequência mais importante proveniente da inclusão de flutuações quânticas através do Γ pode ser vista no comportamento dos contornos de primeira ordem $T_{1f}(\mu)$ (ou no equivalente $\mu_{1f}(T)$). É Observado que nos casos $\Gamma = 0.25J, 0.5J$ e $1.0J$

as linhas $T_{1f}(\mu)$ e espinodais são deslocadas, mostrando que com o aumento do Γ , ocorre uma tendência de supressão das reentrâncias. Nas Figs. 4.4(a)-(d), a posição dos pares T_{tc} e μ_{tc}

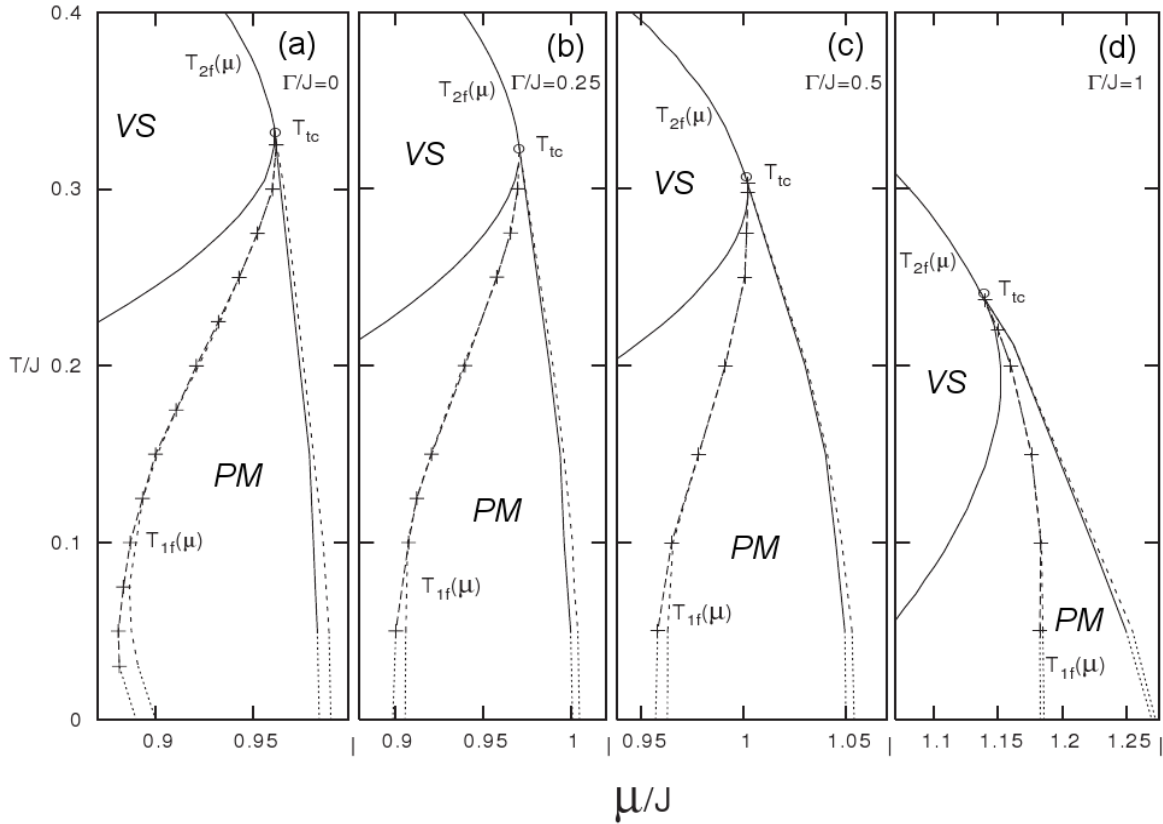


Figura 4.4: Figura mostrando em detalhes a transição de primeira ordem para diversos valores de $\Gamma = 0.0, 0.25, 0.5, 1.0$. T_{2f} e T_{1f} indicam as transições de segunda e primeira ordem, respectivamente. T_{tc} indica o posicionamento do ponto tricrítico. Abaixo do ponto tricrítico, as linhas mais a esquerda indicam a espinodal da solução PM e as linhas mais a direita indicam a espinodal da solução VS.

(ponto tricrítico), bem como os contornos de primeira ordem e as espinodais são mostrados em detalhes. Nesse resultado é mostrado que com o aumento de Γ , a temperatura tricrítica T_{tc} decresce e o potencial químico tricrítico μ_{tc} aumenta. Além disso, as Figs. 4.4(a)-(d) mostram que o aumento de Γ gradualmente suprime a reentrâncias. Para o valor de $\Gamma/J = 1$, a reentrância é totalmente destruída.

A fim de verificar a relação entre a supressão de reentrâncias e o desaparecimento do congelamento inverso, o comportamento da entropia S em função de T/J é obtido para diversos valores de Γ e mostrado na figura 4.5. Os valores de μ são ajustados para cruzar o ponto $T_{1f}(\mu) = 0.2J$ na transição de primeira ordem. Este procedimento permite seguir a diferença de entropia entre as fases VS e PM sempre no mesmo ponto da transição de primeira ordem. Essencialmente, a figura 4.5(a), já apresentada anteriormente, mostra que a entropia da fase desordenada (PM) é menor do que a entropia da fase ordenada (VS) em baixas temperaturas. As Figs. 4.5(b)-(c) mostram o aumento da fase PM. Como consequência, a

fase VS pura acaba sendo gradualmente suprimida. Além disso, é possível observar que com o aumento de Γ , a variação de entropia $\Delta S = S_{PM} - S_{VS}$ em $T/J = 0.2$ diminui, indicando o enfraquecimento das transições inversas. De fato, a figura 4.5(d) mostra uma situação em que a entropia da fase desordenada (PM) agora possui entropia maior que a entropia da fase ordenada (VS). Esse resultado confirma o desaparecimento das transições inversas para o caso $\Gamma/J = 1$, em conformidade com os resultados mostrados nas Figs. 4.3 e 4.4.

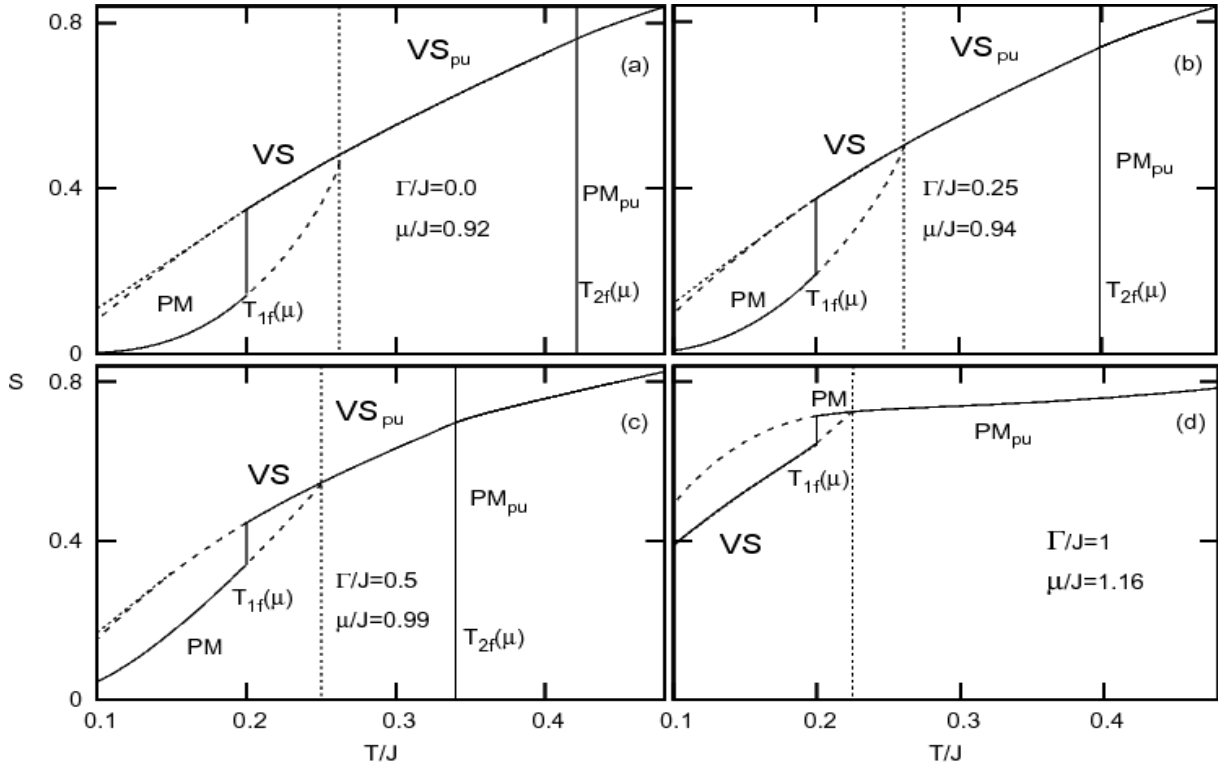


Figura 4.5: Entropia *versus* T/J para vários valores de $\Gamma = 0.0, 0.25, 0.5, 1.0$. A linha vertical pontilhada é a espinodal da solução VS e a linha vertical cheia representa a linha de transição de segunda ordem T_{2f} . Em baixas temperaturas ($T/J < 0.2$), a linha tracejada representa a solução VS com SR e a linha pontilhada indica a solução VS com 1P-QSR.

A relação entre diluição, (que é o favorecimento dos estados não interagentes com o aumento de μ) e flutuações quânticas devido a presença do Γ pode ser observada no número médio de ocupação n . A figura 4.6 mostra o comportamento de n obtido através das soluções SR e 1P-QSR como uma função de μ/J para várias isotermas e valores de Γ/J na fase VS. No caso $\Gamma = 0$, quando a temperatura é decrescida, n permanece no semi-preenchimento mesmo quando $\mu/J \neq 0$. Contudo, este efeito é enfraquecido quando é utilizada a solução 1P-QSR, principalmente em baixas temperaturas. No entanto, a presença do Γ tende a levar o sistema para a situação de semi-preenchimento, como pode ser visto na figura 4.6(a). Além disso, este efeito é intensificado quando T/J é diminuído, como mostram as Figs. 4.6(b)-(d). É importante ressaltar que para valores de Γ diferentes de zero, a diferença entre as soluções

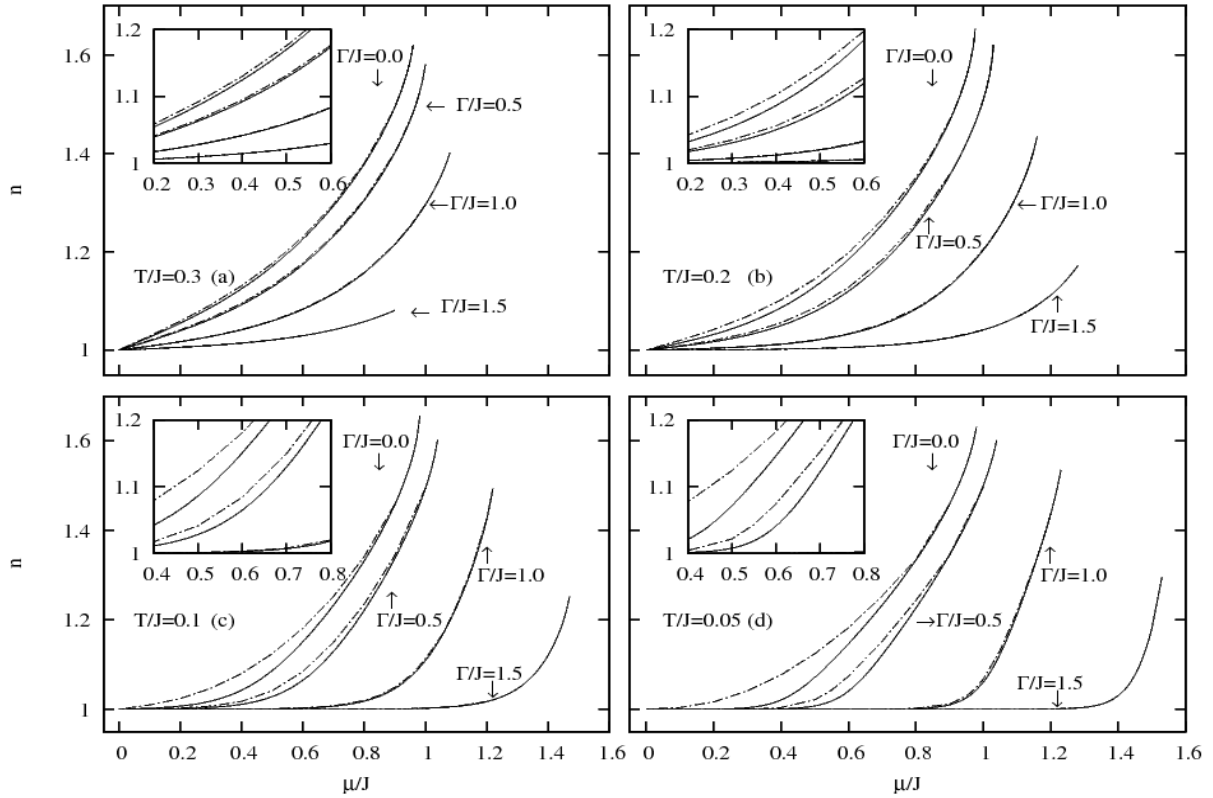


Figura 4.6: Número de ocupação n como uma função de μ/J na solução VS para diversos valores de T/J e Γ . As linhas tracejadas-pontilhadas indicam a solução 1P-QSR e as linhas cheias indicam a solução SR. Os detalhes mostram a diferença no valor de n das soluções SR e 1P-QSR.

SR e 1P-QSR se torna irrelevante. Em outras palavras, Γ sobrepõe os efeitos da temperatura e parece preservar o n no semi-preenchimento em ambas as soluções SR e 1P-QSR.

4.3 Resultado para o modelo HVSIF com $\Gamma = 0$

O propósito da presente seção é investigar o papel da frustração no aparecimento natural de transições inversas. Nesse sentido, a utilização do modelo HVSIF, que permite variar o nível de frustração, pode auxiliar no esclarecimento do papel da frustração em tais transições. Para tal, a solução numérica do conjunto de equações acopladas dos parâmetros de ordem q_0 , q_1 , \bar{q} e m é obtida e mostrada na forma de diagramas de fase T/J em função de $a = p/N$ e T/J em função de μ/J . Além disso, também são analisados os comportamentos da entropia S e do número de ocupação médio n .

Na figura 4.7 são apresentados diagramas de fase que ilustram duas situações distintas. A primeira situação corresponde ao caso $a = 0$, em que não há efeitos de frustração e é

mostrada na figura 4.7(a). Nesse diagrama de fase, em baixas temperaturas T/J e pequenos μ/J , a fase FE é obtida, em que $m \neq 0$, $\bar{q} \neq 0$, $q_0 \neq 0$ e $q_1 \neq 0$. Para alto T/J , a solução PM é encontrada. Para μ/J pequenos, os contornos de transição entre as fases FE e PM (definidas por $T_{2c}(\mu)$) são de segunda ordem. Contudo, quando μ/J aumenta, há o surgimento de um ponto tricrítico localizado em $T_{tc} = J/3$ e $\mu_{tc} = 0.438J$ (os cálculos para obtenção de T_{2f} e T_{tc} no modelo HVSIF são mostrados em detalhe no apêndice B). Além disso, não há reentrância na transição de primeira ordem T_{1c} presente logo abaixo de T_{tc} . Na figura 4.7(b), o nível de frustração é aumentado para $a = 0.1$. Como consequência, os efeitos da frustração se tornam dominantes. Logo, a solução FE é substituída pela solução VS em que $m = 0$, $\bar{q} \neq 0$, $q_0 \neq 0$ e $q_1 \neq 0$, enquanto que a fase PM apresenta $m = 0$, $\bar{q} \neq 0$, $q_0 = 0$ and $q_1 = 0$. É obtida uma temperatura de congelamento de segunda ordem $T_{2f}(\mu)$ na transição VS/PM para baixos valores de μ/J . Para valores altos de μ/J , um ponto tricrítico aparece, com valores $T_{tc} \approx 0.438J$ e $\mu_{tc} \approx 0.752J$. Porém, a transição de primeira $T_{1f}(\mu)$ para o caso $a = 0.1$ apresenta uma reentrância que indica a existência de congelamento inverso, como pode ser visto na inserção da figura 4.7(b), que mostra o comportamento da entropia S em função de T/J . Nessa inserção, é mostrado que para $a = 0.1$ a entropia da fase VS é maior que a entropia da fase PM. Particularmente, o comportamento das linhas de transição para o caso $a = 0.1$ é muito semelhante aos resultados obtidos pelo modelo VSIF para $\Gamma = 0$.

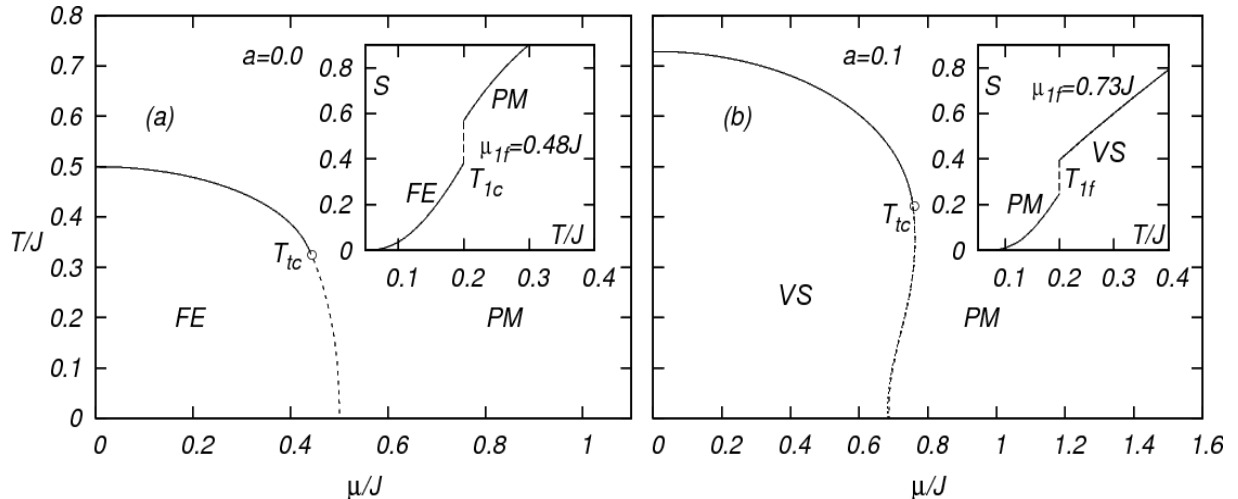


Figura 4.7: Diagramas de fase T/J como uma função de μ/J para $a = 0.0$ e $a = 0.1$. Nesses diagramas, as linhas cheias representam as transições de segunda ordem e as linhas tracejadas representam as transições de primeira ordem. T_{tc} indica o ponto tricrítico. Os detalhes mostram a entropia S versus T/J para valores específicos de μ/J na transição de primeira ordem, onde T_{1c} e T_{1f} representam as transições de primeira ordem entre as fases FE/PM e VS/PM, respectivamente.

Há um cenário mais complexo quando comparado com aqueles descritos na figura 4.7(b) quando $a \rightarrow 0$. Na figura 4.8(a) ($a = 0.01$), a solução para os parâmetros de ordem

mostra um diagrama de fase que ilustra este novo cenário. Para μ/J pequeno e valores altos de T/J , há uma fase PM. Decrescendo a temperatura, ocorre uma transição de segunda ordem entre as fase PM e VS. Ao decrescer a temperaturas ainda mais, há uma outra transição de fase, que agora é de primeira ordem, entre as fase VS e FE. Aumentando o valor de μ/J , a transição de segunda ordem entre as fases PM e VS é substituída por uma de primeira ordem quando T/J decresce. Além disso, para este valor de a , as solução VS e FE ocupam aproximadamente os mesmos tamanhos no diagrama de fase. A temperatura de congelamento tem um comportamento similar ao já encontrado na figura 4.7(b): há uma transição de segunda ordem $T_{2f}(\mu)$ para valores de μ pequenos e também o aparecimento do ponto tricrítico (aqui localizado em $T_{tc} \approx 0.366J$ e $\mu_{tc} \approx 0.539J$). Abaixo deste ponto, $T_{1f}(\mu)$ apresenta uma reentrância a qual permite, para um valor de μ adequado, cruzar de uma fase VS para uma fase PM com o decréscimo da temperatura. No entanto, este contorno de primeira ordem pode apresentar uma natureza ainda mais complexa, quando comparado ao caso $a = 0.1$. Há o surgimento de um ponto triplo (T_{tp}, μ_{tp}) , em que as fases FE, PM e VS coexistem. Abaixo deste ponto, a transição de primeira ordem $T_{1c}(\mu)$ não mostra reentrância, assim como no caso $a = 0$.

Para valores ainda menores de a (ver Figs. 4.7(b)-(d)), a região com solução FE se torna maior do que a região com solução VS. Este resultado é consistente com aqueles encontrados no modelo Hopfield clássico, onde são mostrados resultados em que há um domínio do estado Mattis quando $a \rightarrow 0$. Mesmo nessa nova situação, a locação de $T_{2f}(\mu)$ não é muito afetada. Contudo, o ponto tricrítico é deslocado para valores menores e mais baixos de μ/J e T/J , respectivamente. Em comparação, o ponto triplo é deslocado para valores menores de μ/J e mais altos de T/J . Como uma consequência, $T_{1f}(\mu)$ e $T_{1c}(\mu)$ aparecem em intervalos decrescentes e crescentes de temperatura, respectivamente. Como resultado mais notável, é possível destacar que a reentrância em $T_{1f}(\mu)$ vai sendo gradualmente suprimida quando $a \rightarrow 0$. No entanto, a inserção na figura 4.7(d) mostra que mesmo em um nível de frustração muito fraco, uma reentrância nas transições de primeira ordem ainda é preservada.

O comportamento correspondente da entropia como uma função de T/J para os valores de a usados na figura 4.8 é mostrado na figura 4.9. Esta figura ilustra a supressão gradual da transição inversa quando $a \rightarrow 0$. Na Fig 4.9(a), o valor de $\mu = 0.53J$ é escolhido de forma a cruzar a transição de primeira ordem reentrante $T_{1f}(\mu)$ presente na figura 4.8(a). Essa figura mostra que a entropia da fase VS é maior do que a entropia da fase PM na transição de primeira ordem a qual, assim como na inserção da figura 4.7(b), indica a existência de

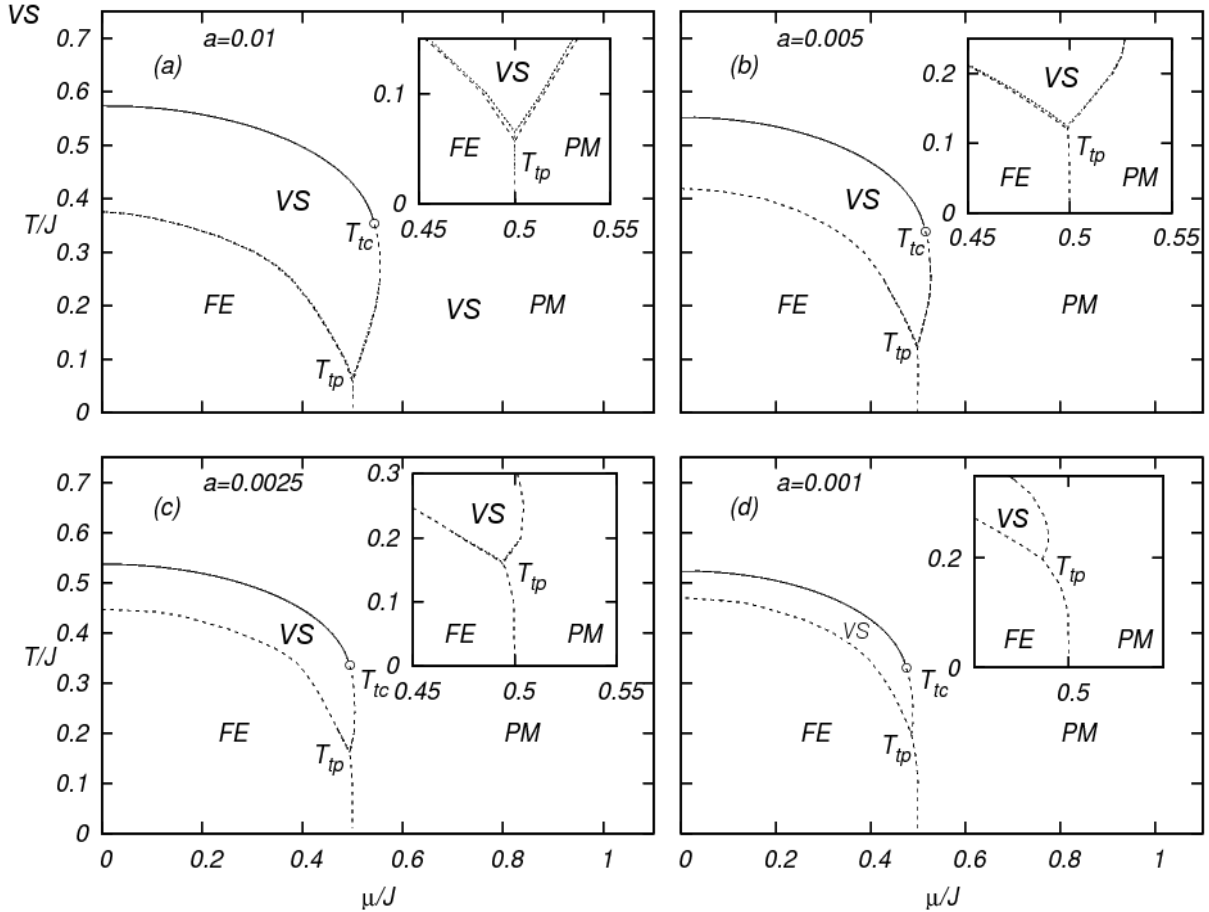


Figura 4.8: Diagramas de fase T/J como uma função de μ/J para valores baixos de a . T_{tc} representa o ponto tricrítico e T_{tp} define o ponto triplo. Linhas tracejadas representam as transições de primeira ordem e as linhas sólidas representam as transições de segunda ordem. Os detalhes nas figuras mostram as vizinhanças do ponto triplo em detalhes. Próximo ao ponto triplo, uma pequena diferença entre os contornos de primeira ordem obtidos por SR (linhas tracejadas) e 1P-QSR (linhas pontilhadas) pode ser vista.

congelamento inverso. Nas Figs. 4.8(b)-(d) também foram escolhidos valores de μ de forma a cruzar $T_{1f}(\mu)$. Os resultados encontrados na figura 4.8(b) são similares aqueles encontrados na figura 4.8(a). Contudo, figura 4.8(c) mostra o comportamento da entropia quando $T_{1f}(\mu)$ e $T_{1c}(\mu)$ são cruzados. O primeiro corte atravessa a linha de transição reentrante $T_{1f}(\mu)$ a qual, de acordo com a figura 4.8(c), apresenta uma transição inversa. O segundo cruzamento em $T_{1c}(\mu)$ resulta em uma transição usual na qual a fase PM é mais entrópica do que a fase FE, como já mostrado no detalhe da figura 4.7(a). Na figura 4.8(d) a reentrância $T_{1f}(\mu)$ é quase suprimida. Logo, para o valor escolhido de μ há somente um cruzamento em $T_{1c}(\mu)$, com o comportamento da entropia sendo semelhante a aquele já encontrado na inserção da figura 4.7(a).

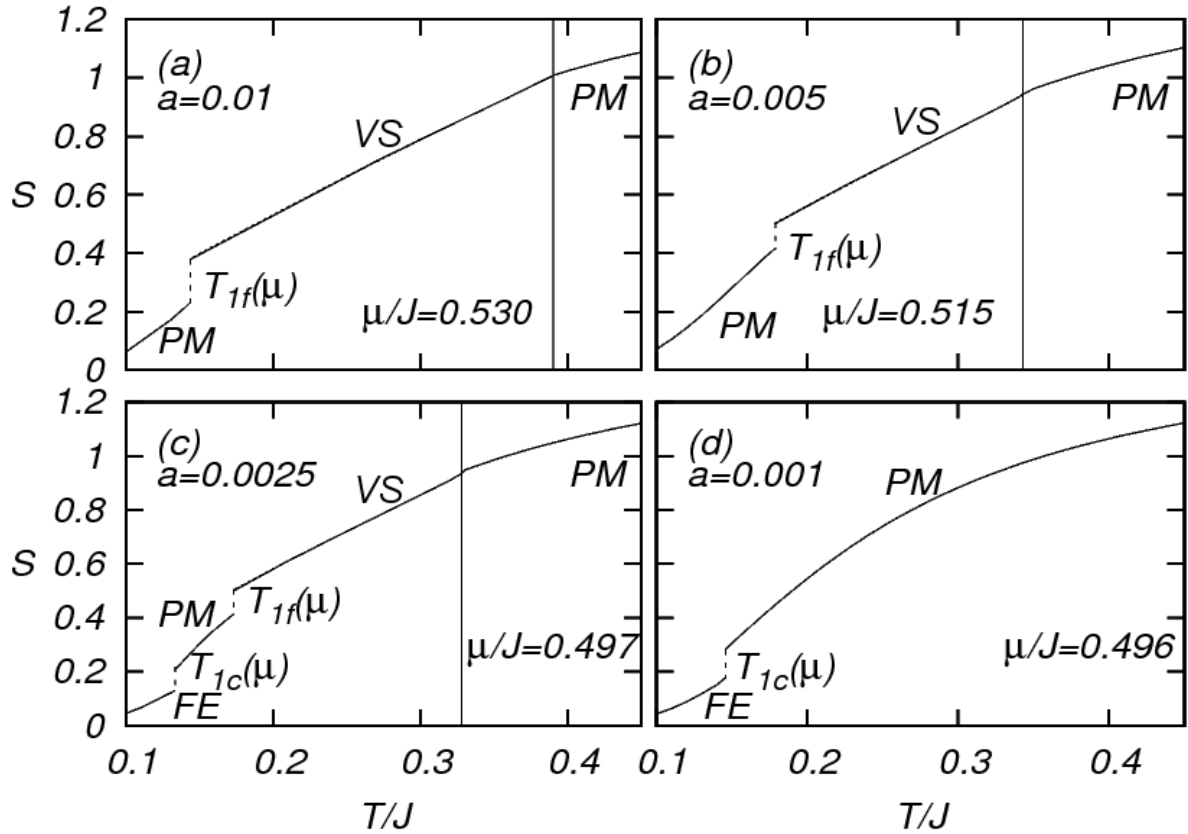


Figura 4.9: Entropia S em função de T/J para diversos valores de a e μ/J . Os rótulos $T_{1c}(\mu)$ e $T_{1f}(\mu)$ indicam as transições de primeira ordem entre as fases FE/PM e VS/PM, respectivamente. As linhas verticais cheias indicam a transição de segunda ordem entre as fases VS e PM.

4.4 Resultados para o modelo HVSIF com $\Gamma > 0$

Nesta seção são feitas considerações relacionadas ao último trabalho da tese de doutoramento, em que é estudado o modelo HVSIF com campo transversal. De acordo com os artigos Phys. Rev. B vol. 77 pág. 134422 (2008) e Phys. Rev. B vol. 81 pág. 014207, tanto o modelo VSIF quanto o modelo HVSIF podem ser utilizados no estudo de transições inversas. No primeiro trabalho (Phys. Rev. B vol. 77 pág. 134422 (2008)), o congelamento inverso foi estudado no modelo VSIF, que é altamente frustrado, com flutuações quânticas sendo introduzidas através de um campo transversal. Os principais resultados deste trabalho indicam que flutuações quânticas atuam de forma a destruir o congelamento inverso. No segundo trabalho (Phys. Rev. B vol. 81 pág. 014207), foi estudado o modelo HVSIF, em que é possível controlar o nível de frustração, com resultados principais indicando que frustração em qualquer nível é capaz de gerar congelamento inverso.

Logo, o último trabalho tem como objetivo investigar o congelamento inverso no modelo HVSIF com campo transversal Γ , o que permite ajustar a intensidade de efeitos quânticos e

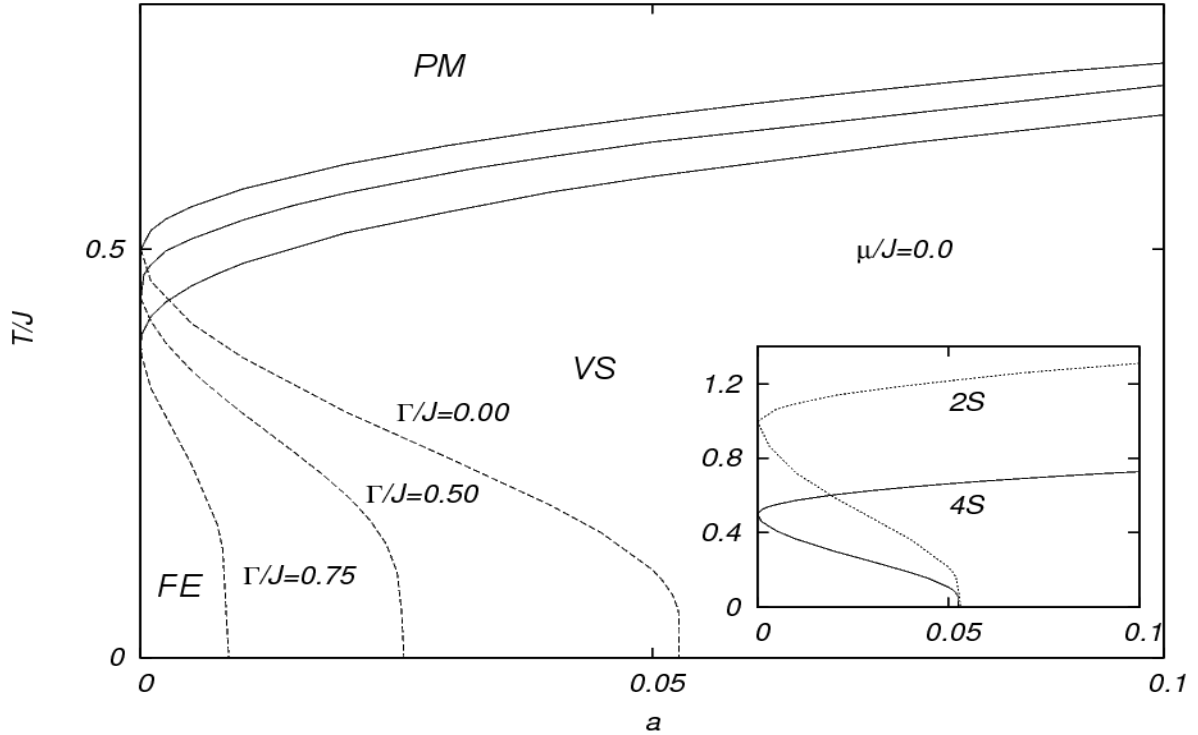


Figura 4.10: Diagramas de fase T/J em função de a para $\mu/J = 0$ com $\Gamma/J = 0, 0.5$ e 0.75 . As linhas cheias indicam a transição de segunda ordem entre as fases VS e PM. Linhas tracejadas indicam a transição de primeira ordem entre as fases VS e FE. A inserção mostra uma comparação entre os resultados obtidos pelos modelos HVSIF 2S e 4S.

nível de frustração de forma simultânea. Primeiramente, resultados para $\mu = 0$ são obtidos. Em seguida, μ é introduzido e o efeito do Γ sobre as transições inversas é estudado.

A figura 4.10 mostra o diagrama de fase T/J como função de a para $\Gamma/J = 0$, $\Gamma/J = 0.5$ e $\Gamma/J = 0.75$ para o modelo 4S no semi-preenchimento ($\mu/J = 0$). Para $\Gamma = 0$ e $a > 0$, há o surgimento de uma transição de segunda ordem T_{2f} entre as fases PM e VS quando T/J diminui. Particularmente, para valores pequenos de a , surge uma transição de primeira ordem T_{1f} entre as fases VS e FE quando T/J decresce ainda mais. Com o aumento de Γ , T_{2f} e T_{1f} decrescem, tal que a fase VS ocupa uma maior parte do diagrama de fase. Particularmente, a fase FE é quase suprimida em $\Gamma/J = 0.75$. A inserção na figura 4.11 exibe uma comparação entre os contornos de fase obtidos pelos modelos HVSIF 2S e 4S com $\mu = 0$ e $\Gamma = 0$. Esta mostra que não há diferença qualitativa entre os contornos de fase obtidos pelos modelos HVSIF 2S e 4S quando $\Gamma = 0$. Contudo, devido aos estados não magnéticos, os contornos T_{2f} e T_{1f} são mais baixos no modelo 4S do que no modelo 2S. Particularmente, o diagrama de fase para modelo com $\Gamma = 0$ é similar aquele já encontrado no modelo Hopfield clássico (AMIT, 1989). É observado também que os efeitos de Γ sobre os contornos de fase encontrados na figura 4.10 são consistentes com aqueles encontrados nas referências Ma et al. e Nishimori e

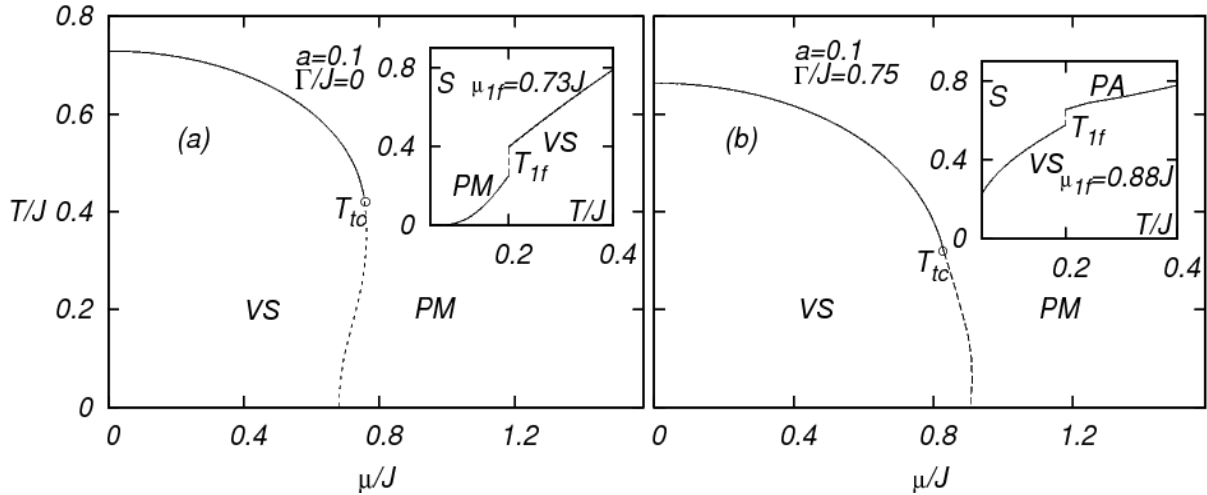


Figura 4.11: Diagramas de fase T/J versus μ/J para $a = 0.1$ com $\Gamma/J = 0$ e $\Gamma/J = 0.75$. T_{tc} indica o ponto tricrítico. As figuras menores mostram o comportamento da entropia S versus T/J para valores μ/J na linha de transição de primeira ordem.

Nonomura.

Na figura 4.11, são mostrados diagramas de fase T/J como função de μ/J para $a = 0.1$ e dois valores de Γ/J ($\Gamma/J = 0$ e $\Gamma/J = 0.75$). Na figura 4.11(a), o caso $\Gamma = 0$ é apresentado. Nesse resultado, a fase PM aparece para valores altos de T/J . Para valores baixos de μ/J , há uma transição de segunda ordem entre as fases VS e PM quando T/J é diminuído. Para valores maiores de μ/J , a transição entre as fases VS e PM se torna de primeira ordem e ocorre o surgimento de um ponto tricrítico T_{tc} . Abaixo de T_{tc} , a transição de primeira ordem apresenta uma reentrância que indica uma transição inversa, a qual é confirmada na inserção da figura 4.11(a), onde a entropia S como uma função de T/J é mostrada. Nessa inserção, é possível observar que a entropia da fase VS é maior do que a entropia da fase PM, confirmando a existência de congelamento inverso. Na figura 4.11(b), é observado o efeito de Γ sobre os contornos de fase. O aumento de Γ decresce T_{2f} e T_{tc} . Além disso, o valor de $\Gamma/J = 0.75$ já é capaz de destruir completamente a reentrância. Como consequência, o congelamento inverso desaparece, como pode ser observado na inserção da figura 4.11(b), onde agora a entropia da fase VS é menor do que a da fase PM. Os resultados mostrados na figura 4.11 são qualitativamente semelhantes a aqueles já obtidos pelo modelo VSIF, que é altamente frustrado (MAGALHAES; MORAIS; ZIMMER, 2008).

A figura 4.12 mostra os diagramas de fase T/J em função de μ/J para pequenos valores de $a = p/N$ e dois valores de Γ/J . A figura 4.12(a) mostra o surgimento de uma fase FE e há o aparecimento de um ponto triplo T_{tp} , onde as fases FE, VS e PM coexistem. A localização de T_{tp} é obtida através da comparação dos potenciais grão canônicos das fases PM, VS e FE e

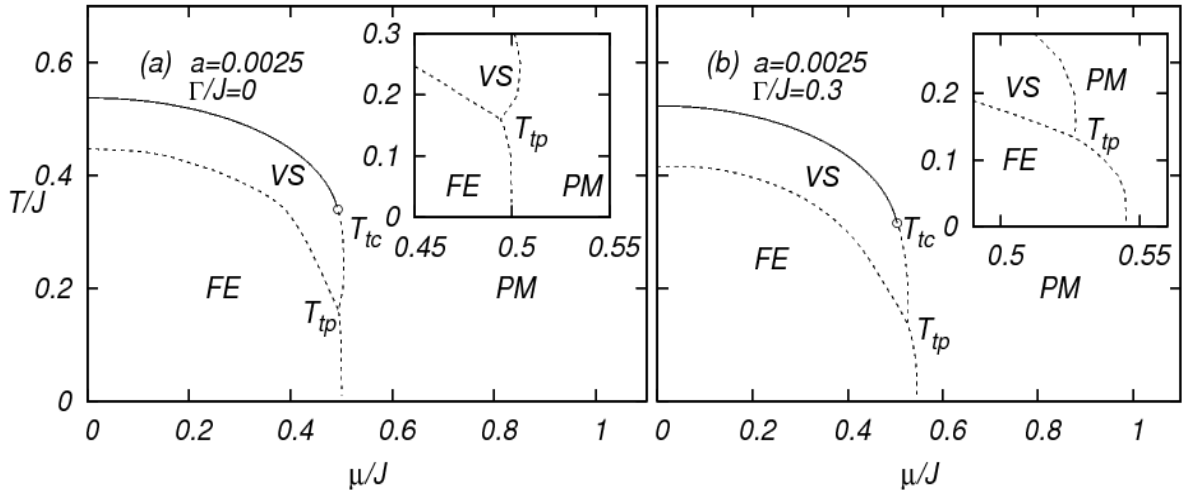


Figura 4.12: Diagramas de fase T/J versus μ/J para $a = 0.0025$ com $\Gamma/J = 0.0$ e $\Gamma/J = 0.3$. T_{tc} e T_{tp} indicam o ponto tricrítico e o ponto triplo, respectivamente. As linhas tracejadas e linhas cheias indicam as transições de primeira e segunda ordem, respectivamente. As figuras menores mostram a localização do ponto triplo em detalhes.

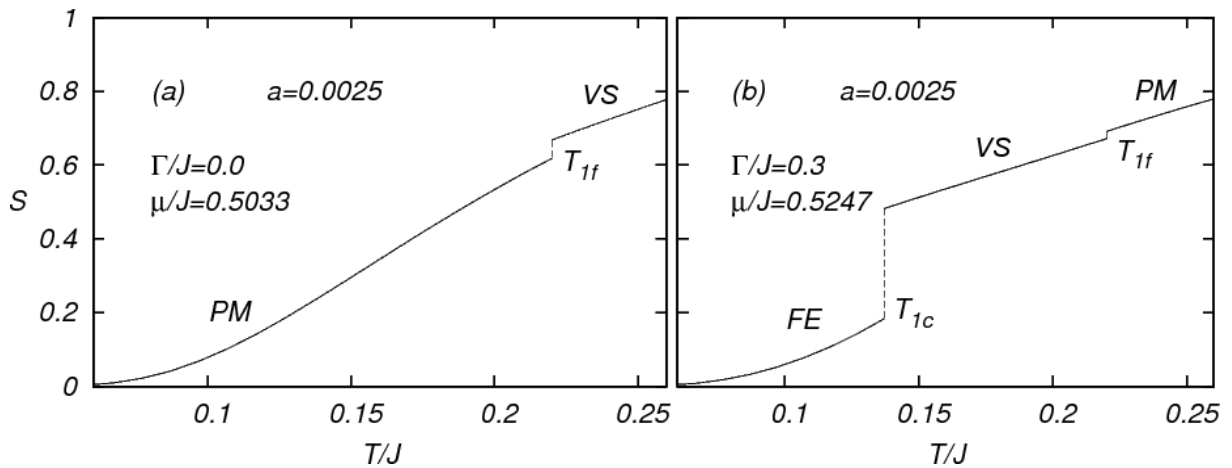


Figura 4.13: Comportamento da entropia S em função de T/J para valores de μ/J na transição de primeira ordem para dois valores de Γ os quais correspondem a $T/J = 0.22$.

é mostrada em detalhes na figura 4.14. A reentrância é quase suprimida, quando comparada ao caso $a = 0.1$. Contudo, ainda há um pequeno intervalo de potencial químico que apresenta reentrância, como pode ser visto na inserção da figura 4.12(a). Esta reentrância indica um congelamento inverso, o qual é confirmado pelo comportamento da entropia como função de T/J na figura 4.13(a), que usa o mesmo nível de frustração e Γ da figura 4.12(a). Na figura 4.13(a), a entropia da fase PM é menor do que a entropia da fase VS. Na figura 4.12(b), é possível analisar como o aumento de Γ/J afeta os contornos de fase para valores pequenos de a . T_{tc} e T_{tp} são diminuídos quando comparados ao caso $\Gamma/J = 0$ e a reentrância entre as fases VS e PM é destruída. Conseqüentemente, não há mais congelamento inverso para $\Gamma/J = 0.3$, como pode ser visto na figura 4.13(b), onde é mostrado que a entropia da fase VS

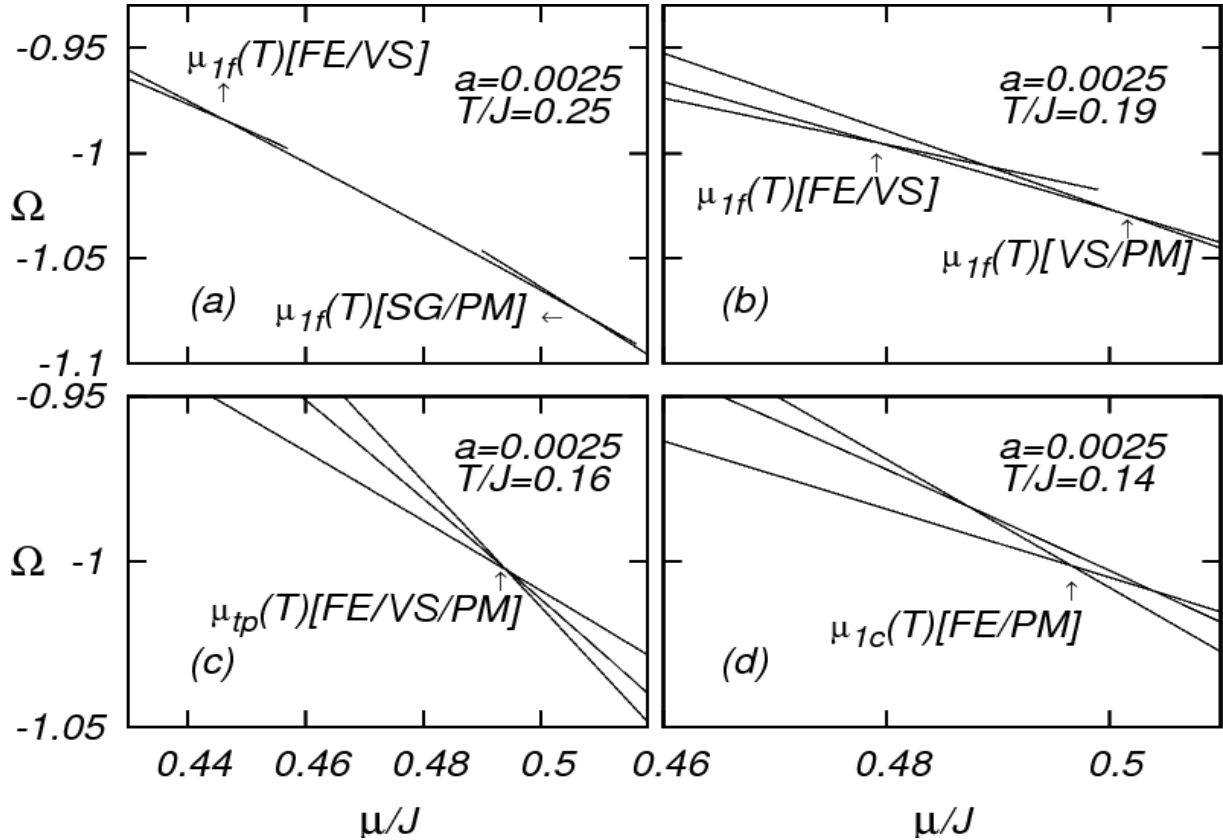


Figura 4.14: Potencial Grão Canônico Ω como uma função de μ/J para $\Gamma = 0$ mostrando em detalhes a localização do ponto triplo.

é menor do que a entropia da fase PM.

O número de ocupação médio n como uma função de μ/J é exibido na figura 4.15 para diversas isotermas, nível de frustração $a = 0.1$ com $\Gamma = 0$ e $\Gamma/J = 0.75$. É observado que o valor de n aumenta com μ . O campo Γ , pelo contrário, decresce n das fases VS e PM. Particularmente, para valores de Γ maiores, mesmo com o aumento de μ , n da fase VS tende a permanecer no semi-preenchimento. Nesse sentido, Γ parece redistribuir carga e isto conduz o sistema a um cenário em que a contribuição dos estados não magnéticos é desfavorecida quando comparado com ao caso $\Gamma = 0$, principalmente em baixas temperaturas. De fato, o decréscimo de n devido ao Γ não assegura que os estados não magnéticos sejam evitados. Todavia, resultados da Ref. Theumann, Schmidt e Magalhaes (2002) mostram que no semi-preenchimento as linhas de transição obtidas com e sem restrição dos estados não magnéticos se tornam próximas umas das outras quando Γ aumenta. Isto pode evidenciar uma situação em que os estados não magnéticos não são relevantes para valores altos de Γ e valores baixos de T/J . O comportamento de n para $a = 0.1$ é similar a aqueles encontrados na Ref. Magalhaes, Zimmer e Morais (2009), onde é estudado um modelo fermiônico altamente frustrado do tipo SK.

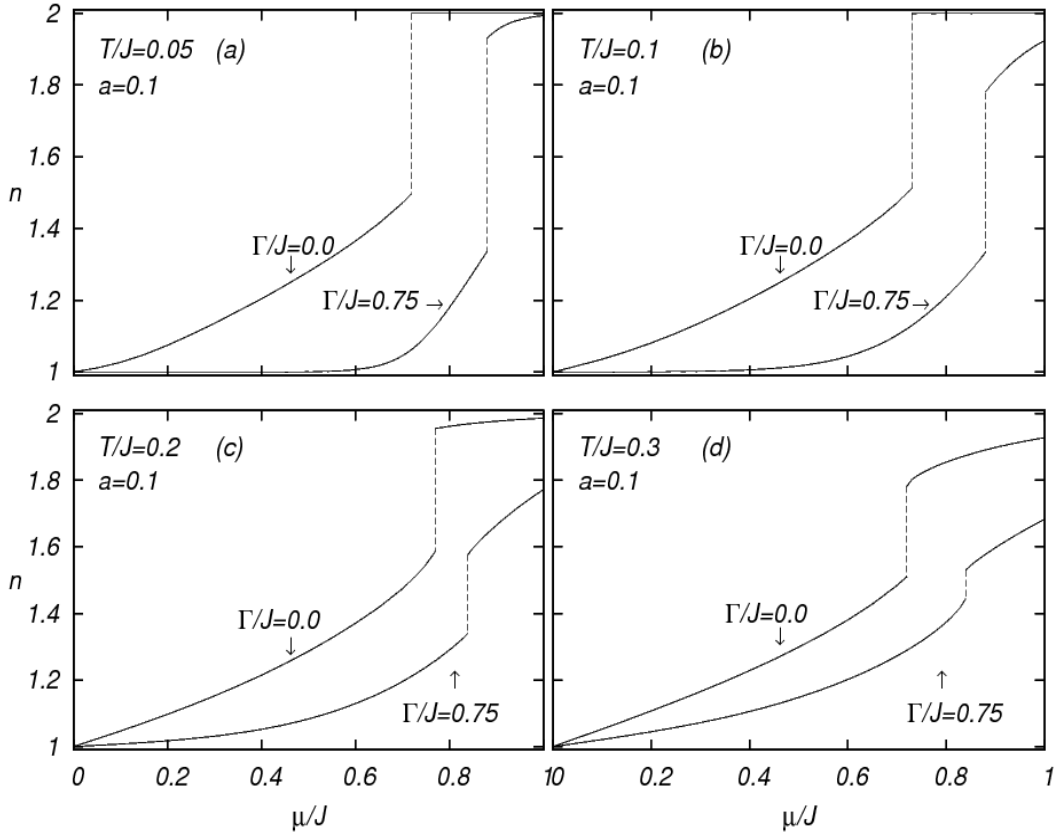


Figura 4.15: Comportamento do número de ocupação médio n como uma função de μ/J para valores de T/J na transição de primeira ordem para dois valores de Γ e $a = 0.1$. As linhas verticais indicam um transição de primeira ordem entre as fase VS e PM.

A figura 4.16 ilustra o comportamento de n para um valor pequeno de frustração ($a = 0.0025$) com $\Gamma = 0$ e $\Gamma/J = 0.3$. As Figs. 4.16(a)-(d) mostram que a fase FE tende a preservar o semi-preenchimento mesmo quando μ aumenta e especialmente para valores baixos de T/J . Isto indica uma situação em que a contribuição dos estados não magnéticos não é relevante nesta fase. Por essa razão, a intensificação de Γ não tem efeito significativo sobre n na fase FE. As Figs. 4.16(c)-(d) mostra que somente as ocupações das fases VS e PM são significativamente afetadas pela introdução de Γ/J . Para o nível de frustração $a = 0.0025$, o valor de $\Gamma = 0.3J$ reduz n das fases VS e PM o bastante para destruir o congelamento inverso. Por outro lado, independentemente do valor de Γ , não há transição inversa entre as fases FE e PM ou VS. Isto sugere que para produzir uma transição inversa, a fase mais ordenada deve apresentar um n com o balanço necessário de estados magnéticos (um férmion por sítio) e não magnéticos (dois férmions por sítio ou vazio). Em adição, a fase menos ordenada deve apresentar um n com alta densidade de estados não magnéticos. De fato, é observado que estas condições são satisfeitas na transição de primeira ordem entre as fases VS e PM para o caso $\Gamma = 0$. O aumento de Γ sugere uma situação em que a contribuição

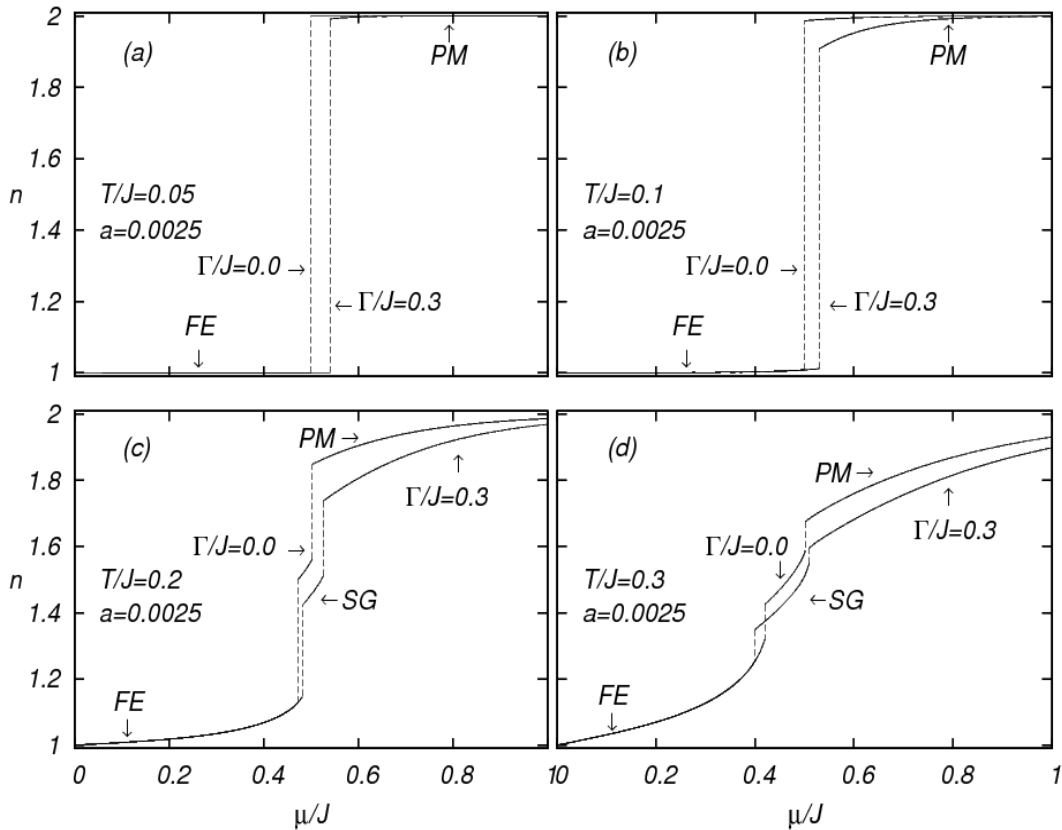


Figura 4.16: Comportamento do número de ocupação médio n como uma função de μ/J para valores de T/J na transição de primeira ordem para dois valores de Γ e $a = 0.0025$. Nos painéis (a)-(b), as linhas verticais indicam uma transição de primeira ordem entre as fases FE e PM. Nos painéis (c)-(d), as linhas verticais a esquerda e a direita indicam as transições de primeira ordem FE/VS e VS/PM, respectivamente.

dos estados não magnéticos parece ser reduzida nas fases VS (a fase mais ordenada) e PM. Portanto, não somente o balanço entre estados magnéticos e não magnéticos na fase VS é afetado quando Γ aumenta, mas também ocorre o decréscimo na densidade de estados não magnéticos na fase PM. Como uma consequência, o congelamento inverso desaparece. A questão do balanço poderia explicar também por que não são encontradas transições inversas entre as fases FE e PM ou VS. Essencialmente, a contribuição dos estados não magnéticos na fase FE não é relevante e esta fase (que é mais ordenada que as fases VS e PM) não tem o balanço necessário entre estados magnéticos e não magnéticos. Portanto, estas não apresentam transições inversas.

A figura 4.17 mostra n como uma função de T/J para $a = 0.1$ com $\Gamma = 0.0, 0.75$ e $a = 0.0025$ com $\Gamma = 0.0, 0.3$. Os valores de μ são escolhidos de forma a interceptar as transições de primeira ordem. Em níveis de frustração muito altos ($a=0.1$) e $\Gamma = 0$, a figura 4.17(a) mostra que a fase PM em T/J baixo apresenta um n alto (o que indica uma alta densidade de dupla ocupação de férmions por sítio). Aumentando T/J , a fase PM é

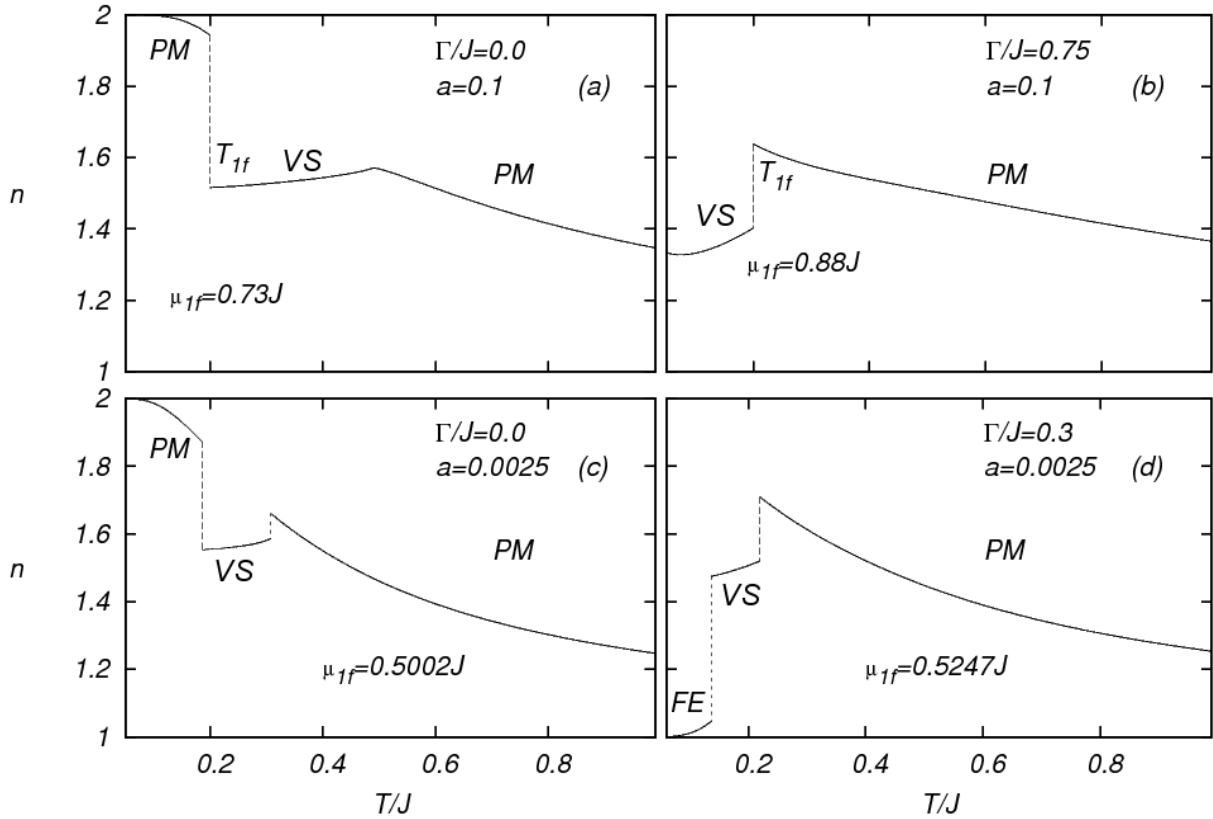


Figura 4.17: Comportamento do número de ocupação médio de férmions por sítio n como função de T/J para valores de μ/J em transições de primeira ordem para dois valores de Γ e dois valores de $a = p/N$. As linhas verticais indicam uma transição de primeira ordem.

substituída em uma transição inversa de primeira ordem por uma fase VS com um valor intermediário de n . Quando T/J é aumentado continuamente, ocorre uma nova transição, agora de segunda ordem, entre as fases VS e PM, com a última apresentando também um valor intermediário de n . De fato, é observado que a fase PM em T/J baixo (a qual está envolvida na transição inversa) apresenta um n maior em relação ao da fase PM em T/J alto. Este resultado indica a diferença na natureza das fases PM em T/J alto e baixo. A figura 4.17(b) mostra que n das fases VS e PM (para alto T/J) decrescem quando Γ é aumentado. Além disso, a fase PM em T/J baixo é suprimida. Consequentemente, o congelamento inverso desaparece. Em nível de frustração baixo ($a = 0.0025$) para $\Gamma = 0$, a figura 4.17(c) mostra o mesmo comportamento qualitativo encontrado na figura 4.17(a) e também apresenta congelamento inverso. Na figura 4.17(d), a fase PM em T/J baixo é substituída pela fase FE através do aumento de Γ . Este caso não apresenta transição inversa.

5 CONSIDERAÇÕES FINAIS

Neste trabalho, dois modelos foram empregados para o estudo do congelamento inverso em sistemas vidro de spin: o modelo VSIF, em que a variável aleatória é uma distribuição de probabilidade Gaussiana e o modelo HVSIF, que introduz a variável $a = p/N$ que permite ajustar o nível de frustração. Em ambos os casos, a formulação fermiônica no ensemble grão canônico é utilizada, pois permite analisar o problema vidro de spin mediante flutuações no número médio de ocupação por sítio controladas pelo potencial químico μ . Devido a esta formulação, o formalismo de integrais funcionais (NEGELE; ORLAND, 1988) foi utilizado para o cálculo da função de partição.

O modelo VSIF no ensemble grão canônico com campo transversal Γ (MAGALHAES; MORAIS; ZIMMER, 2008) foi primeiramente escolhido para estudar o congelamento inverso por apresentar, quando $\Gamma = 0$, uma estreita relação com o modelo GS, já utilizado no estudo de transições inversas. Com isso, resultados do modelo VSIF para $\Gamma = 0$ foram obtidos e mostraram claramente o surgimento de uma reentrância para altos valores de μ . Nesse caso, a análise da entropia em função de T mostra que, na região de reentrância, a fase PM tem entropia menor do que a fase VS, indicando que o modelo VSIF também apresenta congelamento inverso sem a necessidade de qualquer parâmetro adicional, o que comprova sua validade para o estudo de transições inversas. Além disso, a transição inversa obtida por meio da solução com SR é verificada através da comparação com a solução com 1P-QSR. Essencialmente, é constatado que não há diferença significativa entre as reentrâncias obtidas pelas soluções com SR e com 1P-QSR.

Já a inclusão do campo magnético transversal Γ no VSIF permitiu a análise do papel das flutuações quânticas nessa espécie de transição. Além disso, esse modelo permitiu recuperar os resultados obtidos por Theumann, Schmidt e Magalhaes (2002), em que o aumento de Γ diminui a temperatura de congelamento até o ponto crítico quântico (PCQ), quando o potencial químico é nulo ($\mu = 0$). Nos diagramas de fase T/J vs μ/J é mostrado que um Γ não nulo tem forte influência sobre todos os contornos de fase. O aumento do Γ faz com que as temperaturas de transição de segunda ordem e tricrítica decresçam. Como consequência, as linhas de primeira ordem aparecem em um intervalo de temperatura menor. Devido a esse efeito, as reentrâncias que indicavam o congelamento inverso vão sendo suprimidas, e para um dado valor de Γ , são totalmente destruídas. Para explicar este comportamento, foi

sugerido que Γ age no sentido de redistribuir a ocupação de carga, principalmente em baixas temperaturas. Esta afirmação é confirmada em um dos resultados publicados por Magalhaes, Zimmer e Morais (2009), em que é observado o comportamento do número de ocupação médio de férmions n em função de μ para várias isotermas e valores de Γ . Neste resultado, é mostrado que a presença do Γ tende a preservar o semi-preenchimento, em que o número de ocupação médio é igual a um férmion por sítio, comportamento este que é acentuado pelo decréscimo da temperatura. Logo, a redistribuição de carga, proveniente do aumento do Γ , atua no sentido de evitar a ocupação dos estados não magnéticos, principalmente em baixas temperaturas. Esse trabalho intitulado “Role of the transverse field in inverse freezing in the fermionic Ising spin-glass model” foi publicado na revista *physical review B*, vol. 77 134422 (MAGALHAES; MORAIS; ZIMMER, 2008).

No segundo trabalho, foi estudado o modelo HVSIF no ensemble Grão Canônico sem campo transversal, que utiliza o acoplamento $J_{ij} = J/2N \sum_{\mu=1}^p \xi_i^\mu \xi_j^\mu$ no lugar da distribuição de probabilidade Gaussiana usada no modelo VSIF. O uso deste novo acoplamento possibilitou o ajuste do nível de frustração a fim de verificar não somente a existência de congelamento inverso nos limites de desordem trivial e alta frustração, como também permitiu a análise do comportamento das transições de fases para valores intermediários de frustração. Com isso, a comparação dos diversos níveis de $a = p/N$ pode esclarecer a relação entre o papel da frustração e a produção natural de congelamento inverso. Para valores altos de $a = p/N$, há o surgimento de congelamento inverso nas transições de primeira ordem entre as fases PM e VS. Para valores baixos de $a = p/N$, uma fase FE aparece. Contudo, não ocorrem transições inversas entre as fases FE e PM ou VS. Em adição, a transição inversa entre as fases PM e VS é gradualmente enfraquecida com o decréscimo de a , até desaparecer totalmente para o caso $a = 0$. Contudo, verifica-se que há sempre uma transição inversa entre as fases VS e PM, independentemente do nível de frustração. Isto sugere que frustração, em qualquer nível, é a condição necessária para o surgimento de congelamento inverso natural. Esse trabalho intitulado “Inverse freezing in the Hopfield fermionic Ising spin glass” foi publicado na revista *physical review B*, vol. 81 014207, (MAGALHAES; MORAIS; ZIMMER, 2010).

No último trabalho, o modelo HVSIF com campo transversal Γ foi estudado. Nesse trabalho, o modelo HVSIF foi apresentado em duas versões: Modelos 2S e 4S. Em ambas as versões, os cálculos de campo médio foram realizados usando a aproximação estática e a solução 1P-QSR. O parâmetro $a = p/N$ que controla o nível de frustração é introduzido nesse modelo a partir do tratamento da desordem. Particularmente, o modelo 4S foi estudado

no ensemble grão canônico. Como uma consequência, os efeitos da diluição puderam ser introduzidos com a presença do potencial químico μ , que altera o número de ocupação médio n de férmions por sítio. Isso permitiu estudar o congelamento inverso em diversos regimes de frustração e valores de Γ . Os resultados numéricos foram mostrados na forma de diversos diagramas de fase T/J como função de $a = p/N$ e T/J como função de μ/J . O comportamento da entropia e do número de ocupação médio também foram obtidos.

Em resumo, os resultados apresentados nesse último trabalho podem ser separados em duas partes. Na primeira, é mostrado que o modelo HVSIF recupera os resultados do modelo Hopfield clássico. Além disso, o modelo HVSIF com Γ para $\mu = 0$ produz resultados que são qualitativamente os mesmos daqueles apresentados em modelos Hopfield quânticos (Refs. Ma et al. (1993) e Nishimori e Nonomura (1996)). Nesses, a fase FE, que surge para valores pequenos de $a = p/N$, ocupa um espaço menor no diagrama de fases devido ao aumento do Γ e as temperaturas de transição de primeira e segunda ordens são diminuídas, indicando que mesmo para valores pequenos de $a = p/N$, pode haver o desaparecimento da fase FE para altos valores de Γ .

Na segunda parte, o congelamento inverso foi estudado com a introdução dos efeitos de diluição providenciados pelo μ no modelo HVSIF 4S. Este estudo mostra que regimes de frustração diferentes apresentam congelamento inverso entre as fases VS e PM em níveis de diluição altos. Por outro lado, não é observado transições inversas entre as fases FE e PM mesmo em níveis de diluição altos. De fato, a interação entre diluição e a presença de uma fase frustrada parece ser a condição necessária para a obtenção de congelamento inverso. Além disso, quando os efeitos de flutuações quânticas são introduzidos por Γ , o papel da diluição parece ser enfraquecido. Como consequência, o congelamento inverso entre as fases VS e PM é destruída. Este resultado é independente do nível de frustração.

Para clarificar estes pontos, o número de ocupação n foi obtido. Como resultado principal, é observado que nas transições inversas, a fase mais ordenada deve apresentar um n com um balanço populacional entre estados magnéticos e não magnéticos. Além disso, a fase menos ordenada deve também apresentar um n com alta densidade de estados não magnéticos. Por essa razão, há transição inversa entre as fases VS e PM. Por outro lado, Γ decresce n das fases VS e PM, destruindo o balanço populacional na fase VS e decrescendo a densidade de estados não magnéticos na fase PM. Como uma consequência, a transição inversa entre estas fases desaparece. Em adição, não há transições inversas entre as fases FE e PM ou VS, justamente por que na transição entre essas fases, pelo menos uma das condições

anteriormente citadas não é satisfeita. Por exemplo, na transição de primeira ordem FE/PM, apesar da fase PM apresentar alta densidade de estados não magnéticos, a fase FE se encontra no semi-preenchimento.

A partir da complexidade envolvida nas transições inversas, é natural que o estudo dessa espécie de transição seja continuado em trabalhos posteriores. Como proposta inicial de trabalho posterior, uma versão fermiônica do modelo GS será estudada, o que permitirá avaliar a influência do potencial químico e do parâmetro anisotrópico simultaneamente.

A Cálculo do ponto tricrítico no modelo VSIF com campo transversal

Quando a solução com SR é recuperada ($q_0 = q_1(\equiv q)$), a análise da estabilidade desta solução pode ser usada para localizar o ponto tricrítico (T_{tc}, μ_{tc}) no modelo VSIF (Ref. da Costa, Yokoi e Salinas (1994)). Na solução PM ($q = 0$), a condição para que todos os autovalores da matriz Hessiana sejam positivos é

$$\bar{q} < \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2}\beta J} & \text{para } T/J > T_{tc}/J \\ \frac{f_\phi(T, \Gamma, \bar{q}) - \sqrt{f_\phi(T, \Gamma, \bar{q}) - 4/(\beta J)^2}}{2} & \text{para } T/J < T_{tc}/J. \end{cases} \quad (\text{A.1})$$

Na equação (A.1), a temperatura tricrítica T_{tc} é dada por

$$T_{tc}/J = \frac{1}{3}\sqrt{2}f_{T_{tc}}(T_{tc}, \Gamma), \quad (\text{A.2})$$

com

$$f_\phi(T, \Gamma, \bar{q}) = \frac{\int Dw \left(\frac{\eta_\phi \cosh \sqrt{\bar{\Delta}_\phi}}{\bar{\Delta}_\phi^2} + \frac{3(\beta\Gamma)^2 \kappa_\phi \sinh \sqrt{\bar{\Delta}_\phi}}{\bar{\Delta}_\phi^{5/2}} \right)}{\int Dw \left(\frac{\bar{h}_\phi^2 \cosh \sqrt{\bar{\Delta}_\phi}}{\bar{\Delta}_\phi} + \frac{(\beta\Gamma)^2 \sinh \sqrt{\bar{\Delta}_\phi}}{\bar{\Delta}_\phi^{3/2}} \right)} \quad (\text{A.3})$$

em que

$$\eta_\phi = \bar{h}_\phi^4 + 3(\beta\Gamma)^2 [1 - 5(\bar{h}_\phi^2/\bar{\Delta}_\phi)], \quad (\text{A.4})$$

$$\kappa_\phi = 2\bar{h}_\phi^2 - 1 + 5(\bar{h}_\phi^2/\bar{\Delta}_\phi) \quad (\text{A.5})$$

e

$$\bar{\Delta}_\phi = \bar{h}_\phi^2 + (\beta\Gamma)^2, \quad \bar{h}_\phi = \beta J \sqrt{2\bar{q}}\xi. \quad (\text{A.6})$$

Na equação (A.2), $f_{T_{tc}}(T_{tc}, \Gamma)$ é dada a partir da equação (A.3), quando $\phi = T_{tc}$ e $\bar{q} = 1/(\sqrt{2}\beta J)$, a qual resulta em $\bar{h}_{T_{tc}} = \sqrt{\sqrt{2}\beta J}\xi$. Além disso, não há mais solução PM estável se

$$\mu < \begin{cases} \mu_{at}(T, \Gamma) & \text{para } T/J > T_{tc}/J \\ \mu_-(T, \Gamma) & \text{para } T/J < T_{tc}/J. \end{cases} \quad (\text{A.7})$$

Os valores de μ_{at} e μ_- apresentados na equação (A.7) são obtidos a partir da equação

$$\mu_\varphi(T, \Gamma, \bar{q}) = \frac{1}{\beta} \cosh^{-1} \int D\xi [v_\phi \cosh \sqrt{\bar{\Delta}_\phi} + u_\phi \sinh \sqrt{\bar{\Delta}_\phi}], \quad (\text{A.8})$$

em que

$$v_\phi = \bar{h}_\phi^2/(\bar{q}\bar{\Delta}_\phi) - 1, \quad u_\phi = (\beta\Gamma)^2/(\bar{q}\bar{\Delta}_\phi^{3/2}), \quad (\text{A.9})$$

com $\bar{\Delta}_\phi$ e \bar{h}_ϕ definidos na equação (A.6).

Na equação (A.8), quando $\varphi = at$, \bar{q} assume o valor

$$\bar{q} = 1/(\sqrt{2}\beta J), \quad (\text{A.10})$$

e quando $\varphi = -$, temos que

$$\bar{q} = [f_\phi(T, \Gamma, \bar{q}) - \sqrt{f_\phi(T, \Gamma, \bar{q}) - 4/(\beta J)^2}]/2. \quad (\text{A.11})$$

Na equação (A.7), μ_{at} define a linha de transição de segunda ordem $T_{2f}(\mu)$ e μ_- marca a linha espinodal paramagnética. O valor de $\mu_{T_{tc}}$ é obtido através da introdução de T_{tc} na equação (A.8) para μ_{at} .

B Cálculo do ponto tricrítico no Modelo HVSIF sem campo transversal

Este apêndice apresenta o procedimento para obter o ponto tricrítico (μ_{tc}, T_{tc}) no modelo Hopfield para os casos $a = 0$ e $a > 0$. Para $a = 0$, a expansão de Landau do potencial Grão Canônico, equação (3.177), em potências de m resulta em

$$\beta\Omega(m) = A_0 + A_2m^2 + A_4m^4 + A_6m^6 + \dots \quad (\text{B.1})$$

com

$$A_2 = \frac{\beta J}{2} \left[1 - \frac{\beta J}{1 + \cosh(\beta\mu)} \right], \quad (\text{B.2})$$

e

$$A_4 = \beta^4 J^4 [2 - \cosh(\beta\mu)] \text{sech}[(\beta\mu)/2]^4 / 96. \quad (\text{B.3})$$

O ponto tricrítico é obtido quando $A_2 = A_4 = 0$. A posição de T_{2c} na figura 4.7(a) para $\mu = 0$ pode ser verificada a partir da equação $A_2 = 0$.

Para $a > 0$, a transição entre as fases PM e VS é investigada. Neste caso, é assumido que essencialmente não há diferença entre as soluções com SR e 1P-QSR no que diz respeito

a localização do ponto tricrítico (CRISANTI; LEUZZI, 2005). Portanto, para o cálculo do ponto tricrítico, o Potencial Grão Canônico dentro da solução SR ($q \equiv q_1 = q_0$, $r \equiv r_1 = r_0$) é escrito explicitamente como uma função dos parâmetros de ordem r e \bar{r} , e com $m = 0$:

$$\beta\Omega = -\beta\mu + \frac{a}{2}[\beta J\bar{r} - \frac{r}{r-\bar{r}} - \ln(\bar{r}-r)] - \int Dz \times \ln[\cosh \beta\mu + e^{[\frac{\beta^2 J^2 a}{2}(\bar{r}-r) - \frac{\beta J a}{2}]} \cosh \beta J \sqrt{ar} z] \quad (\text{B.4})$$

onde r and \bar{r} são dados pelas Eqs. (3.160) e (3.161), respectivamente.

A equação (B.4) é expressa como uma expansão em potências de r , o qual está relacionado com o parâmetro de ordem VS. Portanto,

$$\beta\Omega = \sum_{i=1}^4 f_i(\bar{r}, \mu, T, a) r^i \quad (\text{B.5})$$

onde $\bar{r}(r, \mu, T, a)$ é obtido a partir da solução ponto de sela de Ω . Neste caso, $\bar{r}(r, \mu, T, a)$ também pode ser escrito na forma de uma série

$$\bar{r} = \bar{r}_0 + \bar{r}_1 r + \bar{r}_2 r^2 \quad (\text{B.6})$$

em que $\bar{r}_1 = 0$ e

$$\bar{r}_0 = [\beta J(1 - \beta J X_0)]^{-1}, \quad (\text{B.7})$$

$$\bar{r}_2 = -\frac{2 + \beta^6 J^6 a^2 \bar{r}_0^3 X_0^2 (1 - X_0)}{\bar{r}_0 [2 - \beta^4 J^4 a \bar{r}_0^2 X_0 (1 - X_0)]}, \quad (\text{B.8})$$

com

$$X_0 = \frac{\exp(\frac{\beta^2 J^2 a \bar{r}_0}{2})}{e^{\beta J a/2} \cosh \beta\mu + \exp(\frac{\beta^2 J^2 a \bar{r}_0}{2})}. \quad (\text{B.9})$$

Agora a equação (B.6) é introduzida nos coeficientes da expressão (B.5), os quais são expandidos novamente em potências de r . A equação resultante é então expressa em potências do parâmetro de ordem vidro de spin q através da expansão de r :

$$\beta\Omega = F_0 + \frac{F_2 q^2}{(1 - \beta J \bar{q}_0)^4} + \frac{F_3 q^3}{(1 - \beta J \bar{q}_0)^6} + \frac{F_4 q^4}{(1 - \beta J \bar{q}_0)^8} \quad (\text{B.10})$$

com

$$F_2 = \frac{a}{4}(\beta^4 J^4 a X_0^2 - \frac{1}{\bar{r}_0^2}), \quad (\text{B.11})$$

$$F_3 = \frac{a}{3}(\beta^6 J^6 a^2 X_0^3 + \frac{1}{\bar{r}_0^3}) \quad (\text{B.12})$$

e

$$\begin{aligned} F_4 = \frac{a}{4} \{ & \frac{\beta^4 J^4 a^2 \bar{r}_2}{2} (X_0 - X_0^2) (\bar{r}_2 + 2\beta^2 J^2 a X_0) \\ & + \frac{\beta^8 J^8 a^3 X_0^2}{12} (45X_0^2 - 12X_0 + 1) \} \\ & - \frac{1}{\bar{r}_0^4} [(\bar{r}_0 \bar{r}_2 - 1)^2 + \frac{1}{2}] - 6\beta J (1 - \beta J \bar{q}_0) F_3 \end{aligned} \quad (\text{B.13})$$

em que $\bar{q}_0 = 1/[\beta J(1 + \sqrt{a})]$. A transição de segunda ordem entre as fases PM e VS ocorre quando $F_2 = 0$ e $F_4 > 0$. O ponto tricrítico é localizado quando $F_2 = 0$ e $F_4 = 0$. Em particular, pode-se usar a condição $F_2 = 0$ em conjunto com as Eqs. (B7) e (B9) para obtenção da temperatura crítica T_{2f} através do cálculo de

$$\cosh \beta_{2f} \mu = \exp\left(\frac{J\beta_{2f}\sqrt{a}}{2}\right) [J\beta_{2f}(1 + \sqrt{a}) - 1] \quad (\text{B.14})$$

onde $\beta_{2f} = 1/T_{2f}$.

Referências Bibliográficas

- AMIT, D. J. *Modellin Brain Function. The world of Attractor Neural Networks*. Cambridge, England: Cambridge University Press, 1989.
- BINDER, K.; YOUNG, A. P. Spin glass: Experimental facts, theoretical concepts, and open questions. *Review of Modern Physics*, v. 58, p. 801–927, Out. 1986.
- BLUME, M. Theory of the first-order magnetic phase change in UO_2 . *Phys. Rev.*, American Physical Society, v. 141, p. 517–524, Jan 1966.
- CAPEL, H. On the possibility of first-order phase transitions in Ising systems of triplet ions with zero-field splitting. *Physica*, v. 32, p. 966 – 988, 1966. ISSN 0031-8914.
- CHEVILLARD, C.; AXELOS, M. A. V. Phase separation of aqueous solution of methylcellulose. *Colloid and Polymer Science*, v. 275, p. 537–545, 1997.
- CRISANTI, A.; LEUZZI, L. Stable solution of the simplest spin model for inverse freezing. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 95, p. 087201, Aug 2005.
- da Costa, F. A.; YOKOI, C. S. O.; SALINAS, S. R. A. First-order transition in a spin-glass model. *J. of Phys. A: Math. and Gen.*, v. 27, p. 3365–3372, 1994.
- ERTAS, D.; NELSON, D. R. Irreversibility, mechanical entanglement and thermal melting in superconducting vortex crystals with point impurities. *Physica C: Superconductivity*, v. 272, p. 79 – 86, 1996. ISSN 0921-4534.
- FELDMANN, H.; OPPERMANN, R. Replica symmetry breaking solution for the fermionic Ising spin glass and the Ghatak-Sherrington model. *Cond-Mat*, Out. 1999.
- FISCHER, K. H.; HERTZ, J. A. *Spin Glasses*. EUA: Oxford, 1991.
- GHATAK, S. K.; SHERRINGTON, D. Crystal field effects in a general S Ising spin glass. *J. Phys. C: Solid State*, Institut Laue Langevin, 156X, France, Fev. 1977.
- MA, Y. qiang et al. Statistical mechanics of a Hopfield neural-network model in a transverse field. *Phys. Rev. E*, American Physical Society, v. 47, p. 3985–3987, Jun 1993.

MAGALHAES, S. G.; MORAIS, C. V.; ZIMMER, F. M. Role of the transverse field in inverse freezing in the fermionic ising spin-glass model. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 77, p. 134422, Apr 2008.

MAGALHAES, S. G.; MORAIS, C. V.; ZIMMER, F. M. Inverse freezing in the hopfield fermionic ising spin glass. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 81, p. 014207, Jan 2010.

MAGALHAES, S. G.; ZIMMER, F. M.; MORAIS, C. V. Stability conditions for fermionic ising spin-glass models in the presence of a transverse field. *Physica A*, v. 388, p. 2140 – 2148, 2009.

MAGALHAES, S. G.; ZIMMER, F. M.; MORAIS, C. V. Fermionic van hemmen spin glass model with a transverse field. *Physics Letters A*, v. 374, p. 3554–3560, 2010.

MISHIMA, O.; STANLEY, H. E. Decompression-induced melting of ice iv and the liquid-liquid transition in water. *Nature*, v. 392, p. 164–168, 1998.

NEGELE, J. W.; ORLAND, H. *Quantum Many-Particle Systems*. Department of Physics, Massachusetts Institute of Technology: Addison-Wesley Publishing Company, 1988.

NISHIMORI, H. *Statistical Physics of Spin Glass and Information Processing, An introduction*. Department of Physics, Tokyo Institute of Technology: Clarendon Press, Oxford, 2001.

NISHIMORI, H.; NONOMURA, Y. Quantum effects in neural networks. *Journal of the Physical Society of Japan*, The Physical Society of Japan, v. 65, p. 3780–3796, 1996.

PARISI, G. The order parameter for spin glasses: a function on the interval 0-1. *J. of Phys. A: Math. and Gen.*, v. 13, p. 1101–1112, 1980.

ROSENOW, B.; OPPERMANN, R. Tricritical behavior of ising spin glasses with charge fluctuations. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 77, p. 1608–1611, Aug 1996.

SCHUPPER, N.; SHNERB, N. M. Inverse melting and inverse freezing: A spin model. *Phys. Rev. E*, American Physical Society, v. 72, p. 046107, Oct. 2005.

SHERRINGTON, D.; KIRKPATRICK, S. Infinite-ranged models of spin-glasses. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 17, p. 4384–4403, Jun. 1978.

THEUMANN, A.; Gusmão, V. Quantum ising spin-glass. *Physics Letters A*, v. 105, p. 311 – 314, 1984.

THEUMANN, A.; SCHMIDT, A. A.; MAGALHAES, S. G. The ising spin glass in a transverse field revisited. results of two fermionic models. *Physica A*, v. 311, p. 498 – 506, 2002.

WU, W. et al. From classical to quantum glass. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 67, p. 2076–2079, Oct. 1991.